



# Contribution à l'amélioration des données nucléaires neutroniques du sodium pour le calcul des réacteurs de génération IV

Pascal Archier

► **To cite this version:**

Pascal Archier. Contribution à l'amélioration des données nucléaires neutroniques du sodium pour le calcul des réacteurs de génération IV. Autre. Université Grenoble Alpes, 2011. Français. <NNT : 2011GRENI065>. <tel-00680781>

**HAL Id: tel-00680781**

**<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00680781>**

Submitted on 20 Mar 2012

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**THÈSE**

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE**

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

Arrêté ministériel : 7 Août 2006

Présentée par

**Pascal ARCHIER**

Thèse dirigée par **Elsa MERLE-LUCOTTE**

et codirigée par **Jean TOMMASI**

préparée au sein **Laboratoire d'Étude de Physique**

et de l'**École Doctorale I-MEP2 : Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Énergétique, Procédés, Production**

**Contribution à l'Amélioration des  
Données Nucléaires Neutroniques  
du Sodium pour le Calcul des  
Réacteurs de Génération IV**

Thèse soutenue publiquement le **14 Septembre 2011**,  
devant le jury composé de :

**Monsieur Daniel HEUER**

Directeur de Recherche au CNRS à Grenoble, Président

**Monsieur Franck GUNSING**

Ingénieur au CEA-Saclay/DSM/DAPNIA/SPhN, Rapporteur

**Monsieur Giuseppe PALMIOTTI**

Chercheur à Idaho National Laboratory aux USA, Rapporteur

**Madame Elsa MERLE-LUCOTTE**

Professeur à l'INPG, Directrice de thèse

**Monsieur Jean TOMMASI**

Ingénieur au CEA-Cadarache/DEN/DER/SPRC/LEPh, Encadrant

**Monsieur Arjan PLOMPEN**

Chercheur au EC-JRC-IRMM de Geel en Belgique, Membre





---

## Résumé :

Les critères de sûreté exigés pour les réacteurs rapides au sodium de Generation IV (RNR-Na) se traduisent par la nécessité d'incertitudes réduites et maîtrisées sur les grandeurs neutroniques d'intérêt. Une part de ces incertitudes provient des données nucléaires et, dans le cas des RNR-Na, des données nucléaires du sodium, qui présentent des différences significatives entre les bibliothèques internationales (JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0, JENDL-4.0).

L'objectif de cette thèse est d'améliorer la connaissance sur les données nucléaires du sodium afin de mieux calculer les paramètres neutroniques des RNR-Na et fournir des incertitudes fiables.

Après un état des lieux des présentes données du  $^{23}\text{Na}$ , l'impact des différences est quantifié notamment sur les effets en réactivité de vidange du sodium, calculés avec des outils neutroniques déterministe et stochastique. Les résultats montrent qu'il est nécessaire de réévaluer entièrement les données nucléaires du sodium.

Plusieurs développements ont été effectués dans le code d'évaluation CONRAD, pour intégrer de nouveaux modèles de réactions nucléaires et leurs paramètres ainsi que pour permettre de procéder à des ajustements avec des mesures intégrales.

Suite à ces développements, l'analyse des données différentielles et la propagation des incertitudes expérimentales avec CONRAD ont été réalisées. Le domaine des résonances résolues a été étendu à 2 MeV et le domaine du continuum débute directement au-delà de cette énergie. Une nouvelle évaluation du  $^{23}\text{Na}$  et les matrices de covariances multigroupes associées ont été générées pour de futurs calculs d'incertitudes.

La dernière partie de la thèse se focalise sur le retour des expériences intégrales de vidange du sodium, par des méthodes d'assimilation de données intégrales, afin de réduire les incertitudes sur les sections efficaces du sodium. Ce document se clôt sur des calculs d'incertitudes pour des RNR-Na de type industriel, qui montrent une meilleure prédiction de leurs paramètres neutroniques avec la nouvelle évaluation.

## Mots clés :

Sodium,  $^{23}\text{Na}$ , Données Nucléaires, CONRAD, Évaluation, Sections Efficaces, Covariances, Mesures Microscopiques, Mesures Intégrales

---

---

## Improvement of Sodium Neutronic Nuclear Data for the Computation of Generation IV Reactors

### Abstract :

The safety criteria to be met for Generation IV sodium fast reactors (SFR) require reduced and mastered uncertainties on neutronic quantities of interest. Part of these uncertainties come from nuclear data and, in the particular case of SFR, from sodium nuclear data, which show significant differences between available international libraries (JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0, JENDL-4.0).

The objective of this work is to improve the knowledge on sodium nuclear data for a better calculation of SFR neutronic parameters and reliable associated uncertainties.

After an overview of existing  $^{23}\text{Na}$  data, the impact of the differences is quantified, particularly on sodium void reactivity effects, with both deterministic and stochastic neutronic codes. Results show that it is necessary to completely re-evaluate sodium nuclear data.

Several developments have been made in the evaluation code CONRAD, to integrate new nuclear reactions models and their associated parameters and to perform adjustments with integral measurements.

Following these developments, the analysis of differential data and the experimental uncertainties propagation have been performed with CONRAD. The resolved resonances range has been extended up to 2 MeV and the continuum range begins directly beyond this energy. A new  $^{23}\text{Na}$  evaluation and the associated multigroup covariances matrices were generated for future uncertainties calculations.

The last part of this work focuses on the sodium void integral data feedback, using methods of integral data assimilation to reduce the uncertainties on sodium cross sections. This work ends with uncertainty calculations for industrial-like SFR, which show an improved prediction of their neutronic parameters with the new evaluation.

### Keywords :

Sodium,  $^{23}\text{Na}$ , Nuclear Data, CONRAD, Evaluation, Cross-Sections, Covariances, Microscopic Measurements, Integral Measurements

---

---

## Remerciements

Cette thèse a été réalisée au Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) de Cadache, au sein du Laboratoire d'Études de Physique (LEPh) dans le Service de Physique des Réacteurs et du Cycle (SPRC).

Je souhaite tout d'abord remercier Jean-Michel Ruggieri, ancien chef du LEPh, sans qui cette thèse n'aurait pu voir le jour et Jean Tommasi, mon encadrant au CEA, pour m'avoir guidé pendant plus de trois ans, pour sa très grande disponibilité pour toutes les questions que j'ai pu lui poser et pour son savoir encyclopédique de la physique des réacteurs rapides et de la neutronique.

J'aimerais remercier ma directrice de thèse Elsa Merle-Lucotte pour ses nombreux conseils ainsi que les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont témoigné pour ce travail.

Toute ma gratitude va à Cyrille de Saint Jean, actuel chef du LEPh, pour son soutien sans faille dans cette thèse, son aide lorsque j'errais dans les méandres des différentes classes de CONRAD. Je souhaite également le remercier pour sa forte implication dans mon insertion professionnelle.

Je dois énormément à Gilles Noguère, le Monsieur Évaluation du laboratoire, pour tous les aspects liés aux données nucléaires, étudiés dans ce projet. Il a su me communiquer sa passion pour l'évaluation, grâce à ses conseils et suggestions toujours très justes.

Pour le côté "physique des réacteurs", je tiens à remercier Christophe Suteau (maintenant au LMA) et surtout Romain Le Tellier, développeurs en titre de la plateforme PARIS, qui se sont intéressés à mon travail et qui ont eu la gentillesse de se plier à toutes mes exigences. Je remercie aussi Romain pour ses remarques fructueuses lors de la correction de ce manuscrit.

Ma reconnaissance va aux trois Olivers, pour leur aide lorsque j'avais des interrogations concernant les données nucléaires, à David Bernard, Jean-François Vidal et Pierre Leconte pour avoir partagé leurs connaissances de la qualification des REL et de l'importance des données intégrales. Un petit clin d'œil à Claire Vaglio-Gaudard, maintenant au LPN, dont la thèse sur le  $^{56}\text{Fe}$  nous a permis de collaborer sur des problématiques communes.

Un grand merci à Jean-François Lebrat (Jeff) pour les questions relatives aux expériences CIRANO et à Yannick Pénéliou, mon actuel collègue de bureau, qui a dû supporter mes très nombreux caprices pour le *processing* notamment.

J'ai une pensée pour tous les autres membres du LEPH qui, au-delà de leur contribution de près ou de loin à cette thèse, ont su donner une ambiance de travail unique et incomparable, faisant de ces trois années (et plus avec le stage), un réel plaisir. En l'occurrence, je ne pourrais oublier les "entraînements" hebdomadaires de foot et le fameux tournoi inter-services.

Je souhaite remercier les personnes du Laboratoire d'Études et Développement des Cœurs (LEDC) avec qui j'ai pu travailler, notamment Bruno Fontaine, Laurent Buiron, David Blanchet et Géraud Prulhière.

Je ne saurais oublier mes (très nombreux) compagnons stagiaires et thésards, qui participent largement à la dynamique du LEPH, avec entre autres :

- Damien, le maître de l'AMR, pour m'avoir fait *beta-tester* ses développements mais surtout pour les innombrables parties de tennis, de football et autres délires en tout genre!
- Adrien, le troubadour du laboratoire, pour avoir testé les nouveautés dans CONRAD et pour son aide avec le capriceux L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X ;
- Ansar, notre unique (pour le moment) mauricien, pour sa bonne humeur et son optimisme légendaire ;
- Simon, le plus parisien des vinnonais, pour m'avoir fait re-découvrir la joie des jeux-vidéos et qui arrive à me faire sentir moins geek!
- Nicolas, le "baroudeur" du LEPH, pour m'avoir fait gentiment découvrir des coins superbes pendant la 3<sup>e</sup> année de thèse ;
- David, notre "habile" développeur de FIFRELIN et accessoirement troubadour-jongliste avec Adrien, qui espère un jour pouvoir rattraper CONRAD ;
- Kévin (ou George), avec qui je partage la passion du tennis et de la classe américaine ;
- Philippe, mon ancien co-bureau et maintenant Docteur (mais oui!), qui par de nombreuses fois, a tenté de me faire basculer du côté obscur de la force, sans y parvenir!

Et merci aussi aux autres thésards, plus particulièrement Jean-Christophe et aux collocs d'Ansar : Vanessa et Olivier.

Pour finir, je remercie mon frère, pour ses nombreux encouragements, et mes parents, pour leur soutien sans faille, qui ont transmis à leur fils le goût du travail et du dépassement de soi.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 État de l'art des Données Nucléaires du Sodium 23</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction . . . . .	5
1.2 Différences sur les Sections Efficaces . . . . .	6
1.2.1 Le Domaine des Résonances Résolues (RRR) . . . . .	7
1.2.2 Le Continuum . . . . .	12
1.3 Distributions Angulaires . . . . .	19
1.3.1 Renvois Élastiques . . . . .	20
1.3.2 Renvois Inélastiques . . . . .	21
1.4 Distributions Énergétiques . . . . .	22
1.5 Covariances sur les Sections Efficaces . . . . .	22
1.6 Conclusion . . . . .	26
<b>2 Qualification : Impact du Sodium sur les Grandeurs Intégrales</b>	<b>27</b>
2.1 Grandeurs Neutroniques d'Intérêt . . . . .	28
2.1.1 La Réactivité . . . . .	28
2.1.2 L'Effet en Réactivité de Vidange Sodium . . . . .	28
2.2 La Base de Données Expérimentales . . . . .	29
2.2.1 Présentation des Maquettes . . . . .	31
2.3 Impact des Données Nucléaires du Sodium sur les Quantités d'Intérêt . . . . .	34
2.3.1 Schéma de Calcul Déterministe . . . . .	34
2.3.2 Schéma de Calcul Stochastique . . . . .	36
2.3.3 Impact sur les Réactivités . . . . .	36
2.3.4 Impact sur les Effets en Réactivité de Vidange Sodium (SVRE) . . . . .	40
2.4 Tentative d'Ajustement des Sections Multigroupes . . . . .	49
2.4.1 Rappel de la Théorie pour l'Ajustement Multigroupe . . . . .	49
2.4.2 Avantages et Inconvénients de cette Méthode . . . . .	50
2.4.3 Obtention des Matrices de Sensibilités . . . . .	51
2.4.4 Données d'Entrée avant l'Ajustement . . . . .	52
2.4.5 Comparaison des Tendances Obtenues <i>a posteriori</i> . . . . .	53
2.5 Conclusion . . . . .	58
<b>3 Aspects Théoriques</b>	<b>61</b>
3.1 Théorie de l'Interaction Neutron-Noyau . . . . .	62



3.2	Modèle du Noyau Composé . . . . .	63
3.2.1	Sections Efficaces . . . . .	67
3.2.2	Sections Efficaces Différentielles . . . . .	68
3.3	Domaine des Résonances Résolues (RRR) . . . . .	69
3.3.1	Formalisme de la Matrice-R . . . . .	69
3.3.2	La Matrice de Niveaux A . . . . .	71
3.3.3	Les Approximations de la Matrice-R . . . . .	72
3.3.4	L'Approximation de Reich-Moore (RM) . . . . .	74
3.3.5	Les Niveaux Externes . . . . .	75
3.3.6	Les Paramètres Utilisés dans le RRR . . . . .	76
3.4	Domaine du Continuum . . . . .	76
3.4.1	Le Modèle Optique . . . . .	78
3.4.2	Le Modèle Optique Sphérique . . . . .	79
3.4.3	Les Réactions Directes . . . . .	84
3.4.4	Les Réactions du Pré-Équilibre . . . . .	85
3.4.5	Les Réactions du Noyau Composé . . . . .	86
3.4.6	Récapitulatif sur les Sections Efficaces dans le Continuum . . . . .	93
3.5	Conclusion sur les Aspects Théoriques . . . . .	94
<b>4</b>	<b>Le Code d'Évaluation CONRAD</b>	<b>95</b>
4.1	Présentation du Code . . . . .	95
4.1.1	Les Modèles Théoriques . . . . .	97
4.1.2	La Simulation Expérimentale . . . . .	97
4.1.3	Les Outils d'Analyse . . . . .	99
4.2	Les Développements Nécessaires . . . . .	102
4.2.1	Développement/Interface de Modèles Théoriques . . . . .	102
4.2.2	L'Assimilation d'Expériences Intégrales . . . . .	109
<b>5</b>	<b>Évaluation avec les Mesures Microscopiques</b>	<b>117</b>
5.1	Évaluation dans le Domaine des Résonances Résolues . . . . .	118
5.1.1	Les Données Expérimentales . . . . .	118
5.1.2	Corrections Expérimentales . . . . .	120
5.1.3	Analyse des Résonances . . . . .	122
5.1.4	Résultats sur les Sections Efficaces . . . . .	125
5.1.5	Covariances sur les Sections Efficaces . . . . .	130
5.1.6	Sections Efficaces Différentielles . . . . .	134
5.2	Évaluation dans le Continuum . . . . .	136
5.2.1	Les Données Expérimentales . . . . .	136
5.2.2	Analyse des Mesures et Résultats . . . . .	137

5.2.3	Covariances sur les Sections Efficaces . . . . .	144
5.3	Conclusion sur l'Évaluation avec les Données Microscopiques . . . . .	148
<b>6</b>	<b>Évaluation avec les Données Intégrales</b>	<b>151</b>
6.1	Application de l'Évaluation pour la Neutronique . . . . .	152
6.1.1	Préparation de l'Évaluation . . . . .	152
6.1.2	Confrontation aux Calculs de Neutronique des RNR . . . . .	153
6.2	Assimilation des Données Intégrales pour l'Évaluation . . . . .	158
6.2.1	Choix de la Méthode . . . . .	159
6.2.2	Application de la Méthode et Interprétation . . . . .	160
6.2.3	Estimation des Incertitudes par Méthode Rétroactive avec IDA . . . . .	166
6.3	Calculs d'Incertitudes sur les RNR . . . . .	170
6.3.1	Présentation des Réacteurs . . . . .	170
6.3.2	Incertitudes sur le $k_{\text{eff}}$ . . . . .	170
6.3.3	Incertitudes sur la Vidange du Sodium . . . . .	171
6.3.4	Conclusions en Termes d'Incertitudes . . . . .	172
6.4	Conclusion sur l'Évaluation avec les Données Intégrales . . . . .	173
	<b>Conclusions Générales &amp; Perspectives</b>	<b>175</b>
<b>A</b>	<b>Description des Configurations Utilisées pour la Qualification</b>	<b>179</b>
A.1	MASURCA . . . . .	179
A.1.1	Assemblages Étudiés dans MASURCA . . . . .	179
A.1.2	Configurations Radiales et Axiales de Vidange . . . . .	181
A.1.3	Programme PRE-RACINE . . . . .	182
A.1.4	Programme RACINE . . . . .	188
A.1.5	Programme CIRANO . . . . .	193
A.2	ZPPR-10A . . . . .	197
A.2.1	Assemblages Utilisés dans ZPPR-10A . . . . .	197
A.2.2	Plan de Chargement de l'Expérience ZPPR-10A . . . . .	198
A.2.3	Effets en Réactivité de Vidange . . . . .	200
A.2.4	Calcul du $\beta_{\text{eff}}$ . . . . .	201
<b>B</b>	<b>Analyse de l'Impact du Schéma de Calcul en Déterministe</b>	<b>203</b>
B.1	Impact du Schéma de Calcul Cellule . . . . .	203
B.1.1	Description des Schémas Utilisés . . . . .	203
B.1.2	Résultats . . . . .	207
B.2	Impact du Schéma de Calcul Cœur . . . . .	211
B.2.1	Description des Schémas Utilisés . . . . .	211

---

B.2.2	Résultats . . . . .	213
B.3	Conclusions sur les Schémas de Calcul Déterministes . . . . .	217
<b>C</b>	<b>Validation des Développements dans CONRAD</b>	<b>219</b>
C.1	Calcul des Sections Inélastiques avec Reich-Moore . . . . .	219
C.2	Calcul des Distributions Angulaires avec Reich-Moore . . . . .	223
C.3	Interfaces avec les Codes ECIS et TALYS . . . . .	224
C.3.1	$^{27}\text{Al}$ : Sphérique Non Dispersif . . . . .	224
C.3.2	$^{56}\text{Fe}$ : Sphérique Dispersif . . . . .	225
C.3.3	$^{238}\text{U}$ : Rotationnel Non Dispersif . . . . .	226
C.3.4	Calculs avec CONRAD et TALYS . . . . .	227
C.4	Modèle Optique Sphérique Basé sur SCAT2000 . . . . .	228
<b>D</b>	<b>Résultats Complémentaires pour l'Évaluation</b>	<b>231</b>
D.1	Paramètres de Résonance du Sodium . . . . .	231
D.2	Paramètres du Modèle Optique pour le Sodium . . . . .	238
D.3	Covariances de l'Évaluation avec les Données Microscopiques . . . . .	238
D.3.1	Covariances sur les Sections Efficaces Partielles . . . . .	239
D.3.2	Covariances pour les Calculs d'Incertitudes en Déterministe . . . . .	242
D.4	Covariances avec le Retour des Données Intégrales . . . . .	245
D.4.1	Covariances sur les Sections Efficaces Partielles . . . . .	245
D.4.2	Covariances pour les Calculs d'Incertitudes en Déterministe . . . . .	248
	<b>Bibliographie</b>	<b>251</b>

# Liste des Tables

1.1	Paramètres de résonances donnés dans la littérature et les évaluations actuelles (les données incertaines proposées dans l'Atlas of Neutron Resonance sont colorées en rouge) . . . . .	9
1.2	Sections efficaces élastique et de capture thermique dans la littérature ainsi que pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0	10
1.3	Incertitudes relatives (en %) sur les sections efficaces élastique, inélastique et de capture provenant des évaluations du sodium de JENDL-4.0 et TENDL-2010 et de la base de données de covariances BOLNA . . . . .	25
2.1	Liste et description des benchmarks dans MASURCA . . . . .	32
2.2	Résultats pour la réactivité dans les expériences MASURCA RZ . . . . .	37
2.3	Résultats pour la réactivité sur les cœurs PRE-RACINE avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	37
2.4	Résultats pour la réactivité sur le cœur ZPPR-10A avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	38
2.5	Résultats pour la réactivité sur les cœurs RACINE avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	38
2.6	Résultats pour la réactivité sur les cœurs CIRANO avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	39
2.7	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur PRE-RACINE I avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	41
2.8	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur PRE-RACINE-IIa avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	42
2.9	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur PRE-RACINE-IIb avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	42
2.10	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur ZPPR-10A avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	44
2.11	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur RACINE-IA avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	45
2.12	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur RACINE-ID Na Follower avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	45
2.13	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur XYZ RACINE-ID B <sub>4</sub> C Rod avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) en géométrie hétérogène . . . . .	45
2.14	Résultats $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur Cirano ZONA2A avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1 \sigma$ ) . . . . .	46

2.15	Résultats $\Delta\rho_{\text{Na}}$ dans le cœur Cirano ZONA2B avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à $1\sigma$ ) . . . . .	47
2.16	Tendances (en %), obtenues en utilisant les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA, sur les sections efficaces ELASTIC, INELASTIC et de CAPTURE du sodium de JEFF-3.1.1 . . . . .	54
2.17	Incertitudes relatives (en %) prior et posterior, obtenues en utilisant les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA, sur les sections efficaces ELASTIC, INELASTIC et de CAPTURE . . . . .	55
3.1	Résumé des interactions possibles . . . . .	64
3.2	Configuration de spins du $^{23}\text{Na}$ pour des résonances d'onde $s$ , $p$ et $d$ . . . . .	66
3.3	Le facteur de pénétrabilité $P_l$ , le facteur de décalage $S_l$ et le décalage de phase $\varphi_l$ en fonction de $\rho = k \cdot a_c$ ( $k$ nombre d'onde et $a_c$ rayon de voie) sans interaction Coulombienne. Il est coutume d'utiliser pour $\varphi_l$ un terme $\rho' = k \cdot R'$ où $R'$ correspond au rayon potentiel effectif de la voie . . . . .	71
3.4	Paramètres du modèle optique utilisés pour décrire le potentiel de Morillon-Romain . . . . .	82
4.1	Correspondance des voies de sortie en fonction du moment orbital $J^\pi$ pour le sodium, pour son niveau fondamental et son 1 <sup>er</sup> niveau excité . . . . .	108
5.1	Liste des principales mesures de section efficace totale pour le sodium en-dessous de 2 MeV . . . . .	118
5.2	Sections efficaces élastique et de capture au point thermique suite à l'analyse de résonances du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	125
6.1	Résultats avec notre nouvelle évaluation pour la réactivité sur les cœurs MA-SURCA et ZPPR . . . . .	154
6.2	Résultats $\Delta\rho_{\text{Na}}$ avec notre nouvelle évaluation dans les cœurs PRE-RACINE-IIA et PRE-RACINE-IIB . . . . .	155
6.3	Résultats $\Delta\rho_{\text{Na}}$ avec notre nouvelle évaluation dans le cœur ZPPR-10A . . . . .	156
6.4	Résultats $\Delta\rho_{\text{Na}}$ avec notre nouvelle évaluation dans les cœurs RACINE-IA, RACINE-ID (Na Follower et et B <sub>4</sub> C Rod) . . . . .	156
6.5	Résultats $\Delta\rho_{\text{Na}}$ avec notre nouvelle évaluation dans le cœur CIRANO ZONA2A . . . . .	157
6.6	Valeurs obtenues avec TRIPOLI utilisées comme a priori dans la méthode IDA . . . . .	161
6.7	Valeurs ( $C - E$ ) obtenues avant et après l'assimilation de données intégrales . . . . .	163
6.8	Incertitudes (en pcm) sur le $k_{\text{eff}}$ dûes aux données nucléaires du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	171
6.9	Incertitudes (en $\epsilon = 0.01\% = 0.01\beta_{\text{eff}}$ ) sur la vidange sodium dûes aux données nucléaires du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	172

A.1	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur PRE-RACINE I . . . . .	185
A.2	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur PRE-RACINE IIA . . . . .	186
A.3	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur PRE-RACINE IIB . . . . .	187
A.4	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur RACINE-IA . . . . .	190
A.5	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur RACINE-ID Na Follower . . . . .	191
A.6	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur RACINE-ID B <sub>4</sub> C Rod . . . . .	193
A.7	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur CIRANO ZONA2A . . . . .	195
A.8	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur CIRANO ZONA2B . . . . .	197
A.9	Liste des $\Delta\rho_{Na}$ réalisées dans le cœur ZPPR-10A . . . . .	201
B.1	Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages combustibles classiques (non-vidangés) . . . . .	205
B.2	Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages fertiles classiques (non-vidangés) . . . . .	205
B.3	Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages en matériaux de structure (diffuseur, écran, etc...) . . . . .	206
B.4	Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages combustibles vidangeables	206
B.5	Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages fertiles vidangeables .	207
B.6	Impact des schémas de calcul cellules sur la réactivité dans les cœurs MASURCA et ZPPR . . . . .	208
B.7	Impact des schéma de calcul cellule sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans les cœurs PRE-RACINE-IIA et PRE-RACINE-IIB . . . . .	209
B.8	Impact des schéma de calcul cellule sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur ZPPR-10A . .	210
B.9	Impact des schéma de calcul cellule sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans les cœurs RACINE-IA, RACINE-ID (Na Follower et B <sub>4</sub> C Rod) . . . . .	210
B.10	Impact des schémas de calcul cellule sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans les cœur CIRANO ZONA2A et ZONA2B . . . . .	211
B.11	Détails des schémas de référence et simplifié pour le calcul cœur . . . . .	212
B.12	Impact du schéma de calcul cœur sur la réactivité dans les cœurs MASURCA et ZPPR . . . . .	214
B.13	Impact du schéma de calcul cœur sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans les cœurs PRE-RACINE-IIA et PRE-RACINE-IIB . . . . .	215
B.14	Impact du schéma de calcul cœur sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans le cœur ZPPR-10A . . .	216
B.15	Impact du schéma de calcul cœur sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans les cœurs RACINE-IA, RACINE-ID (Na Follower et et B <sub>4</sub> C Rod) . . . . .	216
B.16	Impact du schéma de calcul cœur sur les $\Delta\rho_{Na}$ dans les cœur CIRANO ZONA2A et ZONA2B . . . . .	217

D.1	Paramètres de résonance du $^{23}\text{Na}$ obtenus suite à l'ajustement sur les mesures microscopiques. $E_\lambda$ correspond à l'énergie de la résonance, $\Gamma_\gamma$ à la largeur radiative, $\Gamma_n$ à la largeur neutronique et $\Gamma_{n',x}$ aux largeurs inélastiques pour $\ell = x$ . . . . .	234
D.2	Incertitudes relatives (en %) sur les paramètres de résonance du $^{23}\text{Na}$ obtenus suite à l'ajustement sur les mesures microscopiques . . . . .	237
D.3	Paramètres du modèle optique du $^{24}\text{Mg}$ et de notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ (les incertitudes relatives sont données entre parenthèses) . . . . .	238
D.4	Sections efficaces multigroupes (33 groupes d'énergie) pour les réactions principales de notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ à partir des mesures microscopiques . . .	240
D.5	Incertitudes relatives (en %) pour les principales sections efficaces de notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ à partir des mesures microscopiques . . . . .	241
D.6	Incertitudes relatives (en %) pour les sections efficaces de notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ , obtenues à partir des mesures microscopiques et mises dans le format employé par les codes déterministes . . . . .	243
D.7	Incertitudes relatives (en %) pour les principales sections efficaces de notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ après utilisation de la méthode Rétroactive avec les données intégrales . . . . .	246
D.8	Incertitudes relatives (en %) pour les sections efficaces du $^{23}\text{Na}$ , après application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales. Les incertitudes sont fournies dans le format employé par les codes déterministes . . . . .	249

# Liste des Figures

1.1	Sections efficaces totale pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 dans le RRR comparées avec les données expérimentales d'EXFOR . . . . .	11
1.2	Différences relatives (en %) sur la section efficace totale de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 . . . . .	11
1.3	Sections efficaces totales pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 350 keV et 2 MeV comparées avec les données expérimentales d'EXFOR . . . . .	13
1.4	Différences relatives (en %) sur la section efficace totale de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 350 keV et 2 MeV . . . . .	13
1.5	Sections efficaces totales du sodium dans JEFF-3.1.1, dans sa version originale et dans sa version corrigée (retrait des mesures de section inélastique de Kopecky), comparées aux mesures de section totale de Larson . . . . .	14
1.6	Sections efficaces inélastiques pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 500 keV et 2 MeV comparées avec les données expérimentales d'EXFOR . . . . .	15
1.7	Différences relatives (en %) sur la section efficace inélastique de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 500 keV et 2 MeV . . . . .	15
1.8	Sections efficaces inélastiques pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 2 et 20 MeV . . . . .	16
1.9	Différences relatives (en %) sur la section efficace inélastique de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 2 et 20 MeV . . . . .	16
1.10	Sections efficaces totales pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 2 et 20 MeV comparées avec les données expérimentales d'EXFOR . . . . .	17
1.11	Différences relatives (en %) sur la section efficace totale de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 2 et 20 MeV . . . . .	18
1.12	Coefficients $a_1$ des polynômes de Legendre pour les renvois élastiques en fonction de l'énergie incidente des neutrons . . . . .	20
1.13	Probabilités de renvois angulaires élastiques à 700 keV et 2.5 MeV . . . . .	21
1.14	Coefficients $a_1$ des polynômes de Legendre pour les renvois du 1 <sup>er</sup> niveau inélastique en fonction de l'énergie incidente des neutrons . . . . .	22
1.15	Matrice de corrélations pour les réaction élastique, inélastique et de capture proposées dans les évaluations du sodium de JENDL-4.0 et TENDL-2010 . . . . .	23



2.1	Exemple du durcissement du spectre lors de la vidange de 16 assemblages dans une configuration XY du cœur Cirano ZONA2B . . . . .	30
2.2	Vue extérieure de la maquette critique MASURCA au CEA Cadarache . . . . .	31
2.3	Vue des deux tables horizontales de l'installation ZPPR . . . . .	33
2.4	Réactivités $\rho$ obtenues avec ERANOS-PARIS en utilisant les différentes évaluations du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	40
2.5	Valeurs $\frac{C-E}{\sigma_{\text{exp}}}$ obtenues avec ERANOS-PARIS pour les SVRE interprétés dans les maquettes MASURCA et ZPPR en utilisant les différentes évaluations du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	48
2.6	Valeurs $\frac{C-E}{\sigma_{\text{exp}}}$ obtenues a posteriori en utilisant les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA . . . . .	57
3.1	Schéma de niveaux du noyau composé. Les résonances excitées décroissent par émission $\gamma$ à des niveaux d'énergie inférieure. Les réactions par diffusion inélastique peuvent se produire si l'énergie dans le centre de masse est plus grande que l'énergie du premier niveau excité du noyau cible . . . . .	64
3.2	Description de l'interaction entre un neutron et un noyau $^AX$ , délimitée par des régions interne et externe . . . . .	67
3.3	Schéma décrivant les différents mécanismes de réactions nucléaires . . . . .	77
4.1	Exemple de fichiers d'entrée de la base RIPL et de CONRAD pour les paramètres de potentiels . . . . .	103
4.2	L'Assimilation de Données Intégrales (IDA) avec la méthode "low fidelity" . . . . .	110
4.3	L'Assimilation de Données Intégrales (IDA) avec la méthode "brute force" (ou méthode de référence) . . . . .	112
4.4	L'Assimilation de Données Intégrales (IDA) avec la méthode "coupled" . . . . .	114
5.1	Section potentielle élastique du Sodium calculée par modèle optique en fonction de l'énergie incidente du neutron et rayon effectif $R'$ équivalent suivant l'Équation (5.6) . . . . .	123
5.2	Sections efficaces totales calculées avec CONRAD, avec et sans prise en compte de la dépendance énergétique du rayon effectif . . . . .	124
5.3	Section efficace de capture au point thermique, comparée aux mesures (les références sont disponibles dans la base de données EXFOR) et aux évaluations du sodium existantes . . . . .	126
5.4	Section efficace totale, entre 500 eV et 16 keV, ajustée sur les mesures de Rahn et comparée aux évaluations du sodium existantes . . . . .	127
5.5	Section efficace totale, entre 32 keV et 350 keV, ajustée sur les données de Larson et comparée aux évaluations du sodium existantes . . . . .	127

5.6	Section efficace totale, entre 350 keV et 2 MeV, ajustée sur les mesures de Larson et comparée à l'évaluation du sodium dans JEFF-3.1.1 . . . . .	128
5.7	Section efficace du premier niveau inélastique, entre 460 keV et 2 MeV, ajustée sur les mesures de Kopecky et comparée à l'évaluation du sodium dans ENDF/B-VII.0 . . . . .	128
5.8	Sections efficaces ponctuelles du $^{23}\text{Na}$ calculées par NJOY à $293.6^\circ\text{K}$ . . . . .	129
5.9	Sections efficaces multigroupes (dans le découpage à 33 groupes) et incertitudes relatives (en %) du domaine des résonances résolues pour notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	132
5.10	Matrices de corrélations multigroupes (33 groupes d'énergie) dans le domaine des résonances résolues du $^{23}\text{Na}$ pour les sections efficaces totale, de capture, élastique et inélastique . . . . .	133
5.11	Impact sur la section efficace différentielle de la modification du nombre quantique $J^\pi$ d'une résonance . . . . .	134
5.12	Sections différentielles élastiques (en b/sr) en fonction de l'angle, calculées pour plusieurs énergies (normalisées par un facteur pour en montrer plusieurs) et comparées aux mesures disponibles dans EXFOR . . . . .	135
5.13	Section efficace totale ajustée sur les mesures de Larson et comparée aux autres données expérimentales disponibles et à l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1 . . . . .	139
5.14	Section efficace pour la réaction $(n, p)$ comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du $^{23}\text{Na}$ dans JEFF-3.1.1 . . . . .	141
5.15	Section efficace pour la réaction $(n, \alpha)$ comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du $^{23}\text{Na}$ dans JEFF-3.1.1 . . . . .	141
5.16	Section efficace pour la réaction $(n, 2n)$ comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du $^{23}\text{Na}$ dans JEFF-3.1.1 . . . . .	142
5.17	Section efficace pour la réaction $(n, \gamma)$ comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du $^{23}\text{Na}$ dans JEFF-3.1.1 . . . . .	143
5.18	Section efficace inélastique totale $(n, inel_{tot})$ (sections discrètes + continuum) comparée avec celles présentes dans les évaluations du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	143
5.19	Sections efficaces multigroupes (à 172 groupes) et incertitudes relatives (en %) du domaine du continuum (après 2 MeV) pour notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	146
5.20	Matrices de corrélations et cross-corrélations dans le domaine du continuum du $^{23}\text{Na}$ (après 2 MeV) pour les sections efficaces totale, élastique et inélastique . . . . .	147
6.1	Sections efficaces totale et inélastique, avant (prior) et après (posterior) l'ajustement par la méthode IDA. Les bandeaux colorés disposés avec les sections efficaces représentent les incertitudes avant cet ajustement. Quelques mesures de section efficace totale sont également présentées. . . . .	162

6.2	Sensibilités relatives (en %/%) d'une vidange aux réactions ELASTIC et IN-ELASTIC pour quelques isotopes contribuant le plus à l'incertitude sur cette grandeur . . . . .	164
6.3	Sensibilités relatives (en %/%) d'une vidange aux réactions de CAPTURE et de FISSION pour quelques isotopes (actines en particulier) contribuant le plus à l'incertitude sur cette grandeur . . . . .	165
6.4	Incertainces relatives en % (à 33 groupes en énergie) sur les principales sections efficaces du $^{23}\text{Na}$ avant (en trait plein) et après (en trait pointillé) la méthode Rétroactive . . . . .	167
6.5	Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues avant et après la méthode Rétroactive, pour les sections efficaces totale, élastique et inélastique . . . . .	169
A.1	Cellules combustibles utilisées dans MASURCA . . . . .	180
A.2	Configurations axiales de vidange partielle dans les cœurs MASURCA de 36" de hauteur . . . . .	182
A.3	Coupe XY et représentation RZ du cœur PRE-RACINE I . . . . .	184
A.4	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur PRE-RACINE I . . . . .	184
A.5	Coupe XY et représentation RZ du cœur PRE-RACINE IIA . . . . .	185
A.6	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur PRE-RACINE IIA . . . . .	186
A.7	Coupe XY et représentation RZ du cœur PRE-RACINE IIB . . . . .	187
A.8	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur PRE-RACINE IIB . . . . .	188
A.9	Coupe XY et représentation RZ du cœur RACINE-IA . . . . .	189
A.10	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur RACINE-IA . . . . .	190
A.11	Coupe XY et représentation RZ du cœur RACINE-ID Na Follower . . . . .	191
A.12	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur RACINE-ID Na Follower . . . . .	192
A.13	Coupe XY et représentation RZ du cœur RACINE-ID B <sub>4</sub> C Rod . . . . .	192
A.14	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur RACINE-ID B <sub>4</sub> C Rod . . . . .	193
A.15	Configurations axiales de vidange partielle dans les cœurs MASURCA de 24" de hauteur . . . . .	194
A.16	Coupe XY et représentation RZ du cœur CIRANO ZONA2A . . . . .	195
A.17	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur CIRANO ZONA2A . . . . .	195
A.18	Coupe XY et représentation RZ du cœur CIRANO ZONA2B . . . . .	196
A.19	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur CIRANO ZONA2B . . . . .	196
A.20	Cellules combustibles utilisées dans l'expérience ZPPR-10A . . . . .	198
A.21	Coupe XY du cœur ZPPR-10A . . . . .	199
A.22	Description RZ du cœur ZPPR-10A . . . . .	200
A.23	Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur ZPPR-10A . . . . .	200

B.1	Couloirs de fuite radiaux lors de la vidange du sodium dans un assemblage MASURCA de type ZONA1 . . . . .	204
C.1	Comparaison du calcul des sections efficaces totale, élastique, inélastique et de capture radiative entre CONRAD et SAMMY. Les courbes supérieures montrent les sections calculées avec les deux codes. Dans la partie inférieure, on trouve les résidus ( $= \frac{\sigma_{Sammy} - \sigma_{Conrad}}{\sigma_{Sammy}}$ ) en % entre les deux calculs . . . . .	220
C.2	Comparaison du calcul des sensibilités (ou dérivées) des sections efficaces totale, élastique, inélastique et de capture radiative à quelques largeurs neutroniques inélastiques entre CONRAD (traits pleins) et SAMMY (traits pointillés). Les résidus ( $= \left  \frac{\sigma_{Sammy} - \sigma_{Conrad}}{\sigma_{Sammy}} \right $ ) sont donnés en valeur absolue . . . . .	222
C.3	Comparaison du calcul des sections efficaces différentielles élastiques entre les codes CONRAD et SAMMY. Dans la partie inférieure, on trouve les résidus entre les deux calculs, avec SAMMY qui est pris comme référence . . . . .	223
C.4	Comparaison du calcul de la section efficace totale entre les codes CONRAD et ECIS pour l'isotope du $^{27}\text{Al}$ avec le potentiel N°1402 dans RIPL-3 de Koning-Delaroche. On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les deux calculs, en prenant ECIS comme référence . . . . .	225
C.5	Comparaison du calcul de la section efficace totale entre les codes CONRAD et ECIS pour le $^{56}\text{Fe}$ avec le potentiel N°1475 dans RIPL-3 de Morillon-Romain. On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les deux calculs, en prenant ECIS comme référence . . . . .	226
C.6	Comparaison du calcul de la section efficace totale entre les codes CONRAD et ECIS pour l'isotope de $^{238}\text{U}$ avec le potentiel N°2601 dans RIPL-3 de Soukhovitskii. On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les deux calculs, en prenant ECIS comme référence . . . . .	227
C.7	Comparaison du calcul de plusieurs sections efficaces entre les codes CONRAD et TALYS, basé sur notre évaluation du $^{23}\text{Na}$ . On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les calculs avec les deux codes, en prenant TALYS comme référence . . . . .	228
C.8	Comparaison du calcul des sections efficaces totales avec les codes CONRAD et SCAT, en utilisant les potentiels de Koning-Delaroche et de Morillon-Romain sur l'isotope du $^{56}\text{Fe}$ . Dans la partie inférieure, les résidus (en %) entre les calculs sont présentés, SCAT étant le code de référence . . . . .	229
D.1	Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir des mesures microscopiques, pour les principales sections efficaces du $^{23}\text{Na}$ . . . . .	239

- D.2 Matrices de corrélations (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir des mesures microscopiques, pour les “macro” sections efficaces . . . . . 244
- D.3 Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie) pour les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ , après application de la méthode Rétroactive par IDA . . . . . 247
- D.4 Matrices de corrélations pour les sections efficaces utilisées en déterministe, après application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales . . . 250

# Introduction

Depuis le Forum International *Generation IV* [1] (GIF), on a vu apparaître un regain d'intérêt du CEA pour les réacteurs à neutrons rapides à caloporteur sodium (RNR-Na en français ou encore *Sodium-Cooled Fast Reactor* ou SFR en anglais). Il est d'ailleurs prévu de construire à l'horizon 2020 en France, d'après la Loi de programme relative à la gestion durable des matières et déchets radioactifs du 28 juin 2006, un prototype de RNR-Na nommé ASTRID (*Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration*), qui réponde aux critères du GIF. Ces critères requièrent notamment des réacteurs de 4<sup>e</sup> génération plus sûrs et plus compétitifs économiquement, ce qui se traduit par des incertitudes réduites et maîtrisées sur les grandeurs neutroniques d'intérêt, afin de se prémunir de marges de sûreté importantes, et donc très coûteuses.

Ces incertitudes proviennent, pour une large part, des données nucléaires qui sont un des ingrédients majeurs pour les études et la conception de réacteurs électro-nucléaires. Or, dans le cas des RNR-Na, les données nucléaires du sodium, qui figurent dans les bibliothèques internationales pour les évaluations (JEFF, ENDF/B, JENDL, etc. . .), font état de différences significatives pour les réactions élastique et inélastique dans les domaines d'énergie d'intérêt de ce type de réacteur ( $\simeq 100$  keV à 6 MeV). De plus, ces écarts sont parfois bien plus grands que les incertitudes annoncées dans la littérature [2].

Ces différences sur les données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$  se traduisent par une dispersion des valeurs calculées pour la réactivité et pour les effets en réactivité de vidange sodium, dépassant ainsi les incertitudes cibles fixées par le Forum pour le calcul de ces paramètres. Les récentes recommandations du Sous-Groupe 26 [2] de la NEA indiquent qu'une incertitude sur la section inélastique du sodium d'environ 5% pour des énergies comprises entre 500 keV et 2 MeV permettrait de répondre en partie aux critères Gen IV. Suite à ces conclusions, il a été décidé d'effectuer de nouvelles mesures pour la section inélastique du  $^{23}\text{Na}$  dans le cadre de la HPRL (*High Priority Request List*), un des groupes de travail de la NEA.

Par conséquent, les travaux menés dans cette thèse ont pour objectif de réduire les incertitudes sur les données nucléaires du sodium, dans le but de satisfaire les critères de sûreté fixés par le GIF. Dans cette optique, nous avons divisé notre exposé en plusieurs parties.

Dans le Chapitre 1, un bilan bibliographique est établi concernant les données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$  dans les évaluations des principales bibliothèques internationales (JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0). Les écarts les plus importants sont exposés, en parti-

culier sur les sections efficaces totale et inélastique au-delà de 100 keV et sur les distributions angulaires élastiques. On remarque également l'inexistence quasi-systématique de matrices de variances-covariances (sur les sections efficaces), indispensables à tout calcul d'incertitudes.

L'impact des différences dans les données nucléaires des évaluations du sodium sur certains paramètres neutroniques, comme la réactivité et l'effet en réactivité de vidange du sodium, est étudié en détails lors du Chapitre 2. On constate que l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans JEFF-3.1.1, la plus éloignée par rapport aux données expérimentales, semble fournir les meilleurs résultats sur les calculs de paramètre de type intégral. A contrario, les évaluations, fidèles aux mesures (ENDF/B-VII.0), dégradent les accords entre calculs et expériences. N'ayant pas la maîtrise de l'évaluation du sodium dans JEFF-3.1.1 (*i.e.* la maîtrise des paramètres de modèles de réactions nucléaires), nous étions dans l'incapacité d'améliorer les données nucléaires de cette évaluation et, *in fine*, de travailler sur la production de matrices de covariances. On en conclut, en fin de Chapitre, qu'il est nécessaire de ré-évaluer les données nucléaires du sodium, principalement les sections efficaces. En outre, cette nouvelle évaluation doit être basée sur les mesures microscopiques disponibles (comme le  $^{23}\text{Na}$  dans ENDF/B-VII.0 ou JENDL-4.0), mais aussi sur des données intégrales (comme le  $^{23}\text{Na}$  de JEFF-3.1.1), afin d'obtenir un consensus entre les deux types de mesures.

Le Chapitre 3 s'attache à décrire les modèles de réactions nucléaires employés pour l'évaluation de données nucléaires. En particulier, on y développe la théorie de la matrice- $R$  et les principaux formalismes qui en découlent, ainsi que les paramètres de résonances qui y sont associés. Le domaine dit du continuum passe par l'utilisation de modèles statistiques, dont le modèle optique, paramétrisé par un potentiel décrivant l'interaction entre le neutron et la particule cible.

On décrit succinctement, dans le Chapitre 4, les fonctionnalités du code d'évaluation de données nucléaires CONRAD, développé au sein du LEPH au CEA de Cadarache. Les développements dans le code CONRAD, nécessaires au bon déroulement de cette thèse, sont également détaillés. On y explique tout d'abord l'intérêt de traiter la section inélastique du sodium à l'aide de l'approximation de Reich-Moore de la matrice- $R$ , puisque les mesures pour cette réaction font état de structures résonantes importantes qui ne peuvent être traitées autrement. Par ailleurs, on introduit, en fin de Chapitre, les nouvelles méthodes implémentées dans CONRAD pour assimiler les données intégrales pendant le processus d'évaluation.

L'analyse et les résultats obtenus à partir des mesures microscopiques sont explicités dans le Chapitre 5. En premier lieu, nous proposons notre ré-évaluation du domaine des résonances résolues qui a été étendu jusqu'à 2 MeV, basée sur des mesures de section totale et inélastique à haute résolution. Entre 2 MeV et 20 MeV, on donne les résultats pour l'évaluation dans le domaine du continuum, ajustée sur des mesures de section totale à haute résolution et

---

de quelques sections partielles de moins bonne qualité. Une grande partie de ce Chapitre est dédiée à la production des incertitudes et des matrices de corrélations sur les sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ , qui intègrent les incertitudes expérimentales comme la normalisation.

Le Chapitre 6 présente les résultats de la confrontation de notre évaluation, basée uniquement sur les données microscopiques, avec les paramètres neutroniques des RNR-Na. On y voit que les données nucléaires du sodium ne sont pas les seules à contribuer aux écarts entre les calculs et les expériences intégrales et que l'assimilation de données intégrales doit être effectuée sur les paramètres de modèles du  $^{23}\text{Na}$  mais également ceux des isotopes suivants :  $^{16}\text{O}$ ,  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Pu}$  (contributeurs majeurs pour les réactivités de vidange du sodium). Malgré cela, l'application d'une méthode Rétroactive sur les paramètres de modèles à partir des expériences intégrales a permis de réduire les incertitudes sur ces paramètres et par conséquent sur les sections efficaces. On clôt ce Chapitre sur des calculs d'incertitudes pour des RNR-Na de type industriel, qui montrent une meilleure prédiction des paramètres neutroniques avec notre évaluation.





# État de l'art des Données Nucléaires du Sodium 23

---

## Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>1.2</b>	<b>Différences sur les Sections Efficaces</b>	<b>6</b>
1.2.1	Le Domaine des Résonances Résolues (RRR)	7
1.2.2	Le Continuum	12
<b>1.3</b>	<b>Distributions Angulaires</b>	<b>19</b>
1.3.1	Renvois Élastiques	20
1.3.2	Renvois Inélastiques	21
<b>1.4</b>	<b>Distributions Énergétiques</b>	<b>22</b>
<b>1.5</b>	<b>Covariances sur les Sections Efficaces</b>	<b>22</b>
<b>1.6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>26</b>

---

## 1.1 Introduction

Chaque bibliothèque internationale de données nucléaires possède sa propre évaluation du  $^{23}\text{Na}$ . Dans ce document, nous ne nous intéresserons qu'aux évaluations du sodium disponibles dans les bibliothèques les plus connues et utilisées de par le monde, c'est-à-dire :

- le sodium de la librairie européenne JEFF-3.1.1 [3], que l'on nommera  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  ;
- le sodium de la librairie américaine ENDF/B-VII.0 [4],  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  ;
- le sodium de la librairie japonaise JENDL-4.0 [5],  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$ .

D'autres bibliothèques (CENDL, BROND, etc...) proposent également des évaluations pour le sodium mais ces dernières sont bien souvent recopiées des trois principales bibliothèques.

Une évaluation contient toutes les données nucléaires (sections efficaces, distributions angulaires et énergétiques, données de photons, covariances...) d'un isotope requises par les

codes de calcul. On utilise un format ASCII appelé ENDF-6 [6] (pour *Evaluated Nuclear Data Files*) pour décrire les évaluations. Un fichier ENDF-6 se décompose en parties (ou *Files* ou *MF*). Chaque MF se subdivise en sections (ou *MT*) correspondant à une réaction donnée. Dans le cas du  $^{23}\text{Na}$ , on s'intéressera plus particulièrement aux données contenues dans les MF numérotées de 1 à 6.

La MF1 (ne contient que la MT451 dans le cas du sodium) donne les informations générales sur l'évaluation où l'on peut trouver un historique des modifications effectuées sur l'évaluation en question.

La MF2 (ne contient que la MT151) liste les paramètres de résonances pour le domaine des résonances résolues (RRR an anglais pour *Resolved Resonance Range*) et le domaine des résonances non-résolues (URR ou *Unresolved Resonance Range*), ainsi que la représentation des résonances qui est employée (MultiLevel Breit-Wigner, Reich-Moore, ...).

La MF3 (décomposée en plusieurs MT) décrit les sections efficaces ponctuelles pour toutes les réactions.

La MF4 (décomposée en plusieurs MT) fournit les distributions angulaires, sous forme de polynômes de Legendre, pour la section élastique (MT2) et parfois pour les sections discrètes (inélastiques MT51 à MT90, ...).

On trouve dans la MF5 les distributions énergétiques. Enfin, la MF6 décrit les distributions angulo-énergétiques.

À chaque MF $x$ -MT $y$ , on peut associer des incertitudes et corrélations. Ces dernières sont placées après la MF30. Par exemple, les covariances sur les paramètres de résonances (MF2-MT151) sont disponibles MF32-MT151 (on ajoute 30 au numéro de la *File*).

Parmi les 3 évaluations étudiées,  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  a été produite en 1977 par D.C. Larson (pour la bibliothèque ENDF/B-V à l'époque) et est la plus ancienne. Plus récemment (Août 2000), K. Shibata [7] a évalué le  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  où les principales modifications ont été apportées au-delà de 350 keV. Enfin, E. Fort a révisé l'évaluation disponible dans JEF-2.2 d'après les tendances obtenues par la création de la bibliothèque de données nucléaires ajustées ERALIB1 [8] pour créer  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ . Ces 3 évaluations conduisent à de nombreuses différences, notamment sur les sections efficaces et distributions angulaires, qui vont maintenant être développées.

## 1.2 Différences sur les Sections Efficaces

Les 3 évaluations étudiées se décomposent en 2 domaines énergétiques bien distincts :

- le domaine des résonances résolues (RRR) qui s'étend de  $10^{-5}$  eV à 350 keV (de 600 eV à 500 keV dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ ), que l'on trouve en MF2;
- le "continuum", où les sections sont données de manière ponctuelle, qui débute à la fin du RRR et s'achève à 20 MeV (données en MF3-MTx).

À noter que les évaluations pour le sodium ne contiennent pas de domaine non-résolu (URR).

### 1.2.1 Le Domaine des Résonances Résolues (RRR)

Le domaine des résonances de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ ,  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  utilise l'approximation MultiLevel Breit-Wigner (MLBW) de la théorie de la matrice- $R$  (cette théorie sera plus amplement développée dans le chapitre 3). Les paramètres de résonances pour JEFF-3.1.1 et JENDL-4.0 ont la même origine et sont donc identiques. La Table 1.1 ci-dessous liste les différentes résonances données dans l'Atlas of Neutron Resonances de S. Mughabghab [9] et par M. Moxon [10] comparées à celles des  $^{23}\text{Na}$  d'ENDF/B-VII.0 et de JEFF-3.1.1. L'évaluation américaine possède les données de covariances associées à ces paramètres (une MF32) qui sont elles aussi représentées dans la Table 1.1.

On peut remarquer que, pour un grande majorité des résonances figurant dans cette Table 1.1, il n'y a pas d'accord sur les nombres quantiques ( $\ell$  ou/et  $J^\pi$ ) et sur les largeurs, neutroniques ( $\Gamma_n$ ) et de capture radiative ( $\Gamma_\gamma$ ). Ces disparités sur ces paramètres vont se reporter directement sur les sections efficaces, comme nous pourrons le voir plus tard.

Origine	$E_0$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_n$ (eV)	$\Gamma_\gamma$ (eV)
Atlas Res.	-176.	0	+2.0	49755.	0.76
ENDF/B-VII.0					
JEFF-3.1.1	-100.	0	+2.0	1600.	0.30
Atlas Res.	$2.787 \pm 0.004$	0	+1.0	$367. \pm 7.$	$0.34 \pm 0.04$
ENDF/B-VII.0	$2.810 \pm 0.040$	0	+1.0	$376. \pm 15.$	$0.353 \pm 0.050$
JEFF-3.1.1	2.850	0	+1.0	411.	0.333
Atlas Res.	$7.6170 \pm 0.0114$	2	+3.0	0.0074	
ENDF/B-VII.0	$7.617 \pm 0.010$	1	-2.0	$0.0058 \pm 0.0030$	$0.60 \pm 0.30$
JEFF-3.1.1	7.617	1	-1.0	0.0296	1.00
Atlas Res.	$35.295 \pm 0.002$	1	-2.0	$1.48 \pm 0.16$	$0.82 \pm 0.09$
ENDF/B-VII.0	$35.390 \pm 0.122$	1	-1.0	$1.60 \pm 0.80$	$1.90 \pm 0.95$
JEFF-3.1.1	35.380	1	-3.0	0.549	0.788
Atlas Res.	$52.973 \pm 0.050$	1	-2.0	$1080. \pm 35.$	$0.99 \pm 0.10$

*suite page suivante*

<i>suite de la page précédente</i>					
Origine	$E_0$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_n$ (eV)	$\Gamma_\gamma$ (eV)
ENDF/B-VII.0	$53.220 \pm 0.039$	1	-2.0	$1112. \pm 16.$	$0.785 \pm 0.27$
JEFF-3.1.1	53.040	1	-2.0	1152	1.00
Atlas Res.	$113.47 \pm 0.11$	2	+1.0	$0.426 \pm 1.820$	
ENDF/B-VII.0					
JEFF-3.1.1	113.80	1	-2.0	0.144	0.216
Atlas Res.	$117.35 \pm 0.11$	1	-1.0	$25.8 \pm 0.8$	$4.24 \pm 0.60$
ENDF/B-VII.0	$117.43 \pm 0.02$	1	-1.0	$26.8 \pm 1.0$	$4.23 \pm 1.38$
JEFF-3.1.1					
Atlas Res.	$131.85 \pm 0.13$	2	+3.0	$0.64 \pm 0.20$	
ENDF/B-VII.0					
JEFF-3.1.1	131.90	1	-2.0	1.07	1.60
Atlas Res.	$143.07 \pm 0.14$	2	+0.0	$17.6 \pm 2.4$	$5.8 \pm 0.4$
ENDF/B-VII.0	$143.13 \pm 0.08$	1	-0.0	$16.5 \pm 9.9$	$7.1 \pm 3.0$
JEFF-3.1.1	143.10	1	-3.0	5.48	0.89
Atlas Res.	$190.10 \pm 0.19$	2	+3.0	18.2	$1.10 \pm 0.15$
ENDF/B-VII.0	$190.06 \pm 0.15$	2	+0.0	$18.2 \pm 9.0$	$9.30 \pm 4.69$
JEFF-3.1.1					
Atlas Res.	$201.00 \pm 0.20$	1	-1.0	$4580. \pm 350.$	$4.00 \pm 1.30$
ENDF/B-VII.0	$201.15 \pm 0.09$	1	-1.0	$4925. \pm 76.$	$2.94 \pm 0.36$
JEFF-3.1.1	200.2	1	-1.0	5470.	4.00
Atlas Res.	$213.60 \pm 0.21$	1	-0.0	$16460. \pm 1000.$	$4.90 \pm 0.80$
ENDF/B-VII.0	$214.30 \pm 0.41$	1	-0.0	$14280. \pm 241.$	$4.64 \pm 0.96$
JEFF-3.1.1	212.60	1	-0.0	16000.	4.90
Atlas Res.	$236.77 \pm 0.24$	2	+2.0	$54. \pm 11.$	$1.6 \pm 0.3$
ENDF/B-VII.0	$236.71 \pm 0.03$	2	+2.0	$65.2 \pm 7.0$	$1.59 \pm 0.42$
JEFF-3.1.1					
Atlas Res.	$239.15 \pm 0.24$	1	-2.0	$5455. \pm 100.$	$1.40 \pm 0.24$
ENDF/B-VII.0	$239.05 \pm 0.07$	1	-2.0	$5349. \pm 53.$	$1.20 \pm 0.12$
JEFF-3.1.1	237.50	1	-2.0	5500.	1.40
Atlas Res.	$242.81 \pm 0.24$	1		$426. \pm 36.$	
ENDF/B-VII.0					
JEFF-3.1.1	243.00	1	-0.0	1790.	4.61
Atlas Res.	$242.99 \pm 0.24$	0	+1.0	$345. \pm 17.$	$1.60 \pm 0.44$
ENDF/B-VII.0	$242.97 \pm 0.03$	0	+1.0	$328. \pm 18.$	$1.50 \pm 0.25$
JEFF-3.1.1					
Atlas Res.	$298.65 \pm 0.30$	0	+2.0	$2090. \pm 50.$	$1.14 \pm 0.15$
ENDF/B-VII.0	$298.32 \pm 0.04$	0	+2.0	$2038. \pm 27.$	$1.02 \pm 0.09$
JEFF-3.1.1	298.65	0	+2.0	2000.	1.14
<i>suite page suivante</i>					

suite de la page précédente					
Origine	$E_0$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_n$ (eV)	$\Gamma_\gamma$ (eV)
Atlas Res.	$299.54 \pm 0.30$	1	-3.0	$58. \pm 3.$	$1.2 \pm 0.2$
ENDF/B-VII.0	$299.41 \pm 0.05$	1	-1.0	$130. \pm 15.$	$2.56 \pm 0.77$
JEFF-3.1.1	299.20	1	-1.0	300.	2.60
Atlas Res.	$305.41 \pm 0.30$	2	+2.0	$16.0 \pm 2.3$	$2.0 \pm 0.4$
ENDF/B-VII.0	$305.20 \pm 0.20$	2	+0.0	$68.3 \pm 34.6$	$9.7 \pm 4.9$
JEFF-3.1.1					
Atlas Res.	$380.90 \pm 0.31$				
ENDF/B-VII.0					
JEFF-3.1.1	384.30	1	-1.0	50.	1.2
Atlas Res.	$394.94 \pm 0.39$	1	-1.0	$2510.0 \pm 0.2$	$12.0 \pm 2.7$
ENDF/B-VII.0	$392.32 \pm 0.36$	1	-1.0	$22760. \pm 247.$	$9.87 \pm 1.55$
JEFF-3.1.1	393.80	1	-1.0	25500.	1.2
Atlas Res.	$431.53 \pm 0.43$	1	-0.0	$5900. \pm 1000.$	$11.0 \pm 1.5$
ENDF/B-VII.0	$430.90 \pm 0.44$	2	+0.0	$4000. \pm 374.$	$5.29 \pm 1.58$
JEFF-3.1.1	431.30	1	-0.0	7600.	11.0
Atlas Res.	$449.72 \pm 0.45$	2	+2.0	$6870.0 \pm 0.2$	$4.2 \pm 0.7$
ENDF/B-VII.0	$448.82 \pm 0.18$	2	+2.0	$7026.0 \pm 167.3$	$3.52 \pm 0.65$
JEFF-3.1.1	445.50	2	+2.0	9000.	4.2
Atlas Res.	$486.50 \pm 0.49$	2			
Atlas Res.	$495.84 \pm 0.50$	2	+0.0	$535. \pm 52.$	$1.6 \pm 0.4$
Atlas Res.	$510.22 \pm 0.51$	2	+4.0	55.	$0.59 \pm 0.14$
Atlas Res.	$539.66 \pm 0.44$	0	+1.0	$47000. \pm 15000.$	$10.7 \pm 2.0$
JEFF-3.1.1	537.50	0	+1.0	35300.	10.6
Atlas Res.	$566.11 \pm 0.57$	2	+4.0		
Atlas Res.	$597.67 \pm 0.60$	1	-1.0	$22200. \pm 3800.$	$0.800 \pm 0.016$
JEFF-3.1.1	598.00	1	-1.0	25900.	0.8
Atlas Res.	602.20	2	+4.0	104.	$7. \pm 2.$
Atlas Res.	629.91	2	+0.0	263.	
Atlas Res.	686.73	2		380.	
Atlas Res.	710.79	2	+4.0	$61000. \pm 1000.$	
Atlas Res.	715.43	1	-3.0	45000.	
Atlas Res.	753.37	2	+3.0	1000.	
Atlas Res.	771.39	1	-1.0	5830.	
Atlas Res.	784.29	1	-3.0	32500.	
Atlas Res.	911.20	2	+3.0	40100.	
Atlas Res.	985.10	2	+1.0	27200.	

TABLE 1.1. Paramètres de résonances donnés dans la littérature et les évaluations actuelles (les données incertaines proposées dans l'Atlas of Neutron Resonance sont colorées en rouge)

Ces paramètres de résonances sont utilisés ensuite par la théorie et permettent de calculer de manière analytique les sections efficaces totale, élastique et de capture radiative.

Parfois, les évaluateurs n'arrivent pas à reproduire assez fidèlement les données expérimentales uniquement avec des paramètres de résonances. Ils ont alors recours à une section dite de "background" (positive ou négative, donnée en MF3) qui va s'ajouter aux sections reproduites à partir des paramètres de résonances. Dans les 3 évaluations étudiées, on trouve des sections de background différentes, si bien que même si les paramètres de résonances sont identiques, il arrive d'obtenir des sections efficaces différentes au final. Cependant, l'historique de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  précise que le domaine résolu (RRR) a été repris en intégralité de l'évaluation du sodium de JENDL-3.2 et qui demeure inchangé dans JENDL-4.0.

La Table 1.2 donne un aperçu des sections efficaces élastique et de capture dans la région thermique ( $v_n = 2200 \text{ m.s}^{-1}$ ) pour les 3 évaluations étudiées ainsi que celles proposées par Mughabghab (les sections pour JENDL-4.0 sont accompagnées d'incertitudes car cette évaluation possède une MF33). On voit déjà apparaître des différences significatives bien que ce domaine d'énergie n'ait que peu d'intérêt dans l'étude des réacteurs à neutrons rapides (RNR).

$\sigma_{th}$	$^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$	$^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$	$^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$	Atlas Res.
$(n, el)$	3.090	$3.089 \pm 3.25\%$	$3.393 \pm 0.46\%$	$3.038 \pm 0.23\%$
$(n, \gamma)$	0.531	$0.531 \pm 8.70\%$	$0.528 \pm 15.21\%$	$0.517 \pm 0.70\%$

TABLE 1.2. Sections efficaces élastique et de capture thermique dans la littérature ainsi que pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0

La Figure 1.1 présente les sections efficaces totales pour les évaluations étudiées et les compare aux données expérimentales disponibles dans la base de données EXFOR. Par ailleurs, on observe en Figure 1.2 les différences relatives sur cette même section par rapport à  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ . Tout d'abord, on remarque qu'il n'y a pas de différence entre  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  dans le domaine résolu puisque ces 2 évaluations possèdent le même jeu de paramètres de résonance ainsi que les mêmes sections de "background". Par contre, des écarts non-négligeables entre la section totale d'ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1 sont présents, notamment au niveau de la résonance de type  $s$  à 2.8 keV qui conduisent à des variations de 10-15% sur plus d'une décade en énergie (entre 1 et 10 keV environ). Des différences ( $< 5\%$ ) sont visibles également entre 30 et 50 keV. Après 200 keV, des fluctuations apparaissent certainement dues aux légères différences sur les énergies des paramètres de résonances entre  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ .

La section de capture radiative pour le sodium est très vite inférieure au millibarn (après

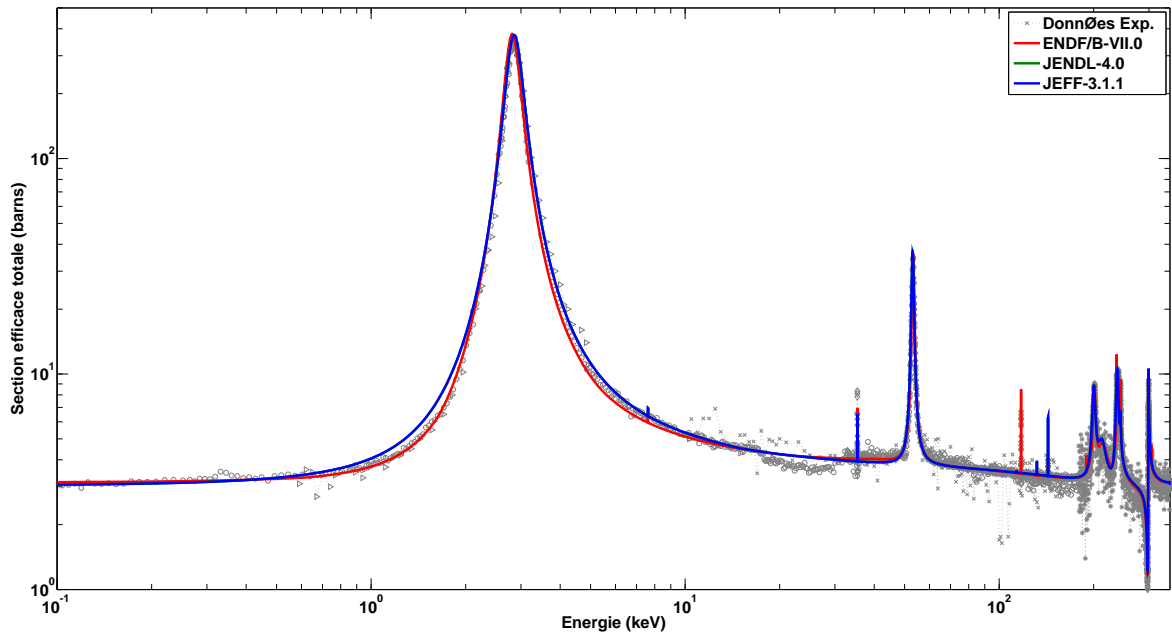


FIGURE 1.1. Sections efficaces totale pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 dans le RRR comparées avec les données expérimentales d'EXFOR

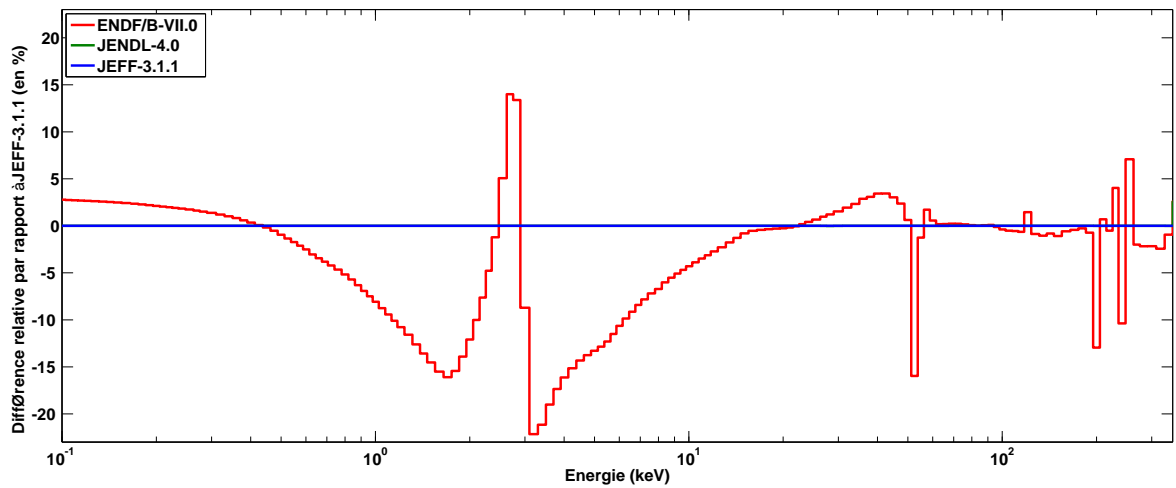


FIGURE 1.2. Différences relatives (en %) sur la section efficace totale de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1



la “grosse” résonance à 2.8 keV), elle sera donc négligée dans ce chapitre.

### 1.2.2 Le Continuum

Au-delà de 350 keV débute le domaine en énergie où les sections sont données de manière ponctuelle dans les 3 évaluations étudiées. Pour la physique des RNR, ce domaine a toute son importance puisque les flux neutroniques dans ces type de cœur atteignent leur maximum autour de cette énergie. Cela signifie que les différences entre les données nucléaires dans cette gamme d'énergie vont avoir un impact significatif sur les calculs intégraux (le chapitre 2 est dédié à l'étude de ce problème).

Pour plus de clarté, nous avons décidé de séparer le domaine en énergie du continuum en deux sous-domaines :

- $350 \text{ keV} < E < 2 \text{ MeV}$  : des mesures microscopiques avec une résolution suffisante existent encore dans cette gamme d'énergie ;
- $2 \text{ MeV} < E < 20 \text{ MeV}$  : moins de mesures sont disponibles, voire aucune, et les sections efficaces ont alors une origine bien souvent purement théorique.

#### 1.2.2.1 Sections Efficaces pour $350 \text{ keV} < E < 2 \text{ MeV}$

##### • Section Totale :

Dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ , la section totale correspond aux mesures (1976) de D.C. Larson [11]. L'évaluation de JENDL-4.0 est également basée sur les mesures de Larson pour la section efficace totale. D'après les commentaires donnés dans l'historique de l'évaluation, on peut supposer que la section efficace totale de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  suit les mesures (1968) de S. Cierjacks [12] cependant cette dernière se trouve bien au-dessus de toutes mesures microscopiques dans ce domaine en énergie. Ces sections sont affichées en Figure 1.3 avec les mesures microscopiques existantes.

La Figure 1.4 montre les différences relatives sur la section totale par à JEFF-3.1.1. On y voit que la section de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  est 10 à 15% supérieure aux autres évaluations, ces dernières basées sur des expériences microscopiques.

Il est nécessaire de faire un aparté sur la section totale proposée dans l'évaluation de JEFF-3.1.1 entre 350 keV et 2 MeV car l'historique dans cette évaluation est peu clair. Après quelques investigations, on découvre qu'une erreur s'est produite pendant le montage du fichier évalué : la section totale est en réalité la somme des mesures de section totale de D.C. Larson [11] et des mesures de section inélastique de S. Kopecky [13] comme cela est

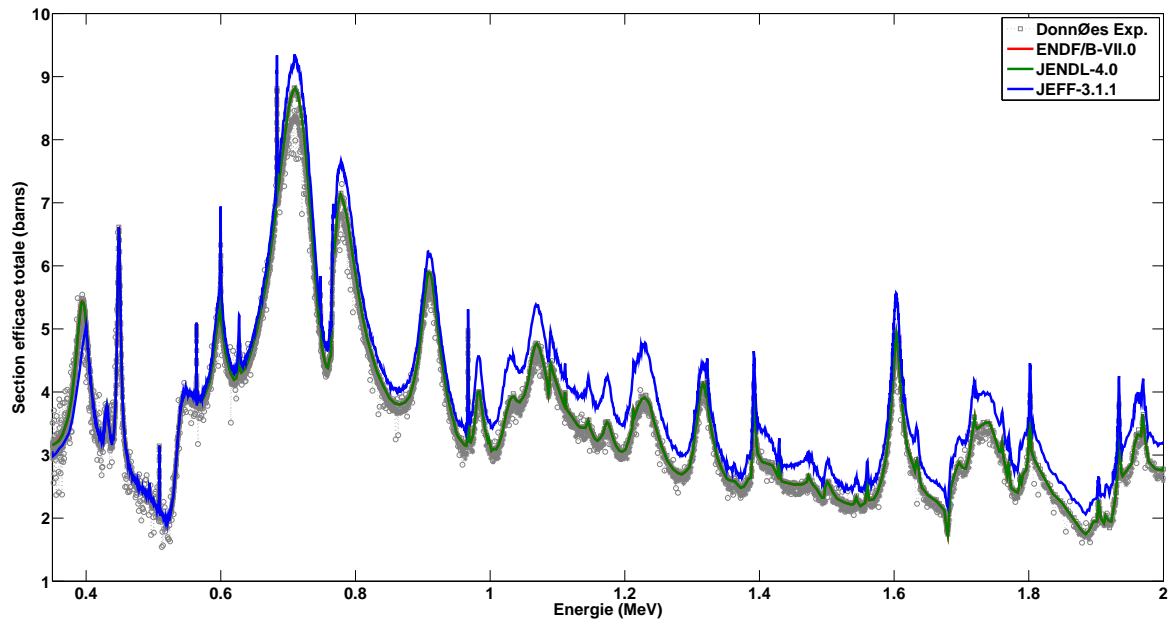


FIGURE 1.3. Sections efficaces totales pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 350 keV et 2 MeV comparées avec les données expérimentales d'EXFOR

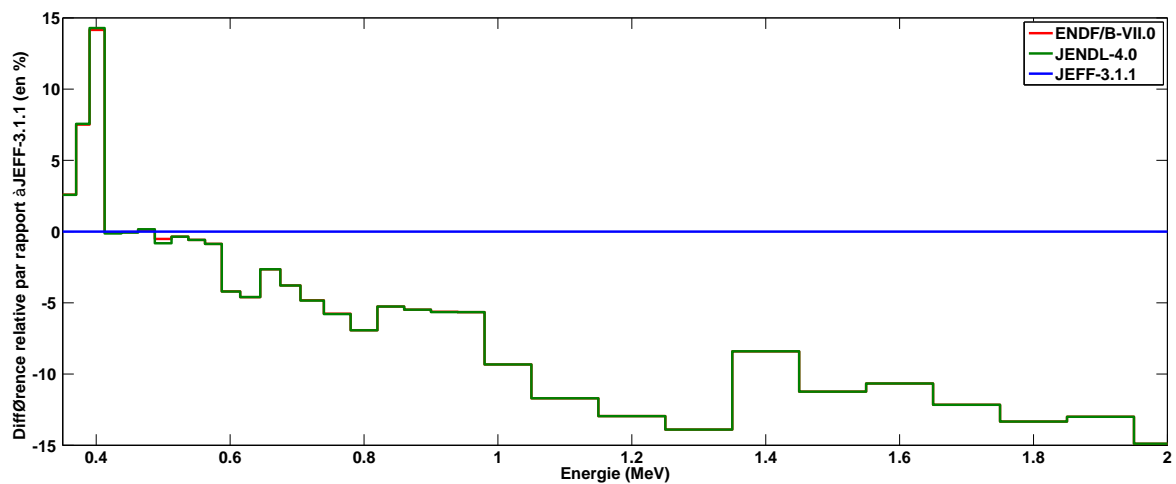


FIGURE 1.4. Différences relatives (en %) sur la section efficace totale de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 350 keV et 2 MeV

illustré sur la Figure 1.5. Par conservation, la section élastique dans JEFF-3.1.1 suit la même tendance.

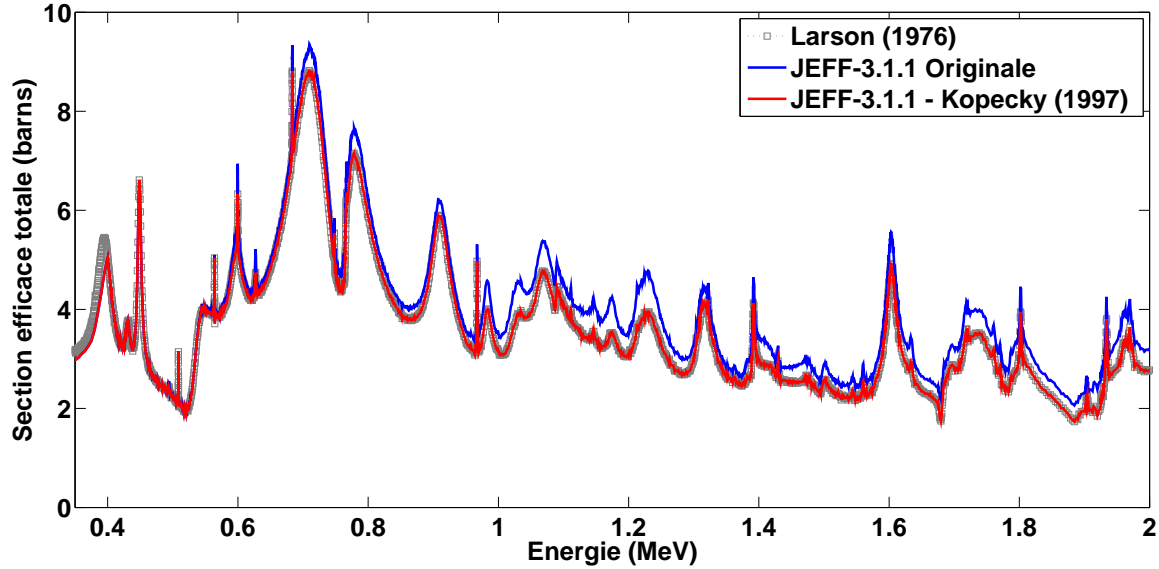


FIGURE 1.5. Sections efficaces totales du sodium dans JEFF-3.1.1, dans sa version originale et dans sa version corrigée (retrait des mesures de section inélastique de Kopecky), comparées aux mesures de section totale de Larson

#### • Section Inélastique :

Le 1<sup>er</sup> niveau inélastique du  $^{23}\text{Na}$  s'ouvre à 440 keV (énergie du seuil) et la section correspondante devient rapidement compétitive avec la section élastique. La section inélastique dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  correspond à d'anciennes mesures (1971) avec une résolution assez faible de F. Perey [14]. Les récentes mesures (1997) à haute résolution faite à l'IRMM-Geel par S. Kopecky [13] ont fidèlement été reprises dans  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ . Pour  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$ , on retrouve les mesures de Kopecky mais normalisées d'un facteur 1.25, déterminé à partir d'un benchmark japonais. La Figure 1.6 montre les sections efficaces inélastiques de chaque évaluation ainsi que les données microscopiques.

Sur les différences relatives (Figure 1.7), on retrouve le facteur 1.25 entre  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$ . De plus, on observe des écarts compris entre 10 et 40% avec l'évaluation américaine.

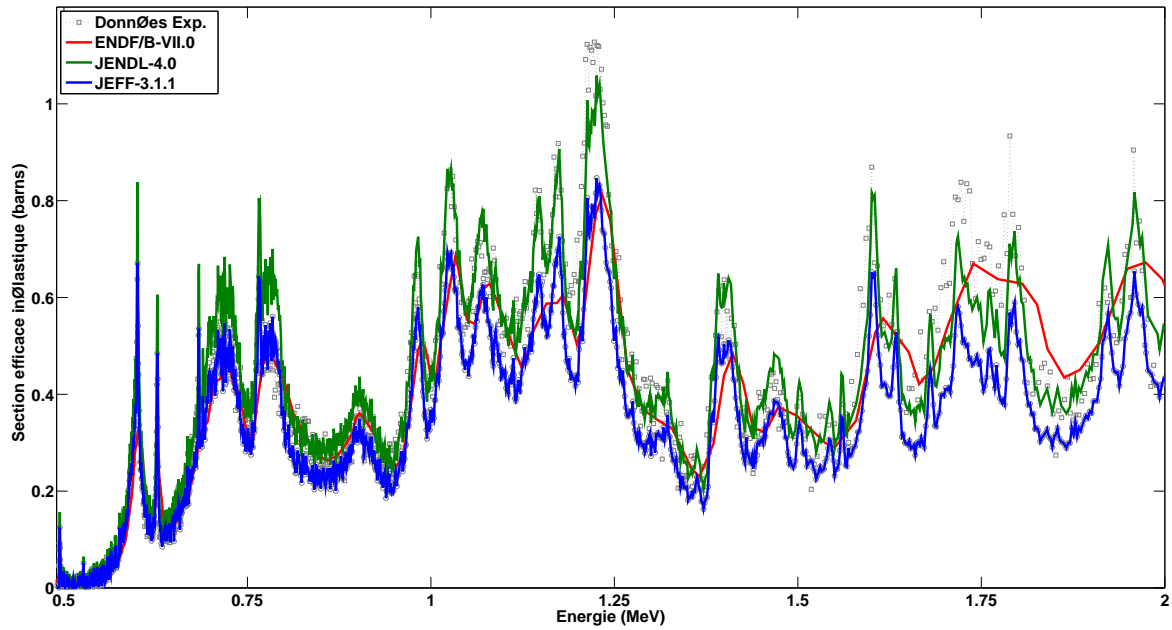


FIGURE 1.6. Sections efficaces inélastiques pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 500 keV et 2 MeV comparées avec les données expérimentales d'EXFOR

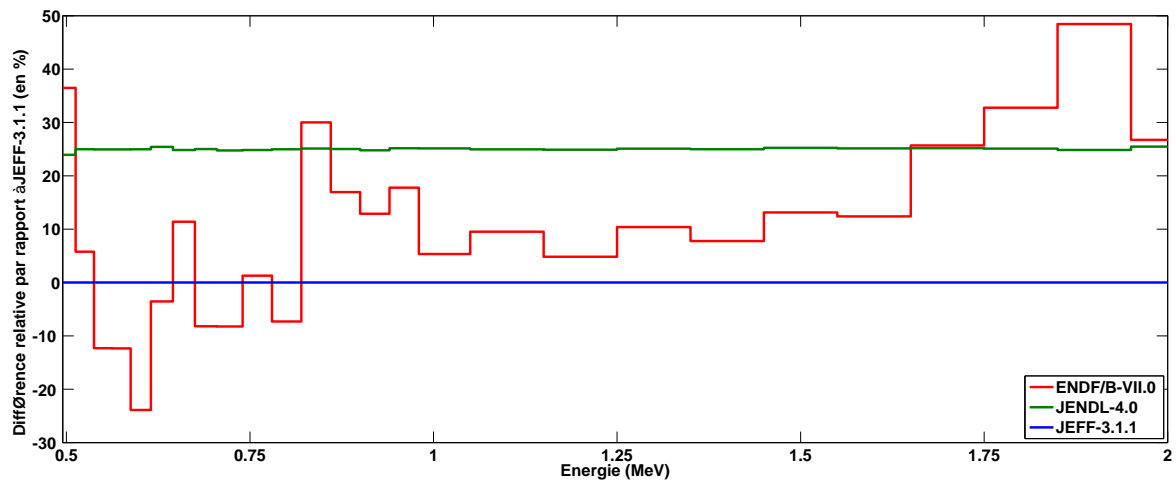


FIGURE 1.7. Différences relatives (en %) sur la section efficace inélastique de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 500 keV et 2 MeV

1.2.2.2 Sections Efficaces pour  $2 \text{ MeV} < E < 20 \text{ MeV}$ 

## • Section Inélastique :

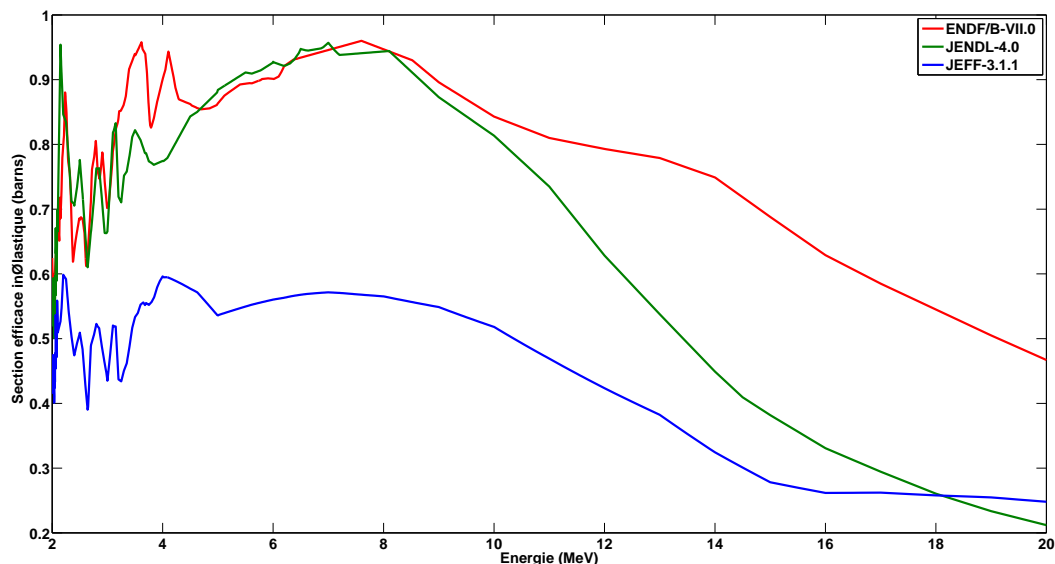


FIGURE 1.8. Sections efficaces inélastiques pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 2 et 20 MeV

Dans ce domaine en énergie, on ne trouve que très peu de mesures (et bien souvent très anciennes) pour les différents niveaux discrets inélastiques. C'est pourquoi les 3 évaluations utilisent après 3 MeV (*cf.* Figure 1.8) des sections inélastiques calculées à l'aide de modèles théoriques plutôt que de se baser sur des mesures microscopiques quelquefois discutables.

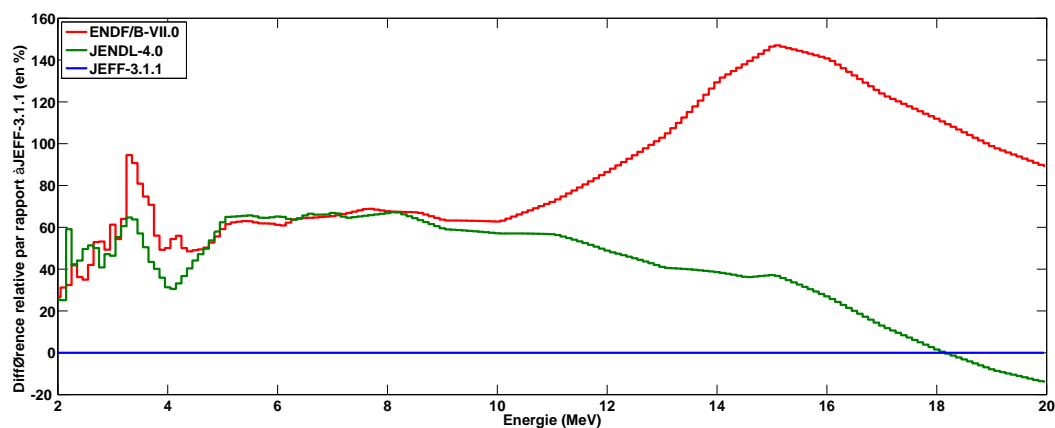


FIGURE 1.9. Différences relatives (en %) sur la section efficace inélastique de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 2 et 20 MeV

Un point important à noter est la section inélastique pour  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ . En effet, E. Fort, en suivant les tendances indiquées par les ajustements de type intégral de la bibliothèque ERALIB1, a drastiquement modifié les sections élastique et inélastique issues de l'évaluation dans JEF-2.2, respectivement d'un facteur 1.32 et 0.69.

Sur la Figure 1.9, on observe donc des écarts très importants, souvent supérieurs à 50%, sur cette section efficace entre  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et les autres évaluations. On remarque également qu'à partir de 10 MeV, la section inélastique de  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  est bien plus importante que pour les évaluations européenne et japonaise. Or, de nouvelles réactions à seuil s'ouvrent dans cette gamme d'énergie et notamment les réactions  $(n, np)$  (seuil à 9.3 MeV) et  $(n, n\alpha)$  (seuil à 11 MeV), que l'on trouve dans  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  mais pas dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ . On peut alors penser que ces sections efficaces manquantes dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  ont directement été reportées dans la section inélastique et ce qui pourrait expliquer ces différences importantes avec les autres évaluations.

• **Section Totale :**

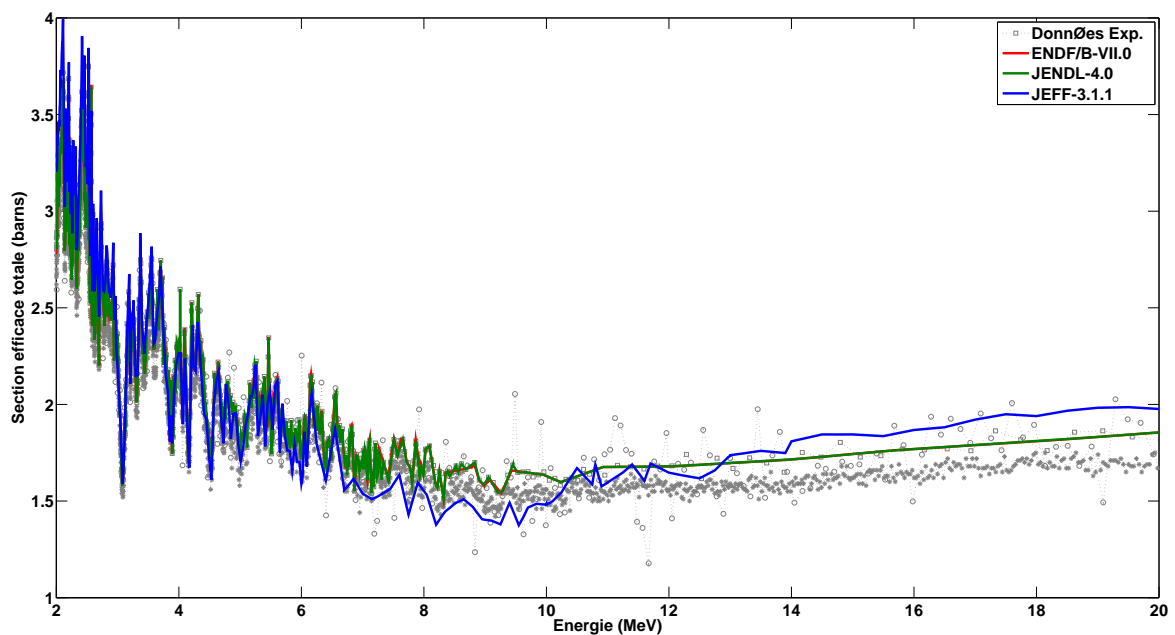


FIGURE 1.10. Sections efficaces totales pour les évaluations du sodium dans JEFF-3.1.1, JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 entre 2 et 20 MeV comparées avec les données expérimentales d'EXFOR

Sur la Figure 1.10, on peut voir que  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  suivent toujours les mesures de Larson, ces dernières montrent d'ailleurs des structures résonantes importantes jusqu'à

environ 6-8 MeV. Comme expliqué auparavant, les fortes modifications effectuées par E. Fort sur les sections élastique et inélastique ont eu des conséquences directes sur la section totale dans  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et cette dernière ne suit plus les mesures de Cierjacks comme c'était le cas dans JEF-2.2. Ainsi, on voit apparaître sur la Figure 1.11 des écarts variants entre -10 et +15% entre la section totale de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et les deux autres évaluations, basées sur les données expérimentales de Larson.

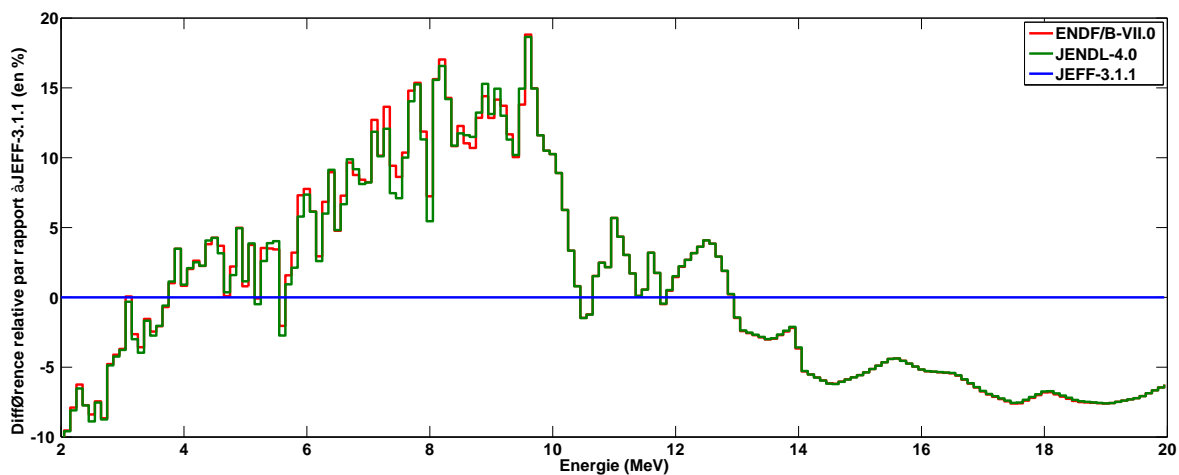


FIGURE 1.11. Différences relatives (en %) sur la section efficace totale de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0 par rapport à JEFF-3.1.1 entre 2 et 20 MeV

### 1.3 Distributions Angulaires

Dans la section précédente, on a pu voir que les évaluations américaine, japonaise et européenne du sodium présentait des différences, parfois non-négligeables, concernant les sections efficaces. Les distributions angulaires sont un autre aspect des données nucléaires d'une évaluation qui, jusqu'à présent, étaient bien souvent considérées comme secondaires en termes d'importance. Or, ces données permettent d'avoir une mesure de l'anisotropie, élément indispensable pour un calcul neutronique en physique des réacteurs et tout particulièrement pour les RNR. Par ailleurs, plus le noyau cible sera léger et plus l'impact de l'anisotropie sera significatif, comme cela est le cas pour le sodium.

Dans les trois évaluations du  $^{23}\text{Na}$  étudiées, les distributions angulaires sont fournies sous forme de coefficients de polynômes de Legendre  $a_l$  (on les trouve parfois sous forme tabulées, par exemple, lorsque le nombre de coefficients nécessaires devient trop grand). La distribution de probabilité  $f(\mu, E)$  s'écrit de la manière suivante :

$$f(\mu, E) = \sum_{l=0}^{N_l} \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu) \quad (1.1)$$

$$\text{où : } \left\{ \begin{array}{l} \mu \text{ est le cosinus de l'angle de renvoi, soit dans le référentiel du laboratoire,} \\ \text{soit dans le référentiel du centre de masse} \\ E \text{ est l'énergie incidente du neutron} \\ l \text{ est l'ordre du polynôme de Legendre} \\ N_l \text{ est l'ordre maximal, dépendant de } E, \text{ de la suite polynomiale} \\ a_l \text{ est le } l^{\text{e}} \text{ coefficient de la suite polynomiale, avec } a_0 = 1.0 \end{array} \right.$$

D'après l'Équation (1.1), on trouve l'anisotropie moyenne  $\bar{\mu}$  avec le 1<sup>er</sup> coefficient des polynômes de Legendre. En effet, la série des polynômes de Legendre constitue une base orthogonale ce qui nous amène à :

$$\bar{\mu} = \int_{-1}^1 f(\mu, E) \mu d\mu = \frac{2 \times 1 + 1}{2} a_1 \int_{-1}^1 \mu^2 d\mu = a_1 \quad (1.2)$$

Ainsi,  $\bar{\mu}$  nous permet d'avoir un bon aperçu de la représentation des distributions angulaires proposées dans une évaluation. Dans la suite, nous allons étudier l'évolution de ce coefficient pour les renvois angulaires élastiques et inélastiques dans les évaluations du  $^{23}\text{Na}$ .



### 1.3.1 Renvois Élastiques

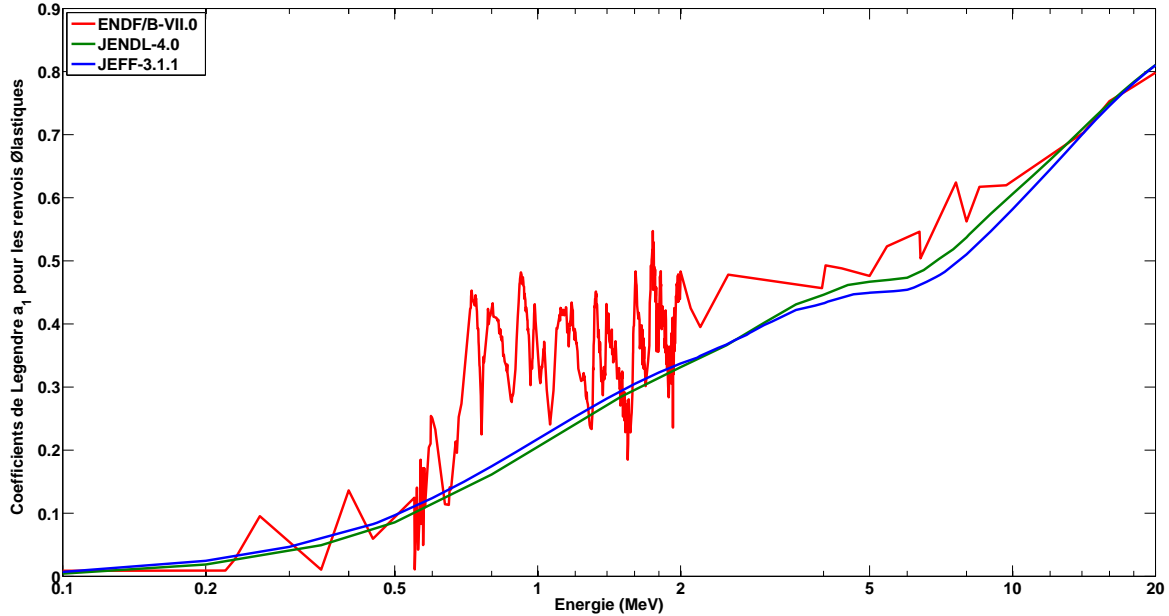


FIGURE 1.12. Coefficients  $a_1$  des polynômes de Legendre pour les renvois élastiques en fonction de l'énergie incidente des neutrons

Les distributions angulaires pour  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  proviennent d'un calcul par modèle optique tandis que celles de  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  sont issues des données expérimentales (1976) de W. Kinney [15], entre 550 keV et 2 MeV, qui permettent de reproduire les structures résonnantes encore très présentes dans ce domaine d'énergie. Avant 100 keV, on peut considérer les renvois angulaires élastiques comme isotropes dans le système du centre de masse (CM).

On observe sur la Figure 1.12 le  $\bar{\mu}$  pour chaque évaluation du  $^{23}\text{Na}$  suivant l'énergie incidente et les différences importantes entre ce qui est calculé à partir d'un modèle optique (JEFF-3.1.1 et JENDL-4.0) et ce qui est mesuré avec une résolution satisfaisante (ENDF/B-VII.0).

Sur la Figure 1.13, on peut voir les distributions angulaires à 700 keV et à 2.5 MeV et noter que, plus l'énergie incidente devient grande et plus les évaluations étudiées proposent des données similaires. Ceci est probablement dû à l'usage systématique de modèles optiques dans les trois évaluations pour des énergies de l'ordre du MeV. Par contre, on remarque qu'à 700 keV, les renvois angulaires dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  sont nettement plus piqués vers l'avant ( $\mu > 0$ ) que pour les autres évaluations. Ce genre d'écart dans cette gamme d'énergie, typique d'un spectre de RNR, peut avoir un impact non négligeable sur des grandeurs intégrales.

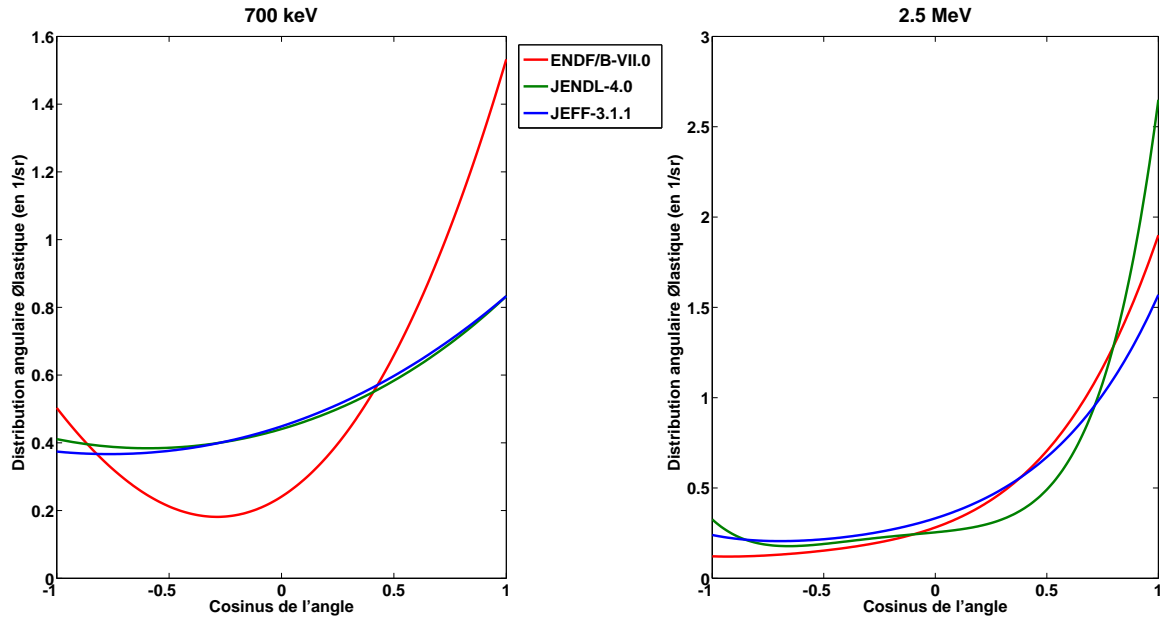


FIGURE 1.13: Probabilités de renvois angulaires élastiques à 700 keV et 2.5 MeV

### 1.3.2 Renvois Inélastiques

Chaque niveau inélastique discret dans les évaluations doit être décrit de manière similaire à la réaction élastique concernant les renvois angulaires. C'est notamment le cas dans  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  ( $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  dispose uniquement de distributions angulaires élastiques, *i.e.* on suppose alors que les renvois inélastiques sont isotropes dans le CM), qui fournissent des données provenant de calculs par modèle optique.

La Figure 1.14 détaille le  $\bar{\mu}$  pour le 1<sup>er</sup> niveau inélastique où des écarts peuvent être constatés, surtout après 10 MeV, mais ces derniers sont assez faibles en comparaison des renvois élastiques détaillés dans le paragraphe précédent.

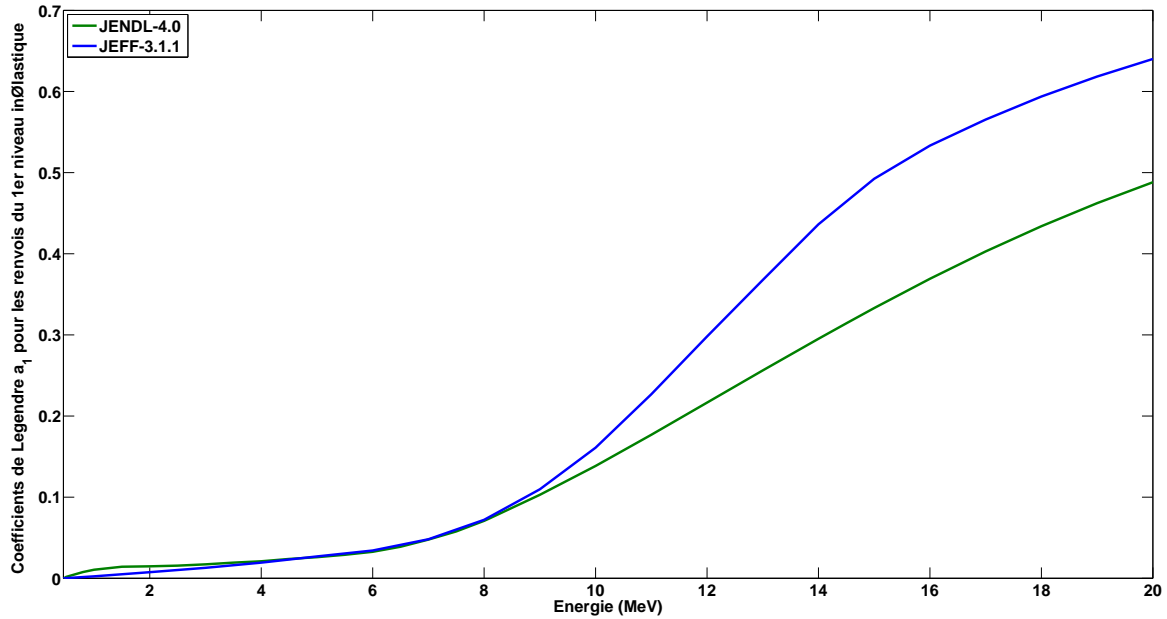


FIGURE 1.14. Coefficients  $a_1$  des polynômes de Legendre pour les renvois du 1<sup>er</sup> niveau inélastique en fonction de l'énergie incidente des neutrons

## 1.4 Distributions Énergétiques

Les distributions énergétiques sont nécessaires pour les réactions non-discrètes, par exemple le continuum de la réaction inélastique ou encore la réaction  $(n, \alpha)$ . Ces données doivent être accompagnées de distributions angulaires puisque la formule bijective de la cinématique ne fonctionne plus ici. Nous ne ferons pas de comparaison entre les évaluations du  $^{23}\text{Na}$  étudiées car cela concerne des réactions qui apparaissent après 4 MeV et qui ont généralement peu d'impact, même dans les réacteurs rapides.

## 1.5 Covariances sur les Sections Efficaces

Depuis une dizaine d'années, les physiciens des réacteurs demandent que les matrices de covariances associées aux sections efficaces (MF33) soient produites dans l'évaluation car elles permettent de connaître par exemple l'incertitude sur un calcul intégral due aux données nucléaires. Cependant, ce genre d'information est encore rarement fourni dans les fichiers évalués, même pour les isotopes majeurs tels que l' $^{235}\text{U}$  ou le  $^{239}\text{Pu}$ . Les données de covariances en MF33 regroupent les incertitudes relatives à une section partielle ainsi que les corrélations existantes avec d'autres sections partielles.

Dans le cas du  $^{23}\text{Na}$ , seule l'évaluation dans JENDL-4.0 est complète puisqu'elle possède des covariances au niveau des résonances (en MF32, qui permet de prendre en compte l'effet de dilution et l'effet Doppler sur les incertitudes) et au niveau des sections ponctuelles (MF33) ( $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  contient également des covariances sur les distributions angulaires (MF34) mais les codes de calcul neutroniques actuels n'ont pas les outils de perturbations/sensibilités pour les utiliser correctement). Dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ , les résonances ont une matrice de covariances associées (cf. Table 1.1 où sont détaillées les incertitudes pour les paramètres de résonances de l'évaluation du sodium américaine) mais les covariances pour les sections efficaces ponctuelles (MF33) ont été retirées de la version précédente de l'évaluation (le  $^{23}\text{Na}$  d'ENDF/B-VI.8), ces dernières jugées de faible qualité par M. Herman<sup>1</sup>. L'évaluation dans JEFF-3.1.1 ne contient aucune donnée relative aux covariances.

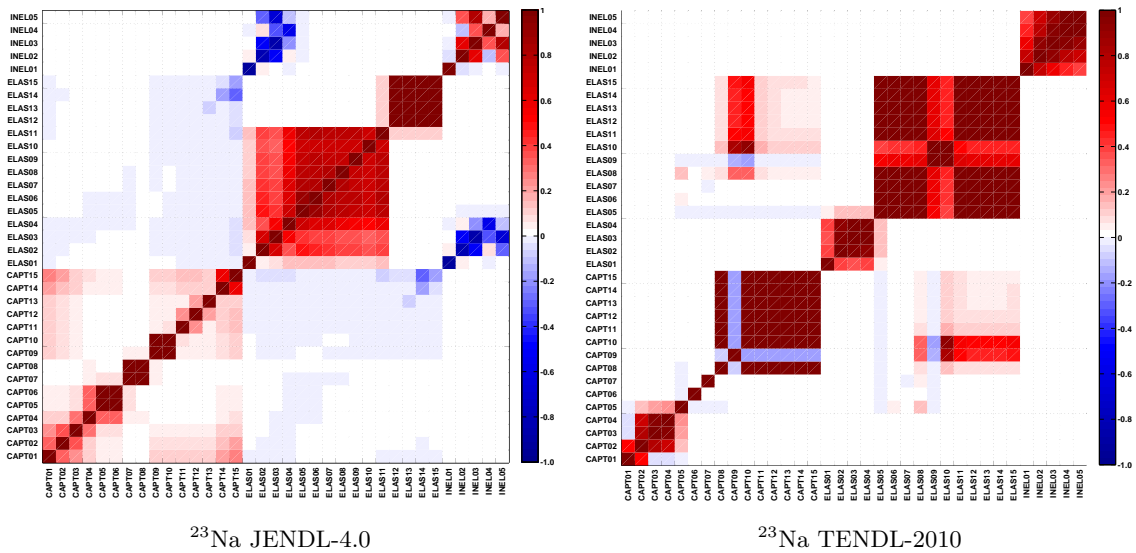


FIGURE 1.15. Matrice de corrélations pour les réaction élastique, inélastique et de capture proposées dans les évaluations du sodium de JENDL-4.0 et TENDL-2010

La bibliothèque TENDL-2010 [16] (pour *TALYS Evaluated Nuclear Data Library*) propose une évaluation du sodium avec un jeu de matrices de covariances pour toutes les sections partielles. Par ailleurs, un ensemble d'institutions ont travaillé, dans le cadre du Sous-Groupe 26 de la NEA [2], à l'élaboration de plusieurs covariances appelées BOLNA<sup>2</sup> pour les isotopes majeurs dans les RNR. Les matrices BOLNA sont dites "low-fidelity" puisqu'elles ont été créées à partir d'un consensus entre experts et ne sont pas liées à une bibliothèque en particulier.

1. Mike Herman travaille au National Nuclear Data Center à BNL (Brookhaven National Laboratory) et s'occupe notamment des évaluations dans la bibliothèque ENDF/B

2. BOLNA pour BNL, ORNL, LANL, NRG, ANL qui sont les laboratoires ayant contribué à la constitution de ce jeu de covariances

Un format à 15 groupes est employé dans BOLNA, ce qui impose son utilisation pour les autres jeux de covariances disponibles. La Table 1.3 recense les incertitudes pour les sections élastique, inélastique et de capture qui sont proposées dans JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA pour le sodium. À partir de cette table, on s'aperçoit que les incertitudes sont assez mal connues puisque des différences de plusieurs centaines de pourcents sont visibles parfois sur certaines réactions, notamment dans les groupes d'énergie rapides.

Concernant les corrélations, la Figure 1.15 montre également des disparités importantes et plus particulièrement sur les corrélations entre 2 réactions différentes (que l'on appelle généralement *cross-correlations*). Ainsi, on peut voir des anti-corrélations (corrélations négatives) entre les réactions élastique et inélastique dans l'évaluation de JENDL, ce qui est légitime puisqu'il existe une compétition entre ces deux réactions pour les renvois de neutrons (compétition contrainte par la section totale). À l'inverse, aucune corrélation n'existe entre ces réactions dans les données de TENDL. Par ailleurs, on observe une plus grande corrélation entre les groupes d'une même réaction dans TENDL que dans JENDL (la réaction de capture en particulier).

Nous apprécierons mieux l'importance des différences sur ces matrices de covariances dans le chapitre suivant lorsque nous aborderons l'usage d'un ajustement multigroupe.

N° Groupe	En. Inf. - En. Sup. (MeV)	Section	Origine		
			JENDL-4.0	TENDL-2010	BOLNA
1	6.070E+00 - 1.960E+00	Élastique	27.56	3.43	1.80
		Inélastique	35.28	4.15	18.79
		Capture	8.26	17.52	46.44
2	2.230E+00 - 6.070E+00	Élastique	6.23	3.75	4.62
		Inélastique	8.90	3.94	8.87
		Capture	8.28	4.44	24.33
3	1.350E+00 - 2.230E+00	Élastique	5.57	3.80	3.72
		Inélastique	19.62	4.44	12.56
		Capture	13.00	3.72	1.70
4	4.980E-01 - 1.350E+00	Élastique	3.21	3.77	3.01
		Inélastique	16.63	6.61	28.00
		Capture	15.55	3.37	7.44
5	1.830E-01 - 4.980E-01	Élastique	5.08	4.71	3.31
		Inélastique	20.00	8.71	50.00
		Capture	12.93	0.24	6.81
6	6.740E-02 - 1.830E-01	Élastique	4.57	6.92	3.25
		Capture	12.93	23.33	23.59
7	2.480E-02 - 6.740E-02	Élastique	5.42	5.24	2.38
		Capture	10.29	1.69	6.79
8	9.120E-03 - 2.480E-02	Élastique	4.00	6.39	2.87
		Capture	10.60	1.46	6.63
9	2.030E-03 - 9.120E-03	Élastique	7.43	1.88	3.23
		Capture	8.37	1.12	1.18
10	4.540E-04 - 2.030E-03	Élastique	11.31	3.11	4.93
		Capture	8.36	1.88	2.28
11	2.260E-05 - 4.540E-04	Élastique	2.43	5.25	4.76
		Capture	7.52	1.92	2.30
12	4.000E-06 - 2.260E-05	Élastique	2.75	5.65	4.73
		Capture	7.55	1.91	2.29
13	5.400E-07 - 4.000E-06	Élastique	2.78	5.66	4.71
		Capture	8.59	1.91	2.29
14	1.000E-07 - 5.400E-07	Élastique	2.90	5.65	4.70
		Capture	8.70	1.91	2.29
15	1.000E-10 - 1.000E-07	Élastique	3.23	5.45	4.59
		Capture	3.37	1.91	2.07

TABLE 1.3. Incertitudes relatives (en %) sur les sections efficaces élastique, inélastique et de capture provenant des évaluations du sodium de JENDL-4.0 et TENDL-2010 et de la base de données de covariances BOLNA

## 1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les données nucléaires proposées dans trois évaluations du sodium ( $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ ,  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$ ) provenant de bibliothèques internationales.

En ce qui concerne les sections efficaces, on a pu remarquer des écarts importants, en particulier sur la section totale après 1 MeV malgré les données expérimentales existantes et en assez grand nombre. Ces mesures n'existent pas pour la section inélastique au-delà de 2 MeV et cela explique en partie les grandes disparités entre les évaluations pour cette réaction. L'évaluation  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  est celle qui suit le moins les données expérimentales. En effet, une maladresse, pendant la reconstruction de la section totale, s'est insérée et augmente de façon non négligeable les sections totale et élastique entre 450 keV et 2 MeV (ajout de plusieurs mesures différentes...). Au-delà de 2 MeV, les sections élastique et inélastique ont été drastiquement re-normalisées par rapport à celles proposées dans JEF-2.2 afin d'obtenir de meilleurs accords avec les grandeurs intégrales.

Par ailleurs, on a vu des différences significatives sur les distributions angulaires élastiques entre  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ , qui utilise des mesures microscopiques et les deux autres évaluations qui se basent sur des modèles optiques.

En outre, les matrices de covariances sur les sections efficaces, quand celles-ci sont présentes dans les évaluations, diffèrent grandement. Ces données sont aujourd'hui encore trop souvent négligées lors du processus d'évaluation malgré les besoins croissants des physiciens des réacteurs.

Dans le prochain chapitre, un point est fait quant à l'impact de ces nombreux écarts dans les données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$  sur les grandeurs intégrales liées aux RNR.

# Qualification : Impact du $^{23}\text{Na}$ sur les Grandeurs Intégrales

---

## Sommaire

<b>2.1</b>	<b>Grandeurs Neutroniques d'Intérêt</b>	<b>28</b>
2.1.1	La Réactivité	28
2.1.2	L'Effet en Réactivité de Vidange Sodium	28
<b>2.2</b>	<b>La Base de Données Expérimentales</b>	<b>29</b>
2.2.1	Présentation des Maquettes	31
<b>2.3</b>	<b>Impact des Données Nucléaires du Sodium sur les Quantités d'Intérêt</b>	<b>34</b>
2.3.1	Schéma de Calcul Déterministe	34
2.3.2	Schéma de Calcul Stochastique	36
2.3.3	Impact sur les Réactivités	36
2.3.4	Impact sur les Effets en Réactivité de Vidange Sodium (SVRE)	40
<b>2.4</b>	<b>Tentative d'Ajustement des Sections Multigroupes</b>	<b>49</b>
2.4.1	Rappel de la Théorie pour l'Ajustement Multigroupe	49
2.4.2	Avantages et Inconvénients de cette Méthode	50
2.4.3	Obtention des Matrices de Sensibilités	51
2.4.4	Données d'Entrée avant l'Ajustement	52
2.4.5	Comparaison des Tendances Obtenues <i>a posteriori</i>	53
<b>2.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>58</b>

---

Dans les Réacteurs à Neutrons Rapides avec caloporteur au Sodium (*Sodium Fast Reactor* ou SFR, dans son concept intégré qui est étudié au CEA), le combustible, généralement du Plutonium sous forme oxyde ( $\text{U-PuO}_2$ ), baigne littéralement<sup>1</sup> dans le sodium qui est donc présent en grande quantité (de 30 à 50% volumique suivant les configurations). On comprend alors aisément que cet isotope aura un poids non négligeable dans les calculs neutroniques des SFR. Ainsi, ce chapitre est dédié à l'étude de l'impact des données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$  sur les grandeurs intégrales pour les SFR [17], qui sont définies dans la section suivante.

1. L'oxyde est entouré par une gaine en acier pour éviter les réactions chimiques avec le sodium



## 2.1 Grandeurs Neutroniques d'Intérêt

Dans l'étude des SFR, on trouvera deux types de grandeurs intégrales qui seront plus ou moins impactés par les données nucléaires du sodium : la réactivité et l'effet en réactivité de vidange sodium.

### 2.1.1 La Réactivité

La réactivité  $\rho$  (exprimée en pcm ou  $10^{-5}$ ) se déduit du coefficient de multiplication effectif  $k_{\text{eff}}$  via la formule :

$$\rho = 1 - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \quad (2.1)$$

Ainsi, si la réactivité est positive, le réacteur est en régime sur-critique et sa puissance va augmenter. Au contraire, si  $\rho < 0$ , on est alors en régime sous-critique et la puissance du réacteur diminue. Enfin, on appelle régime critique lorsque la réactivité est nulle, le réacteur est dans ce cas à l'équilibre. On cherche à obtenir le régime critique lors de la phase de production d'électricité du réacteur.

### 2.1.2 L'Effet en Réactivité de Vidange Sodium

Lors d'une phase accidentelle, on peut observer une perte partielle ou totale du caloporteur sodium (bouchage d'un assemblage, ébullition due à un échauffement local des aiguilles combustibles, etc) qui va induire une variation de la réactivité.

Si on appelle la réactivité dans l'état de référence  $\rho_{ref}$  et la réactivité dans l'état accidentelle ou perturbé,  $\rho_{pert}$ , on peut alors définir l'effet en réactivité de vidange sodium (*Sodium Void Reactivity Effect* ou SVRE)  $\Delta\rho_{Na}$  suivant :

$$\Delta\rho_{Na} = \rho_{pert} - \rho_{ref} = \frac{1}{k_{\text{eff}}^{ref}} - \frac{1}{k_{\text{eff}}^{pert}} \quad (2.2)$$

Ce coefficient est positif ou négatif suivant les configurations du réacteur considéré et l'emplacement de la vidange. Pour des raisons de sûreté évidente, on cherche un effet de vidange négatif (ou le moins positif possible...) lors des études de conception.

Ce coefficient  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  peut se décomposer sous forme d'une composante dite centrale (toujours positive dans un combustible U-PuO<sub>2</sub>) et d'une composante dite de fuite (toujours négative) [18] :

- la perte du caloporteur va induire un durcissement du spectre neutronique (voir Figure 2.1) et ainsi créer plus de neutrons, par l'augmentation du nombre moyen de neutrons émis par fission  $\nu$  du <sup>239</sup>Pu et par l'apparition de la fission du <sup>238</sup>U (seuil à environ 1 MeV). Par ailleurs, la capture des neutrons par le sodium disparaît et l'auto-protection des actinides augmente ce qui diminue également leur capture radiative respective. La composante centrale est principalement formée par ces deux effets.
- les neutrons qui vont s'échapper du réacteur, puisque le caloporteur n'est plus là pour jouer son rôle diffuseur, vont de cette manière diminuer la réactivité car ils ne pourront plus jouer dans la production de neutron. Cette perte nette de réactivité est appelée composante de fuite.

Ces deux composantes sont très dépendantes de la localisation et de l'étendue de la vidange. Par exemple, la composante de fuite sera importante dans les cœurs de petite taille tandis qu'elle sera limitée sur des réacteurs industriels (de type SuperPhénix). La composante centrale sera d'autant plus grande que le combustible employé sera enrichi en matière fissile.

## 2.2 La Base de Données Expérimentales

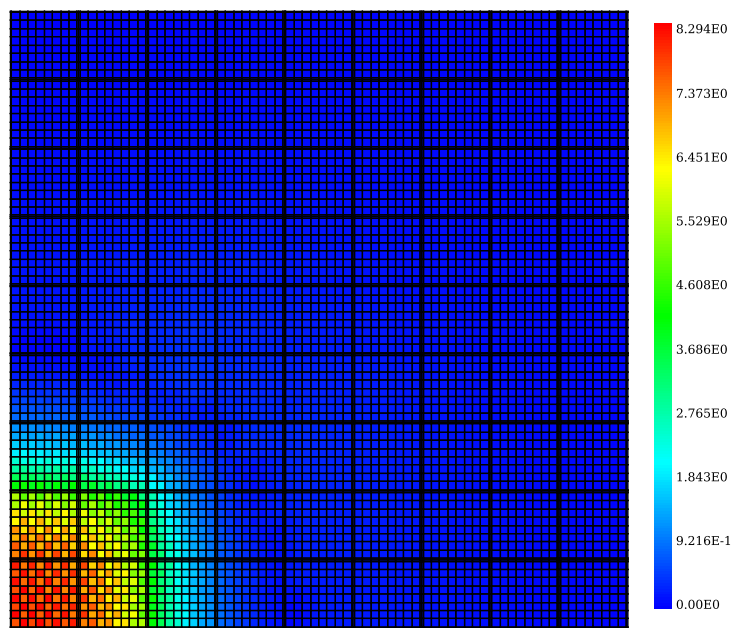
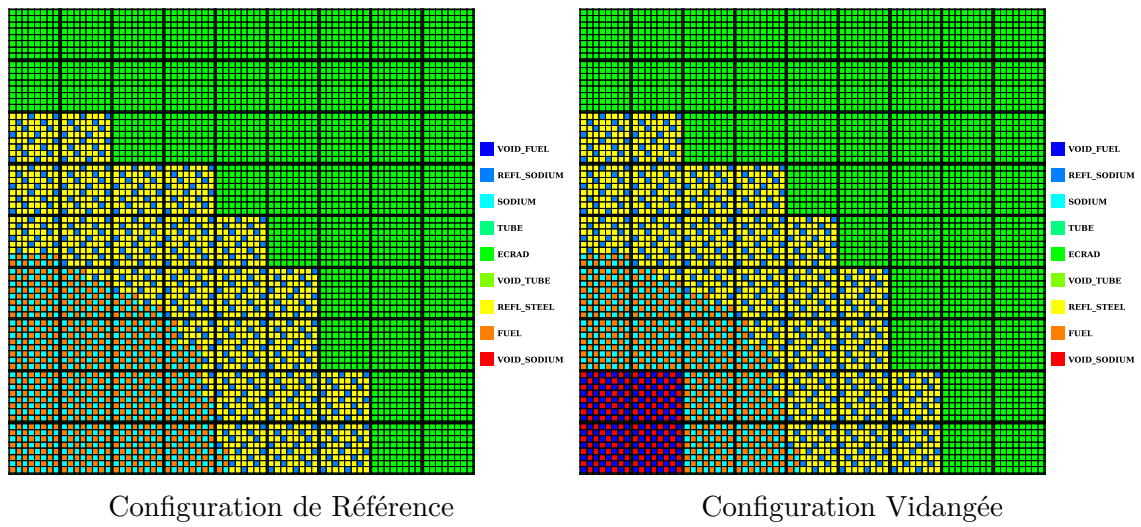
De par le monde, on trouve un certain nombre d'installations expérimentales qui ont pour objectif premier de simuler des concepts de réacteur avec une puissance quasi-nulle, plus communément appelées réacteurs maquette.

Dans le domaine de la physique des neutrons rapides, on peut citer MASURCA (Maquette SURgénératrice de CAdarache) situé au CEA Cadarache, SNEAK (*Schnelle Null-Energie-Anordnung Karlsruhe*) à Karlsruhe en Allemagne, ZEBRA (*Zero Energy Breeder Reactor Assembly*) à Winfrith en Angleterre et ZPPR (*Zero Power Plutonium Reactor* renommé dans les années 1980 en *Zero Power Physics Reactor*) à INL-Idaho aux USA. Des expériences de propagation neutronique dans des épaisseurs de sodium ont aussi été effectuées (on peut citer notamment l'expérience JANUS-8 [19] à Winfrith) mais les incertitudes expérimentales sont trop importantes pour pouvoir en tirer des informations très concluantes.

Nous n'avons malheureusement pas accès à un bilan matière très précis<sup>2</sup> pour les maquettes SNEAK et ZEBRA. Les expériences faites dans ces deux installations n'ont donc pas

---

2. Il nous manque des informations sur les concentrations et également sur les plans de chargement



Différence relative (en %) entre l'énergie moyenne des neutrons dans la configuration vidangée et dans la configuration de référence.

FIGURE 2.1. Exemple du durcissement du spectre lors de la vidange de 16 assemblages dans une configuration XY du cœur Cirano ZONA2B

été interprétées et seules les configurations issues de MASURCA et ZPPR seront utilisées dans le cadre de cette thèse.

### 2.2.1 Présentation des Maquettes

#### 2.2.1.1 MASURCA



FIGURE 2.2: *Vue extérieure de la maquette critique MASURCA au CEA Cadarache*

MASURCA est un réacteur maquette de 5 kW maximum (voir Figure 2.2), mis en service en 1966, pour répondre aux besoins des programmes RNR du CEA. Il est refroidi par air avec une température d'entrée comprise entre 20 et 35°C. Ce réacteur possède une grande flexibilité grâce à son volume, son inventaire en combustible ainsi que l'arrangement des cellules qui permet de former de nombreux motifs très variés.

Les assemblages sont composés d'un tube en acier carré de 10.6 cm de côté. A l'intérieur, on y glisse 8x8 réglettes carrées de hauteur variable (4" à 24") de 1.27 cm de côté pour former un motif donné. Les assemblages combustibles dans MASURCA possèdent des dénominations bien particulières qui sont détaillées dans l'Annexe A. Il faut également noter que des combustibles sous forme de plaquettes provenant des installations SNEAK et ZEBRA ont également été employés dans certains programmes de MASURCA (en particulier le programme RACINE).

Les différents type de combustible (Uranium ou Plutonium) avec des spectres plus ou moins modérés ont permis d'élaborer plusieurs campagnes de programme expérimental où certains concepts (hétérogène axial ou radial, homogène, etc) et/ou combustibles étaient testés. Comme mentionné plus tôt, nous nous intéressons ici à l'influence du sodium sur la

## 32 Chapitre 2. Qualification : Impact du Sodium sur les Grandeurs Intégrales

réactivité et les vidanges sodium. Ainsi, nous avons interprété uniquement les configurations (ou *benchmarks*) dans MASURCA où ces deux quantités d'intérêt sont mesurées (d'autres grandeurs sont aussi mesurées mais ne sont pas vraiment impactées par les données du sodium), qui sont recensées dans la Table 2.1. Chaque configuration est plus longuement détaillée en Annexe A et le lecteur est invité à s'y référer si des informations lui sont manquantes.

Nom du Programme	Type/Nbr expériences	Description succincte
RZ	- 6 $k_{\text{eff}}$	Premières expériences dans MASURCA avec des combustibles métalliques U et U/Pu-Fe
PRE-RACINE	- 3 $k_{\text{eff}}$ - 28 $\Delta\rho_{\text{Na}}$	Coeurs radialement hétérogènes avec des combustibles oxydes ZONA1 et R1
RACINE	- 3 $k_{\text{eff}}$ - 17 $\Delta\rho_{\text{Na}}$	Coeurs équivalent à PRE-RACINE avec vidanges dans suiveur et autour d'une barre en $\text{B}_4\text{C}$
CIRANO	- 2 $k_{\text{eff}}$ - 12 $\Delta\rho_{\text{Na}}$	Coeurs avec couvertures/réflécteur et combustible oxyde ZONA2

TABLE 2.1: Liste et description des benchmarks dans MASURCA

### 2.2.1.2 ZPPR

ZPPR est une installation similaire à MASURCA puisqu'elle a pour objectif l'étude des caractéristiques neutroniques de grands cœurs de type réacteur rapide surgénérateur (*Large Fast Reactor* ou FBR). L'installation (voir Figure 2.3) est constituée de 2 tables horizontales, l'une amovible et l'autre fixe, composées de tiroirs (*drawers*) qui représentent chacun une cellule du cœur. Chaque table mesure 4.3 m x 4.3 m de surface et 1.5 m de long. Pour atteindre la criticité, la table amovible est déplacée contre la table fixe laissant un jeu de moins d'un mm.

Les tiroirs, en acier inoxydable, sont des tubes carrés creux de 5.52 cm de côté et de 1.5 m de long. Ils sont disposés horizontalement dans chacune des tables pour former une matrice de 77 x 77 tubes. La partie creuse des tiroirs est remplie suivant une disposition précise de différentes plaques (combustibles, ferrite, sodium, etc. . .) pour ainsi créer des motifs très variés de cellule.

Les séries d'expériences appelées JUPITER font partie d'un programme commun de recherche entre l'US DOE et PNC (*Power reactor and nuclear fuel development corporation* qui se nomme aujourd'hui JAEA pour *Japan Atomic Energy Agency*) qui utilisèrent l'instal-

lation ZPPR à INL-Idaho de 1978 à 1988. Le programme JUPITER se subdivise en quatre séries d'expérience :

- JUPITER-I (ZPPR-9 à 10D/2) : cœurs homogènes conventionnels de 600-800 MWe avec 2 zones d'enrichissement.
- JUPITER-II (ZPPR-13A à 13C) : cœurs de 650 MWe hétérogènes radialement avec divers arrangements d'anneaux fertiles.
- 1<sup>re</sup> moitié de JUPITER-III (ZPPR-17A à 17C) : cœurs de 650 MWe hétérogènes axialement.
- 2<sup>e</sup> moitié de JUPITER-III + JUPITER-IV (ZPPR-18A à 19B) : cœurs de 1000 MWe homogènes avec une zone externe enrichie en uranium.



FIGURE 2.3: Vue des deux tables horizontales de l'installation ZPPR

On trouve certaines expériences de ce programme dans la base de données internationale de benchmarks IHRPhE-2009 [20] qui fournit de manière très détaillée les compositions, les géométries et les mesures réalisées. En particulier, l'expérience ZPPR-10A, où figurent des mesures de vidanges sodium, a été récemment ajoutée dans cette base.

L'expérience ZPPR-10A propose une mesure de  $k_{\text{eff}}$  et 12 mesures de vidange sodium. Le lecteur trouvera en Annexe A une description détaillée des cellules et du cœur.

## 2.3 Impact des Données Nucléaires du Sodium sur les Quantités d'Intérêt

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié les différences en termes de données nucléaires entre les évaluations  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ ,  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$ . Afin d'en mesurer le poids sur les expériences intégrales, nous allons utiliser la bibliothèque JEFF-3.1.1 où nous substituerons uniquement l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$ . Nous avons constaté dans le Chapitre 1 qu'une erreur s'était infiltrée dans l'évaluation de JEFF-3.1.1 sur la section totale entre 450 keV et 2 MeV. Nous avons créé une nouvelle évaluation, nommée  $^{23}\text{Na}_{\text{J3CORR}}$ , où cette maladresse dans les sections efficaces de JEFF-3.1.1 a été corrigée. Par ailleurs, pour mesurer l'impact des distributions angulaires, nous avons dupliqué  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  où les renvois angulaires élastiques (MF4 MT2) ont été remplacés par ceux de  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$ , qui sont dans cette évaluation très différents (*cf.* Chapitre 1). Ce nouveau fichier du sodium contenant des distributions modifiées sera nommé  $^{23}\text{Na}_{\theta\text{B7}}$  par la suite.

Pour simplifier la lecture, nous avons seulement indiqué dans les tables qui vont suivre, d'une part les résultats obtenus avec le sodium de JEFF-3.1.1 et d'autre part, les écarts en utilisant les autres évaluations du sodium. Par exemple,  $\Delta(\text{ENDFB}) = C(^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}) - C(^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}})$  signifie que l'on s'intéresse à l'écart de calcul entre l'utilisation de  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ .

### 2.3.1 Schéma de Calcul Déterministe

Les calculs déterministes pour les cœurs RNR se font avec des jeux de compositions et de sections efficaces homogénéisés par région, qui sont obtenus lors d'une étape préliminaire appelée calcul "cellule" (ou calcul "réseau" ou "assemblage"). Dans le système de codes ERANOS [21], cette étape est effectuée par le code ECCO [22]. ECCO traite l'autoprotection des noyaux par la méthode des sous-groupes et la détermination du flux et du courant par une méthode de probabilités de collision.

Dans notre cas, ECCO peut calculer des cellules homogènes, cylindriques 1D (en utilisant des probabilités de collision exactes), ou traiter la section droite d'un assemblage comportant un réseau carré d'aiguilles entouré d'un tube de structure en acier. ECCO calcule par défaut dans ce dernier cas des probabilités de collision approchées obtenues par une méthode de Roth avec distinction des faces et une méthode "double step" pour la prise en compte du tube de structure pour les assemblages de type MASURCA. Il est également possible dans cette géométrie particulière de calculer des probabilités de collision exactes (module PRONACE).

Les calculs des cellules combustibles sont effectués en quatre étapes dans notre schéma de référence :

1. étape d'initialisation, géométrie hétérogène en groupes larges (33 groupes d'énergie), avec recherche de laplacien critique ;
2. étape en groupes fins (1968 groupes d'énergie) et géométrie hétérogène, suivie d'une condensation en groupes larges (33 groupes d'énergie), avec prise en compte de tous les noyaux disponibles dans la bibliothèque en groupes fins ;
3. étape en géométrie hétérogène en groupes larges (33 groupes d'énergie), avec recherche de laplacien critique ;
4. étape d'homogénéisation, en groupes larges, produisant les sections efficaces homogénéisées et en groupes larges qui sont utilisées par la suite pour le calcul de cœur.

Les cellules fertiles sont traitées de manière similaire, où une source externe de neutrons provenant du calcul des cellules combustibles est employée. On prend la cellule combustible interne pour source des couvertures axiales et la cellule combustible externe pour source de la couverture radiale. Le laplacien semi-empirique préconisé pour les cellules fertiles est utilisé [22].

Le diffuseur, les réflecteurs et les écrans (axial et radial) sont représentés par des cellules homogènes car leur modélisation influe peu sur la réactivité du cœur (sauf dans quelques cas comme CIRANO ZONA2B). Elles sont ainsi modélisées ici en géométrie homogène, en groupes fins et avec un laplacien nul ; elles sont alimentées par une source externe en groupes larges issue des milieux voisins.

Les probabilités de collision utilisées sont approchées (méthode de Roth avec différenciation des quatre faces). Pour les cellules représentant des milieux qui seront vidangés, on utilise systématiquement la méthode exacte PRONACE de calcul des probabilités de collision (uniquement pour les cellules de type MASURCA). Cette méthode permet de prendre en compte plus précisément les couloirs radiaux et axiaux de fuites produits par le remplacement des réglattes de sodium par des réglattes vides dans les zones sur lesquelles on modélise la vidange du caloporteur. À noter que de ces couloirs de fuite, radiaux et axiaux, apparaissant lors de la vidange du sodium, n'ont pas vraiment lieu dans les RNR-Na industriels où les assemblages sont hexagonaux.

Les différents cœurs sont modélisés en géométrie cartésienne XYZ à 33 groupes d'énergie, à l'aide du solveur de transport Sn en éléments finis discontinus de la plateforme PARIS [23], nommé SNATCH [24]. On utilise les possibilités de raffinement de maillage en espace et en ordre d'élément fini comme cela est montré dans la Référence [25]. Pour la variable angulaire, on a utilisé un maillage  $S_4$ . Les critères de convergence relative sont  $10^{-6}$  sur le facteur de multiplication et  $10^{-5}$  pour les flux multigroupes locaux. La plateforme PARIS possède des



outils de perturbation et de sensibilité qui fournissent des sensibilités aux données nucléaires sur les grandeurs d'intérêt étudiées ici.

Ce schéma de calcul (cellules+cœur) est appelé schéma de référence. En Annexe B, on développe de manière détaillée les effets dus aux différents schémas de calcul utilisables en déterministe.

### 2.3.2 Schéma de Calcul Stochastique

On utilise le code Monte Carlo TRIPOLI-4.7 [26] dans le but de cibler les biais de méthodes dans ERANOS - PARIS (découpage multigroupe, méthode des PIJ approchées, cellules homogène au niveau du cœur, etc..) et de voir si les effets dus à l'anisotropie (passage de  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  à  $^{23}\text{Na}_{\theta\text{B7}}$ ) sont correctement représentés en déterministe.

Les cœurs sont modélisés en géométrie cartésienne XYZ réglette par réglette (*cf.* Annexe A pour les descriptions des configurations) pour les configurations MASURCA et plaque par plaque pour les configurations ZPPR. Suivant les cœurs et la complexité de leur jeu de données, on simule au moins  $4.10^7$  histoires de neutron pour obtenir une convergence statistique inférieure à 5 pcm sur les facteurs de multiplication effectifs.

Les résultats des calculs réalisés par Monte-Carlo sont surtout donnés à titre indicatif, surtout pour les effets en réactivité de vidange du sodium. En effet, suivant les estimateurs du  $k_{\text{eff}}$  utilisés, nous avons obtenu des valeurs parfois très différentes (ces différences n'étaient pas toujours couvertes par les incertitudes statistiques de calcul). Dans un souci de cohérence, nous avons conservé le même estimateur pour tous les résultats qui sont proposés dans la suite de ce Chapitre.

### 2.3.3 Impact sur les Réactivités

#### 2.3.3.1 MASURCA RZ

Les plans de chargement n'ont pas été retrouvés. Ainsi, seuls les calculs avec ERANOS ont été effectués puisque nous n'avons pas de description XYZ pour ces cœurs. On peut voir dans la Table 2.2 les résultats obtenus. On en conclut que l'effet des évaluations du sodium fait varier la réactivité de ces cœurs de 250 à 330 pcm. L'effet de l'anisotropie induit une perte de réactivité d'une centaine de pcm en général sur chaque cœur. La correction des sections efficaces de JEFF-3.1.1 ( $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$ ) conduit à une baisse de 20 à 50 pcm.

$\rho$ (pcm)	ERANOS BISTRO RZ				
	JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$
MAS. 2A 24''	<b>+264</b>	-55	-139	-239	-149
MAS. 2B 24''	<b>+202</b>	-52	-147	-296	-72
MAS. 2B 36''	<b>-271</b>	-54	-151	-294	-67
MAS. 3B 36''	<b>+291</b>	-40	-129	-298	-91
MAS. 4A 36''	<b>+129</b>	-20	-68	-261	-133
MAS. 4B 36''	<b>+47</b>	-24	-92	-251	-94

TABLE 2.2: Résultats pour la réactivité dans les expériences MASURCA RZ

### 2.3.3.2 MASURCA PRE-RACINE

Dans ce programme, on a des résultats obtenus sur 3 cœurs (PRE-RACINE I, PRE-RACINE IIA et PRE-RACINE IIB) dont les plans de chargement XYZ ont été retrouvés. Pour les calculs ERANOS, le calcul de cellules pour les sections (ECCO) est fait en hétérogène. Ces 3 cœurs sont modélisés en XYZ dans TRIPOLI réglette par réglette. La Table 2.3 donne les calculs des réactivités en pcm. Les perturbations dues à l'anisotropie sont bien calculées avec ERANOS (en comparaison avec TRIPOLI). Les sections corrigées ( $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$ ) induisent une baisse d'environ 40 pcm sur ces cœurs. En moyenne, on obtient une variation de 350 pcm en utilisant les différentes évaluations du sodium.

$\rho$ (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ	
	JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	JEFF	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$
PR I	<b>+443</b>	-36	-118	-339	-176	<b>+456 ± 6</b>	-114 ± 8
PR IIA	<b>+334</b>	-46	-137	-375	-193	<b>+433 ± 6</b>	-113 ± 8
PR IIB	<b>+38</b>	-44	-130	-368	-199	<b>+417 ± 6</b>	-115 ± 8

 TABLE 2.3. Résultats pour la réactivité sur les cœurs PRE-RACINE avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

### 2.3.3.3 ZPPR-10A

Le calcul dans ERANOS-PARIS (XYZ) et TRIPOLI (XYZ) pour ce cœur est réalisé en hétérogène. La Table 2.4 résume les valeurs obtenues pour la réactivité  $\rho$ . On obtient un écart maximal d'environ 330 pcm sur le coefficient de multiplication avec les différentes évaluations du sodium. L'écart dû aux distributions angulaires est correctement pris en compte ici par

ERANOS et il semble que cet effet lié à l'anisotropie diminue quand la taille du réacteur augmente. Les corrections avec  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  sont très faibles dans ce cas.

$\rho$ (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ	
	JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	JEFF	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$
ZPPR-10A	<b>+333</b>	-8	-20	-329	-282	<b>+320 ± 5</b>	-23 ± 8

TABLE 2.4. Résultats pour la réactivité sur le cœur ZPPR-10A avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

### 2.3.3.4 MASURCA RACINE

Dans ce programme, 3 cœurs avec un plan de chargement en XYZ ont été étudiés ce qui nous a permis d'obtenir une modélisation XYZ avec ERANOS-PARIS et avec TRIPOLI. À noter que des combustibles de type "plaquette" (Z1K et R1K) ont été utilisés dans ces configurations (combustible en périphérie radiale) et que seules les compositions homogènes en ont été retrouvées. Il faut donc garder à l'esprit que cela doit impacter la réactivité calculée (quand cette dernière est comparée à la réactivité mesurée). Dans la Table 2.5, on constate un écart important de plus de 370 pcm calculé en moyenne avec les différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$ . L'effet d'anisotropie est légèrement surestimé avec ERANOS par rapport au calcul étalon TRIPOLI entre 25 et 45 pcm pour les deux premières configurations. Les écarts liés aux corrections avec  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  sont inférieurs à 25 pcm.

$\rho$ (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ	
	JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	JEFF	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$
R1A	<b>+160</b>	-22	-89	-378	-280	<b>+42 ± 6</b>	-64 ± 8
R1D Na Fol.	<b>+719</b>	-22	-93	-381	-283	<b>+544 ± 5</b>	-47 ± 8
R1D B <sub>4</sub> C Rod	<b>+497</b>	-24	-95	-364	-254	<b>+593 ± 5</b>	-88 ± 8

TABLE 2.5. Résultats pour la réactivité sur les cœurs RACINE avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

### 2.3.3.5 MASURCA CIRANO

Deux configurations sont retenues dans ce programme : un cœur (ZONA2A) avec couvertures fertiles et un cœur (ZONA2B) avec réflecteur. Les plans de chargement sont en XYZ ce qui signifie que l'on a un modèle XYZ pour ERANOS-PARIS et pour TRIPOLI. Actuellement,

le modèle pour une prise en compte correcte d'un réflecteur au niveau du calcul cellule dans ERANOS n'est pas totalement satisfaisant ce qui explique les résultats "moins bons" dans ZONA2B que pour d'autres configurations. Que ce soit pour ZONA2A ou ZONA2B, on remarque tout d'abord un écart très important d'environ 750 pcm entre le calcul stochastique et l'expérience (cf. Table 2.6). Par ailleurs, la modélisation du réflecteur dans ZONA2B avec ERANOS nous donne des résultats sous-estimés de plus de 1 800 pcm par rapport à TRIPOLI. Il semble que le mauvais traitement dans ERANOS des cellules de type réflecteur ainsi que les processus de condensation en énergie et d'homogénéisation spatiale en soient les causes principales (ces effets ont été étudiés G. Aliberti [27] et également par P. Jacquet dans sa thèse [28]).

Pour le coeur ZONA2A, on obtient un écart maximal en terme de réactivité de 530 pcm par l'utilisation des différentes évaluation du  $^{23}\text{Na}$ . Pour ZONA2B, on a une différence de 430 pcm. Ces deux configurations sont de loin les plus sensibles aux différences sur les données nucléaires du sodium. Cela peut s'expliquer par la taille des configurations (très petites donc fuites et impact de l'anisotropie important) et la dureté du spectre (zone énergétique où les différences sur les sections du sodium s'intensifient). Concernant l'anisotropie, l'effet est très important (près de 250 pcm avec ZONA2A et 190 pcm avec ZONA2B) et celui-ci est correctement calculé avec ERANOS (quoique légèrement surestimé par rapport aux résultats TRIPOLI). Les sections efficaces corrigées dans  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  ont plus d'importance ici (entre 70 et 100 pcm) puisque le spectre est plus dur dans ces configurations et on est par conséquent plus sensible à ces corrections.

$\rho$ (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ	
	JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	JEFF	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$
ZONA2A	<b>+260</b>	-95	-249	-533	-285	<b>+827 ± 6</b>	-215 ± 8
ZONA2B	<b>-1071</b>	-73	-189	-426	-232	<b>+816 ± 6</b>	-159 ± 8

TABLE 2.6. Résultats pour la réactivité sur les coeurs CIRANO avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1 \sigma$ )

**2.3.3.6 Conclusions en Termes de Réactivité**

La Figure 2.4 rassemble les résultats obtenus avec ERANOS en ce qui concerne la réactivité. On observe une variation moyenne d'environ 300 pcm avec l'utilisation des différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$ . Les données du sodium de JEFF-3.1.1 sont toujours celles qui fournissent les réactivités les plus élevées. Les distributions angulaires élastiques (avec  $^{23}\text{Na}_{\theta_{\text{B7}}}$ ) font systématiquement diminuer la réactivité. L'écart observé varie suivant les configurations,

mais se situe généralement autour de 100 pcm. Les sections corrigées de  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  réduisent la réactivité, suivant les cœurs, d'une dizaine de pcm à près de 100 pcm.

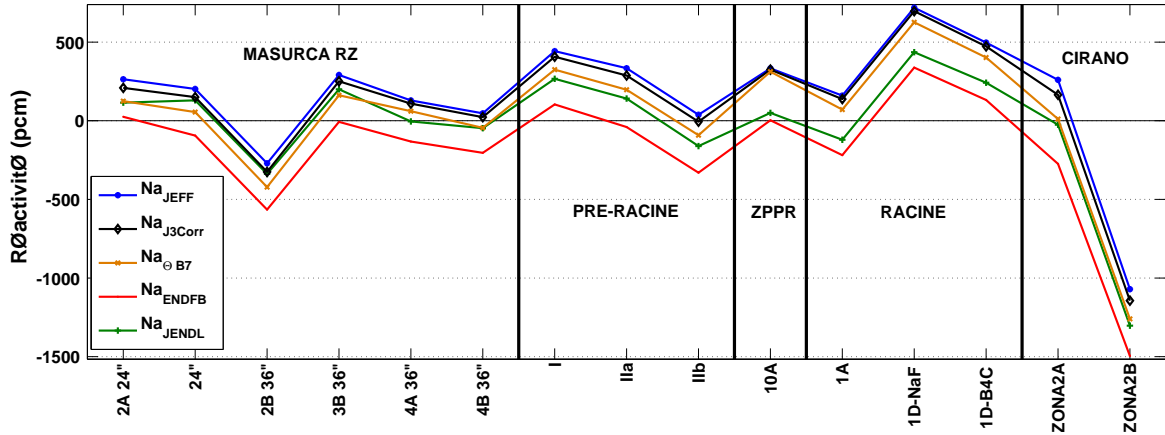


FIGURE 2.4. Réactivités  $\rho$  obtenues avec ERANOS-PARIS en utilisant les différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$

### 2.3.4 Impact sur les Effets en Réactivité de Vidange Sodium (SVRE)

On distingue les SVRE par les extensions radiales et axiales des zones vidangées. La description de chaque configuration de vidange est fournie en Annexe A. Dans les différentes tables qui vont suivre, les résultats de SVRE qui ont lieu uniquement dans les assemblages combustibles seront surlignés en bleu et ceux qui impliquent des assemblages non-combustibles (fertile, structure) seront surlignés de couleur orange. Pour des raisons de confidentialité, seule l'incertitude expérimentale de chaque vidange est donnée pour permettre de mesurer si l'écart  $C - E$  est plus ou moins important. Pour les calculs avec TRIPOLI, on s'est concentré uniquement sur les calculs de SVRE avec JEFF-3.1.1 pour pouvoir comparer correctement les calculs fait avec ERANOS. L'incertitude statistique donnée pour TRIPOLI dans les tables combine quadratiquement l'incertitude du  $k_{\text{eff}}$  de la configuration de référence et l'incertitude du  $k_{\text{eff}}$  de la configuration vidangée, ainsi il est nécessaire (et difficile) d'obtenir des incertitudes assez faibles pour pouvoir trancher sur les valeurs de SVRE calculées avec TRIPOLI et de les mettre en lumière avec celles produites avec ERANOS.

#### 2.3.4.1 MASURCA PRE-RACINE

Dans la Table 2.7, on trouve les résultats, pour le cœur PRE-RACINE I, de vidanges sodium qui ont été réalisées dans les couvertures fertiles internes. L'effet dû à un changement

d'évaluation est assez faible, en particulier avec  $^{23}\text{Na}_{\theta_{B7}}$ , qui augmente systématiquement les effets de vide. Les incertitudes sur les calculs TRIPOLI nous empêchent ici de dire si les vidanges dans des éléments fertiles sont bien calculées à l'aide d'ERANOS au niveau cellule. On remarque que le calcul ERANOS avec JEFF-3.1.1 fournit de bons accords  $C - E$  qui demeurent généralement dans les incertitudes expérimentales. Les corrections apportées par  $^{23}\text{Na}_{J3\text{Corr}}$  sont faibles pour la majorité des SVRE (moins d'un pcm). Les calculs avec les autres évaluations sont toujours supérieurs à JEFF-3.1.1 et dégradent les  $C - E$ .

$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C - E) JEFF	$\Delta(J3\text{Corr})$	$\Delta(\theta_{B7})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C - E) JEFF
SVRE 1	$\pm 5$	<b>-2.6</b>	-0.2	0.0	1.2	1.7	<b>-5.1 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 2	$\pm 7$	<b>-2.9</b>	-0.6	0.0	3.8	4.9	<b>-5.7 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 3	$\pm 7$	<b>1.0</b>	-0.7	0.2	6.4	7.8	<b>-23.5 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 4	$\pm 7$	<b>9.8</b>	-0.2	2.2	11.7	11.6	<b>-10.6 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 5	$\pm 7$	<b>12.8</b>	0.4	3.9	14.3	12.8	<b>1.1 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 6	$\pm 6$	<b>5.6</b>	0.5	1.3	2.1	1.1	<b>-2.8 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 7	$\pm 5$	<b>-9.3</b>	0.3	1.1	2.2	1.4	<b>-13.9 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 8	$\pm 5$	<b>-4.9</b>	0.9	2.6	4.6	2.6	<b>-8.5 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 9	$\pm 4$	<b>5.0</b>	-0.1	0.3	1.7	2.2	<b>-5.5 <math>\pm</math> 8.2</b>

TABLE 2.7. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur PRE-RACINE I avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

Dans le cœur PRE-RACINE IIA, les  $C - E$  obtenus avec JEFF-3.1.1 dans ERANOS sont en général très bons (cf. Table 2.8), à part pour les trois derniers<sup>3</sup>. Cependant, les  $C - E$  calculés avec TRIPOLI diffèrent parfois grandement de ceux obtenus avec ERANOS ce qui tend à suggérer que des problèmes de modélisation des cellules vidangées existent au niveau d'ECCO. Concernant l'anisotropie, on observe une perte globale de réactivité assez faible par rapport à JEFF-3.1.1 dans les vidanges dans des combustibles. Par contre, cette anisotropie a tendance à augmenter le  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans les vidanges dans les fertiles comme dans le cœur PRE-RACINE I. L'utilisation de  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  augmente systématiquement les  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  calculés et l'écart engendré dépasse largement l'incertitude expérimentale, notamment pour les dernières configurations de vidange (SVRE 10 à 15). Les sections efficaces corrigées de  $^{23}\text{Na}_{J3\text{Corr}}$  ont plus d'impact que dans PRE-RACINE I et dégradent les  $C - E$  pour les dernières vidanges.

3. Les trois dernières configurations de vidange dans PRE-RACINE IIA ont été mesurées/interprétées par différentes personnes qui proposent des valeurs expérimentales nettement discordantes.

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C – E) JEFF	$\Delta(J3Corr)$	$\Delta(\theta_{B7})$	$\Delta(ENDFB)$	$\Delta(JENDL)$	(C – E) JEFF
SVRE 01	$\pm 4$	<b>-0.3</b>	-0.8	-1.3	1.3	2.0	<b>16.7 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 02	$\pm 3$	<b>-0.2</b>	-2.1	-3.7	3.9	6.0	<b>14.9 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 03	$\pm 3$	<b>1.6</b>	-2.9	-5.0	7.1	9.4	<b>11.0 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 04	$\pm 3$	<b>3.9</b>	-2.9	-4.6	11.1	12.3	<b>18.9 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 05	$\pm 3$	<b>2.0</b>	-1.7	-2.1	16.3	14.6	<b>14.1 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 06	$\pm 4$	<b>-0.3</b>	-0.6	0.9	20.5	16.1	<b>13.5 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 07	$\pm 4$	<b>0.5</b>	0.9	2.3	3.4	1.3	<b>4.6 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 08	$\pm 4$	<b>0.6</b>	1.0	2.4	8.6	5.0	<b>23.6 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 09	$\pm 5$	<b>-2.1</b>	2.1	5.3	12.7	6.4	<b>19.3 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 10	$\pm 10$	<b>-0.9</b>	-2.7	-2.9	28.6	25.2	<b>6.5 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 11	$\pm 10$	<b>-0.6</b>	-3.7	-3.3	44.8	38.5	<b>14.7 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 12	$\pm 7$	<b>-36.4</b>	-4.3	0.8	96.9	77.4	<b>-13.0 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 13	$\pm 12$	<b>-20.4</b>	-1.9	2.4	65.9	50.3	<b>-12.1 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 14	$\pm 12$	<b>-22.7</b>	-0.9	2.4	45.2	33.6	<b>5.1 <math>\pm</math> 8.3</b>

TABLE 2.8. Résultats  $\Delta\rho_{Na}$  dans le cœur PRE-RACINE-IIa avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C – E) JEFF	$\Delta(J3Corr)$	$\Delta(\theta_{B7})$	$\Delta(ENDFB)$	$\Delta(JENDL)$	(C – E) JEFF
SVRE 1	$\pm 3$	<b>-0.7</b>	-0.8	-1.5	1.1	2.2	<b>2.8 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 2	$\pm 3$	<b>1.0</b>	-3.3	-5.9	6.2	10.0	<b>12.1 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 3	$\pm 3$	<b>4.1</b>	-2.2	-3.3	15.0	15.4	<b>5.7 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 4	$\pm 8$	<b>-11.4</b>	-4.9	-6.5	41.4	40.7	<b>47.6 <math>\pm</math> 8.3</b>
SVRE 5	$\pm 8$	<b>-33.4</b>	-6.6	-5.2	90.6	81.4	<b>11.4 <math>\pm</math> 8.4</b>

TABLE 2.9. Résultats  $\Delta\rho_{Na}$  dans le cœur PRE-RACINE-IIb avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

Dans la Table 2.9, comme pour le cœur PRE-RACINE IIA, on observe encore une fois un accord  $C - E$  avec JEFF-3.1.1 plutôt bon dans l'ensemble, à part pour les deux dernières vidanges qui sont plus importantes (plus grand volume de réglettes vidangées). Ces deux derniers résultats sont davantage dégradés par l'utilisation de  $^{23}Na_{J3Corr}$ . On retrouve également la baisse systématique des  $\Delta\rho_{Na}$  en utilisant des distributions angulaires différentes. Une nouvelle fois, les  $C - E$  avec TRIPOLI sont parfois contradictoires avec ceux obtenus avec

ERANOS ce qui semble confirmer les problèmes de méthodes en cas de cellule vidangée. Enfin, les résultats obtenus avec  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  sont le plus souvent en net désaccord avec les valeurs expérimentales.

### 2.3.4.2 ZPPR-10A

Les résultats de SVRE sur le cœur ZPPR-10A sont résumés dans la Table 2.10. Avant de se focaliser sur les valeurs, il faut signaler que le  $\beta_{\text{eff}}$  calculé avec ERANOS-PARIS est 5% supérieur à celui calculé/mesuré à l'époque de l'expérience<sup>4</sup>. Les valeurs expérimentales données dans le rapport [20] sont en cents et non en pcm. Ainsi, cet écart sur la valeur du  $\beta_{\text{eff}}$  calculé modifie directement les  $C - E$  fournis dans la Table.

Cela peut donc expliquer en partie les mauvais accord  $C - E < 0$  obtenus avec JEFF-3.1.1. Le problème lié à la vidange dans les couvertures fertiles se confirme ici (rupture de pente entre la SVRE 09 et 10). Les calculs TRIPOLI sont en bon accord avec ceux obtenus par l'intermédiaire d'ERANOS. Les biais de méthode sont moins importants ici puisque les cellules calculées dans ZPPR-10A le sont en 1D (il semble que ce type de modélisation soit suffisant par rapport à du 2D) et les probabilités de collision sont exactes dans cette configuration au niveau d'ECCO.

La tendance négative due, à l'emploi d'une anisotropie différente et aux corrections sur les sections de  $^{23}\text{Na}_{\text{J3CORR}}$ , se retrouve également. On observe une notable augmentation des  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  avec  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  qui dégrade les  $C - E$  dans l'autre sens ( $C - E > 0$ ).

---

4. On trouve plus de détails sur le calcul du  $\beta_{\text{eff}}$  dans ZPPR-10A en Annexe A.



$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C – E) JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C – E) JEFF
SVRE 01	$\pm 0.5$	<b>0.6</b>	-0.4	-0.8	1.9	2.2	<b><math>8.7 \pm 7.5</math></b>
SVRE 02	$\pm 0.9$	<b>-1.9</b>	-1.3	-2.8	6.1	7.7	<b><math>6.0 \pm 7.5</math></b>
SVRE 03	$\pm 1.7$	<b>-5.1</b>	-2.4	-5.3	11.7	14.8	<b><math>0.6 \pm 7.5</math></b>
SVRE 04	$\pm 1.7$	<b>-4.0</b>	-2.5	-5.5	13.5	16.4	<b><math>4.9 \pm 7.5</math></b>
SVRE 05	$\pm 1.9$	<b>-7.0</b>	-2.7	-6.1	17.3	20.3	<b><math>6.5 \pm 7.5</math></b>
SVRE 06	$\pm 2.2$	<b>-13.2</b>	-3.0	-6.8	22.2	25.2	<b><math>5.1 \pm 7.5</math></b>
SVRE 07	$\pm 2.1$	<b>-15.5</b>	-2.9	-6.5	23.1	25.6	<b><math>-6.3 \pm 7.5</math></b>
SVRE 08	$\pm 2.0$	<b>-16.4</b>	-2.5	-5.9	24.9	26.7	<b><math>-2.3 \pm 7.5</math></b>
SVRE 09	$\pm 1.9$	<b>-19.8</b>	-2.1	-5.1	27.2	28.0	<b><math>-5.0 \pm 7.5</math></b>
SVRE 10	$\pm 1.8$	<b>-18.1</b>	-2.0	-4.8	27.7	28.1	<b><math>-3.6 \pm 7.5</math></b>
SVRE 11	$\pm 1.6$	<b>-13.9</b>	-1.7	-4.1	28.9	28.6	<b><math>-12.4 \pm 7.5</math></b>
SVRE 12	$\pm 1.4$	<b>-9.1</b>	-1.3	-3.2	30.2	29.2	<b><math>-11.6 \pm 7.5</math></b>

TABLE 2.10. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur ZPPR-10A avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

### 2.3.4.3 MASURCA RACINE

La Table 2.11 nous montre les résultats obtenus sur les  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur RACINE-IA. Les  $C - E$  fournis avec JEFF-3.1.1 sont généralement très bons et cela avec les calculs déterministes ou stochastiques<sup>5</sup>. Par contre, on remarque une nouvelle fois la faiblesse du schéma de calcul dans ECCO dans le cas de vidange dans les éléments fertiles (SVRE 09 et 12 en particulier), qui n'est pas visible avec TRIPOLI. On confirme également la tendance sur les  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  avec  $^{23}\text{Na}_{\theta_{\text{B7}}}$ , qui est négative dans les vidanges dans le combustible et positive quand cela a lieu dans les couvertures. Par ailleurs, les valeurs calculées avec  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  sont systématiquement plus grandes que celles de obtenues avec  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$  tandis que celles avec  $^{23}\text{Na}_{\text{J3CORR}}$  sont quasiment toutes plus faibles.

Pour les cœurs RACINE-ID (Na Follower et B<sub>4</sub>C Rod), les Tables 2.12 et 2.13 regroupent les valeurs de  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  calculées avec les différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$ . Les  $C - E$  obtenus avec JEFF-3.1.1 dans le cas déterministe sont légèrement moins bons que les autres cœurs MASURCA. Cela peut être dû à des difficultés de modélisation des éléments centraux (sui-veur de sodium ou barre absorbante de contrôle), qui sont à proximité des zones vidangées. L'utilisation de  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  ou  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  dégrade assez fortement les résultats calculés avec

5. Certaines configurations de vidange ne sont pas cylindrisables, le problème a été résolu grâce aux solveurs 3D présents dans la plateforme PARIS

$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C - E) JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C - E) JEFF
SVRE 01	$\pm 3$	<b>1.0</b>	-0.4	-0.5	5.6	5.5	—
SVRE 02	$\pm 6$	<b>-3.3</b>	-2.7	-4.0	22.0	23.1	—
SVRE 03	$\pm 12$	<b>-5.9</b>	-4.8	-8.6	18.4	24.5	—
SVRE 04	$\pm 9$	<b>7.3</b>	-3.8	-5.9	34.4	36.7	<b>10.9 <math>\pm</math> 7.9</b>
SVRE 05	$\pm 4$	<b>-3.6</b>	0.6	1.9	14.8	11.4	—
SVRE 06	$\pm 5$	<b>0.1</b>	-2.3	-3.6	16.1	17.2	—
SVRE 07	$\pm 7$	<b>4.2</b>	-3.4	-5.5	28.2	30.2	—
SVRE 08	$\pm 6$	<b>9.1</b>	-1.2	-2.0	11.2	12.0	—
SVRE 09	$\pm 9$	<b>31.4</b>	-1.9	1.8	22.7	23.9	<b>13.7 <math>\pm</math> 7.9</b>
SVRE 10	$\pm 8$	<b>-5.6</b>	-4.3	-6.1	34.1	35.5	<b>0.7 <math>\pm</math> 7.9</b>
SVRE 11	$\pm 7$	<b>-0.3</b>	-1.4	-2.2	9.7	10.3	<b>-3.7 <math>\pm</math> 7.9</b>
SVRE 12	$\pm 6$	<b>-14.9</b>	0.6	1.6	6.1	4.2	<b>8.1 <math>\pm</math> 7.9</b>
SVRE 13	$\pm 4$	<b>6.5</b>	-0.6	0.4	5.4	6.0	<b>11.3 <math>\pm</math> 7.9</b>
SVRE 14	$\pm 4$	<b>-2.3</b>	-1.9	-2.6	16.1	16.4	<b>0.9 <math>\pm</math> 7.9</b>

 TABLE 2.11. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur RACINE-IA avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

ERANOS. À l'inverse,  $^{23}\text{Na}_{\theta_{\text{B7}}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  ont plutôt tendance à améliorer les C - E.

$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C - E) JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C - E) JEFF
SVRE 1	$\pm 5$	<b>-4.8</b>	0.7	2.8	9.1	6.2	<b>8.4 <math>\pm</math> 7.7</b>
SVRE 2	$\pm 5$	<b>14.8</b>	-3.5	-5.9	35.5	37.5	<b>28.5 <math>\pm</math> 7.7</b>

 TABLE 2.12. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur RACINE-ID Na Follower avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C - E) JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C - E) JEFF
SVRE 1	$\pm 5$	<b>-17.4</b>	-2.3	-3.2	20.6	22.6	<b>-1.4 <math>\pm</math> 7.7</b>

 TABLE 2.13. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur XYZ RACINE-ID  $B_4C$  Rod avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ ) en géométrie hétérogène

## 2.3.4.4 MASURCA CIRANO

Dans la Table 2.14, on trouve les valeurs de SVRE pour le cœur Cirano ZONA2A. Tout d'abord, l'accord  $C - E$  dans ERANOS avec JEFF-3.1.1 est excellent et les calculs TRIPOLI semble confirmer ces résultats même si les incertitudes statistiques ne nous permettent pas de trancher. L'évaluation  $^{23}\text{Na}_{\theta_{B7}}$  diminue fortement les  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  tandis que  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  les dégradent dans l'autre sens. On note enfin une dégradation sensible (baisse pour les trois premières vidanges) des  $C - E$  avec les sections corrigées de  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$ .

$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C - E) JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{B7})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C - E) JEFF
SVRE 1	$\pm 2.7$	<b>-2.5</b>	-2.7	-5.2	1.8	6.3	<b>0.9 <math>\pm</math> 7.7</b>
SVRE 2	$\pm 2.7$	<b>-1.1</b>	-3.9	-7.1	6.2	12.1	<b>9.9 <math>\pm</math> 7.8</b>
SVRE 3	$\pm 3.5$	<b>-3.7</b>	-1.9	-2.9	15.5	16.9	<b>19.6 <math>\pm</math> 7.8</b>
SVRE 4	$\pm 3.0$	<b>2.2</b>	1.6	3.4	8.3	4.5	<b>5.0 <math>\pm</math> 7.7</b>

TABLE 2.14. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur Cirano ZONA2A avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

Pour le cœur Cirano ZONA2B, les résultats obtenus avec ERANOS (*cf.* Table 2.15) sont nettement dégradés à cause du schéma de calcul peu adapté pour ce cœur dépourvu de couvertures fertiles. Ainsi, les valeurs  $C - E$  données avec JEFF-3.1.1 dans le cas déterministe sont très mauvaises alors que celles apportées par TRIPOLI semblent fournir des résultats plutôt satisfaisants. Globalement, l'anisotropie de  $^{23}\text{Na}_{\theta_{B7}}$  diminue assez fortement les  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  (sauf pour SVRE 4 et 8 où les vidanges s'effectuent à l'interface combustible-réacteur axiale et favorisent les fuites). Les corrections de  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  ont un effet très similaire à  $^{23}\text{Na}_{\theta_{B7}}$  mais amoindri quantitativement. Comme pour les autres cœurs, les évaluations du sodium dans ENDFB/VII.0 et JENDL-4.0 donnent toujours des valeurs calculées bien supérieures à celles de JEFF-3.1.1.

$\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	ERANOS-PARIS XYZ					TRIPOLI XYZ
		(C - E) JEFF	$\Delta(\text{J3Corr})$	$\Delta(\theta_{\text{B7}})$	$\Delta(\text{ENDFB})$	$\Delta(\text{JENDL})$	(C - E) JEFF
SVRE 1	$\pm 3.7$	<b>-6.1</b>	-3.1	-5.8	2.1	6.8	<b>-7.0 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 2	$\pm 2.9$	<b>-2.1</b>	-4.5	-8.0	7.0	13.1	<b>10.8 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 3	$\pm 2.0$	<b>-13.3</b>	-2.6	-3.2	17.3	18.5	<b>1.6 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 4	$\pm 5.0$	<b>-6.7</b>	1.6	4.0	9.3	5.0	<b>4.8 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 5	$\pm 1.5$	<b>-22.8</b>	-7.5	-13.5	8.5	19.5	<b>-4.5 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 6	$\pm 1.4$	<b>-52.1</b>	-10.7	-18.2	23.5	37.2	<b>-0.1 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 7	$\pm 5.0$	<b>-71.6</b>	-5.4	-4.9	52.2	52.2	<b>15.1 <math>\pm</math> 8.2</b>
SVRE 8	$\pm 4.3$	<b>-29.6</b>	4.7	11.4	26.1	14.0	<b>-6.7 <math>\pm</math> 8.2</b>

TABLE 2.15. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  dans le cœur Cirano ZONA2B avec ERANOS et TRIPOLI (incertitudes statistiques à  $1\sigma$ )

### 2.3.4.5 Conclusions en Termes de SVRE

La Figure 2.5 montre les valeurs  $\frac{C-E}{\sigma_{\text{exp}}}$  obtenues avec ERANOS-PARIS pour les réactivités de vidange sodium en utilisant les évaluations du  $^{23}\text{Na}$  discutées dans le chapitre précédent. Comme nous l'avons vu précédemment, il est nécessaire de mettre de côté les valeurs obtenues sur Cirano ZONA2B car le schéma de calcul pour les cellules dans cette configuration n'est pas au point. Les graphiques montrent en général un accord relativement bon quand on utilise le sodium de la bibliothèque JEFF-3.1.1, sauf pour le cœur ZPPR-10A, bien que l'écart important sur la valeur calculée du  $\beta_{\text{eff}}$  ne joue pas en sa faveur.

Les corrections apportées sur les sections efficaces dans  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$  ont plutôt tendance à dégrader les accords obtenus avec JEFF-3.1.1 mais si cela reste assez faible, sauf dans certains cas où l'on peut atteindre un écart d'environ un  $\sigma$  expérimental.

L'utilisation de  $^{23}\text{Na}_{\theta_{\text{B7}}}$  conduit à une diminution presque généralisée du calcul de la réactivité de vidange, sauf si ces dernières s'opèrent dans des éléments fertiles. Les distributions angulaires jouent donc un rôle dans les SVRE (parfois plusieurs  $\sigma$  expérimentaux...), néanmoins elles semblent contribuer moins que pour la réactivité (cf. Figure 2.4).

Les évaluations  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  dégradent significativement les calculs de vidanges dans la grande majorité des cas étudiés. En conclusion, on retiendra que les différences observées sur les données nucléaires du sodium au Chapitre 1 conduisent à des écarts de plusieurs  $\sigma$  expérimentaux (de 2-3  $\sigma$  à plus de 10  $\sigma$  pour certaines configurations...) pour le calcul de SVRE.

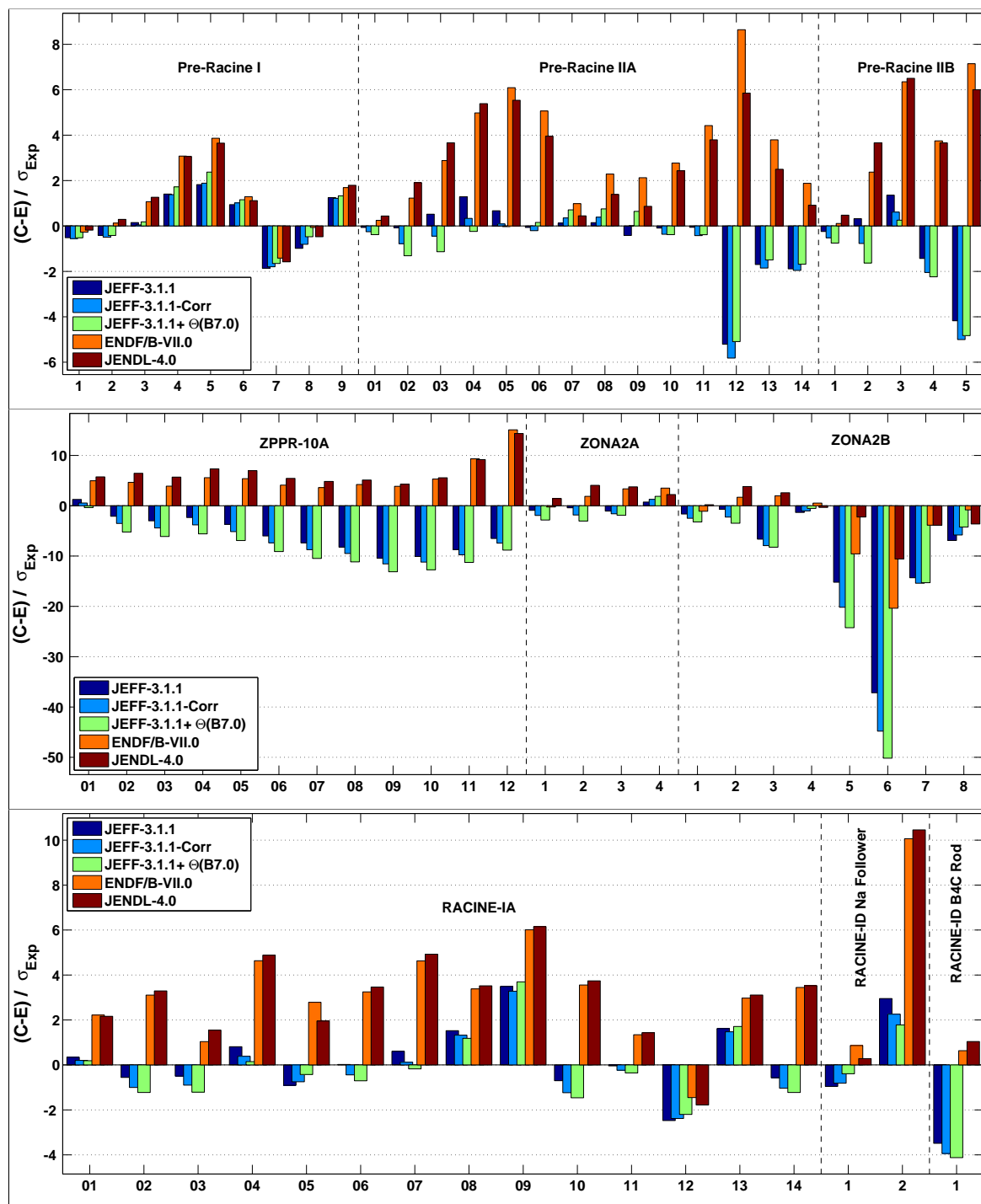


FIGURE 2.5. Valeurs  $\frac{C-E}{\sigma_{Exp}}$  obtenues avec ERANOS-PARIS pour les SVRE interprétés dans les maquettes MASURCA et ZPPR en utilisant les différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$

## 2.4 Tentative d'Ajustement des Sections Multigroupes

Précédemment, nous avons pu remarquer que les données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$  provenant de JEFF-3.1.1 donnaient en moyenne les meilleurs accords ( $C - E =$ ) sur les vidanges du sodium, même si parfois nous avons obtenu des résultats quelque peu dégradés (en l'occurrence sur ZPPR-10A). Afin d'améliorer encore davantage ces valeurs, on peut utiliser une méthode d'ajustement des sections efficaces multigroupes<sup>6</sup>. Dans cette partie, nous souhaitons montrer qu'un tel ajustement n'est fiable que si la matrice de covariances sur les paramètres ajustés (les sections multigroupes) est bien connue, ce qui n'est pas le cas du sodium de JEFF-3.1.1 (pas de données de covariances associées à l'évaluation)

À noter que la technique, qui va être employée peu après, est très largement employée dans le domaine des données nucléaires, puisque l'un des Sous-Groupes de la NEA (SG33 [29]) est chargé d'étudier les méthodes et les problématiques liées à l'utilisation combinée d'expériences intégrales et des matrices de covariances. La méthode d'ajustement décrite ci-dessous est plus amplement détaillée dans le rapport [30] du SG33.

### 2.4.1 Rappel de la Théorie pour l'Ajustement Multigroupe

L'ajustement de sections efficaces est basé sur une méthode Bayésienne d'estimation de paramètres (Les méthodes sont plus longuement détaillées dans le Chapitre 4). La théorie a été développée et utilisée à de nombreuses occasions et dans plusieurs domaines de la physique. Plusieurs hypothèses sont faites :

- toutes les sources d'erreurs sont distribuées statistiquement de manière gaussienne.
- les paramètres intégraux varient de manière linéaire avec un changement des sections efficaces.

On utilise alors la méthode des moindres carrés généralisés (*Generalized Least Squares Method* ou GLSM) qui donne le jeu de sections efficaces ajustées ou *best-estimate*  $\vec{\sigma}_{be}$  :

$$\vec{\sigma}_{be} = \vec{\sigma}_m + M_\sigma \cdot S^T \cdot (M_E + S \cdot M_\sigma \cdot S^T)^{-1} \cdot (\vec{E} - \vec{C}(\sigma_m)) \quad (2.3)$$

avec :

- $\vec{\sigma}$ , le vecteur des  $n_p$  paramètres microscopiques à estimer (en %), en l'occurrence ici des sections efficaces multigroupes ;

---

6. Les sections du sodium de JEFF-3.1.1 ont été modifiées en tenant compte des tendances de l'ajustement multigroupe de la bibliothèque ERALIB-I

- $M_\sigma$ , la matrice de variance-covariance (supposée connue) sur les paramètres microscopiques ;
- $\vec{E}$ , le vecteur composé des  $n_i$  contenant les valeurs intégrales mesurées (en pcm) ;
- $M_E$ , la matrice de variance-covariance (supposée connue) associée aux résultats intégraux mesurés ;
- $\vec{C}(\sigma_m)$ , le vecteur contenant les valeurs intégrales calculées (en pcm), en utilisant le jeu de paramètres microscopiques  $\vec{\sigma}_m$  connu *a priori* ;
- $S$ , la matrice  $(n_i, n_p)$  composée des coefficients de sensibilité des résultats intégraux aux paramètres microscopiques, exprimés en pcm/% dans notre cas.

De plus, la méthode donne la matrice variances-covariances *best-estimate* sur les paramètres  $M_\sigma^{be}$  par :

$$M_\sigma^{be} = M_\sigma - M_\sigma \cdot S^T \cdot \left( M_E + S \cdot M_\sigma \cdot S^T \right)^{-1} \cdot S \cdot M_\sigma \quad (2.4)$$

La méthodologie proposée a comme premier objectif de minimiser une fonction coût souvent appelée  $\chi_{GLS}^2$  qui s'écrit :

$$\chi_{GLS}^2 = (\vec{\sigma}_{be} - \vec{\sigma}_m)^T M_\sigma^{-1} (\vec{\sigma}_{be} - \vec{\sigma}_m) + \left( \vec{E} - \vec{C}(\sigma_{be}) \right)^T M_E^{-1} \left( \vec{E} - \vec{C}(\sigma_{be}) \right) \quad (2.5)$$

La nouvelle matrice  $M_\sigma^{be}$  permet d'obtenir des incertitudes réduites dues aux paramètres microscopiques sur les valeurs intégrales calculées suivant :

$$M_C = S \cdot M_\sigma \cdot S^T \quad (2.6)$$

L'hypothèse de linéarité des paramètres intégraux avec les sections efficaces nous permet également de connaître les valeurs calculées *a posteriori*  $\vec{C}(\vec{\sigma}_{be})$  suivant la formulation :

$$\vec{C}(\vec{\sigma}_{be}) = \vec{C}(\vec{\sigma}_m) + S \cdot (\vec{\sigma}_{be} - \vec{\sigma}_m) \quad (2.7)$$

### 2.4.2 Avantages et Inconvénients de cette Méthode

La méthode des moindres carrés généralisés présente de nombreux avantages :

- elle est pragmatique et bien adaptée aux concepts de réacteur.
- elle fonctionne aussi bien avec les codes de neutronique de RNR qu'avec les codes dédiés aux REL (Réacteurs à Eau Légère).

- les mathématiques mises en jeux dans cette méthode sont basées sur une théorie de type moindres carrés, qui est largement employée.
- elle a été appliquée avec succès sur des cas réels : ERALIB1 par exemple.

Cependant, cette méthodologie possède également certains inconvénients :

- Le nombre de paramètres ajustés peut être très important. Dans le cas d'ERALIB1,  $n_p = n_{\text{isotopes}} \times n_{\text{reactions}} \times n_{\text{groupes}} > 1000$  et il est donc nécessaire de “trier” les paramètres peu sensibles.
- Les paramètres et leurs covariances obtenus *a posteriori* sont fortement dépendants des données d'entrée (paramètres et covariances *a priori*).
- Le but original de cette méthode est de fournir des tendances afin d'améliorer les données nucléaires. Or, il faut garder à l'esprit que les biais de calcul (schéma imprécis, maillage multigroupe trop grossier, ...) vont être, en même temps que les sections efficaces, “corrigés” à travers les paramètres ajustés. Si le schéma de calcul doit être modifié par la suite, ces sections ajustées ne doivent plus être utilisées puisque on sort du domaine de validité de la méthode.
- Bien souvent, les données expérimentales (géométries, bilans matières, conditions expérimentales, incertitudes statistiques et systématiques) sont de faible qualité. De ce fait, on est souvent dans l'incapacité à fournir des corrélations entre les expériences ( $M_E$  est la plupart du temps diagonale).
- Il est difficile de fournir une définition du domaine d'application des bibliothèques multigroupes ajustées et on doit être prudent quant à l'utilisation de ces sections ajustées pour des concepts de réacteurs sortant de ce domaine (problème d'extrapolation).
- Enfin, les effets d'autoprotection et de dilution des sections efficaces ne sont pas pris en compte dans l'ajustement et pour le moment, aucune solution n'est envisagée pour y remédier.

### 2.4.3 Obtention des Matrices de Sensibilités

Les coefficients de sensibilité  $S_{ij}$  contiennent les dérivées au premier ordre des résultats intégraux aux données microscopiques. Ces derniers sont donnés la plupart du temps sous la forme :

$$S_{ij} = \frac{\partial C_i}{\partial \sigma_j} \cdot \frac{\sigma_j}{C_i} \quad (2.8)$$

Ainsi, les Equations 2.9 et 2.10 donnent respectivement la sensibilité au  $k_{\text{eff}}$  et la sensibilité à la réactivité de vidange sodium :



$$S_{k_{\text{eff}}} = \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial \sigma} \cdot \frac{\sigma}{k_{\text{eff}}} \quad (2.9)$$

$$S_{\Delta\rho} = \frac{S_{k_{\text{eff}}^{\text{pert}}}}{k_{\text{eff}}^{\text{pert}} \cdot \Delta\rho} - \frac{S_{k_{\text{eff}}^{\text{ref}}}}{k_{\text{eff}}^{\text{ref}} \cdot \Delta\rho} \quad (2.10)$$

Le gros avantage des codes déterministes en matière de production de sensibilités réside dans l'application aisée de la théorie des perturbations [31, 32]. De cette manière, il est facile d'obtenir les dérivées par rapport aux sections efficaces. Les codes stochastiques tels que TRIPOLI ou MCNP [33] peuvent estimer les perturbations induites par une modification locale des données nucléaires. Cependant, cela reste laborieux à mettre en œuvre dans le cas d'une vidange sodium et le calcul de ces perturbations est systématiquement entaché d'une incertitude statistique non-négligeable.

#### 2.4.4 Données d'Entrée avant l'Ajustement

Comme expliqué plus tôt, nous utiliserons les sensibilités calculées par ERANOS aux sections efficaces multigroupes du  $^{23}\text{Na}$ . Notre ajustement sera donc basé sur les sections de CAPTURE (somme des réactions  $(n, \gamma)$ ,  $(n, p)$ , etc...), ELASTIC et INELASTIC (somme des réactions qui renvoient un neutron et une autre particule (différente d'un neutron), *i.e.* les réactions inélastiques et  $(n, np)$ ,  $(n, n\alpha)$ , etc...) condensé à 15 groupes d'énergie du sodium. Les sensibilités pour la N,XN (somme des réactions  $(n, 2n)$ ,  $(n, 3n)$ , etc...) du sodium étant très faibles (environ 100 fois inférieures que pour les autres sections), on ne s'intéressera pas à cette dernière pour l'ajustement. Précédemment, nous avons vu que les meilleurs  $C - E$  ont été obtenus avec le sodium de JEFF-3.1.1, nous allons donc faire cet ajustement avec cette évaluation pour calculer le vecteur  $\vec{C}(\vec{\sigma}_m)$  et les matrices de sensibilité.

Après l'ajustement, nous aurons 15 valeurs de tendance pour la section de CAPTURE, 15 valeurs pour la section ELASTIC et 5 valeurs pour la section INELASTIC (seuil à 500 keV) d'où un total de 35 paramètres microscopiques pour le vecteur  $\vec{\sigma}_m$ .

Il est nécessaire de choisir judicieusement les expériences du vecteur  $C(\vec{\sigma}_m)$ . Par exemple, on exclut les résultats obtenus sur la configuration Cirano ZONA2B car nous avons vu les limites du schéma de calcul cellule pour générer les jeux de sections dans le réflecteur. De même, les expériences de vidanges avec un  $|C - E|/\sigma_{\text{exp}} \gg 1$ . doivent être rejetées car elles auraient un poids trop fort dans l'ajustement.

Nous n'avons pas mis de corrélation dans la matrice  $M_E$  entre les expériences, même s'il est certain que ces dernières sont toutes corrélées d'une certaine manière (géométrie

semblable, utilisation du même type d'assemblage) dans l'installation MASURCA. Nous avons décidé d'ajuster seulement les vidanges sodium car la masse critique est bien plus sensible aux données nucléaires des actinides majeurs. On prend les incertitudes citées dans les rapports d'expérience puisque ces dernières sont dans l'ensemble réalistes.

Concernant la matrice  $M_\sigma$ , le problème est plus délicat. Dans le Chapitre précédent (page 22), nous avons vu qu'il n'existait pas de matrices de covariances avec l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1. Par contre, on s'était intéressé à 3 jeux de matrices provenant de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA. Comme il est impossible de trancher sur la qualité de ces matrices, nous les utiliserons toutes et étudierons attentivement l'impact que cela aura sur les tendances.

#### 2.4.5 Comparaison des Tendances Obtenues *a posteriori*

On trouve dans la Table 2.16 les tendances (en %) à appliquer aux sections efficaces du sodium de la bibliothèque JEFF-3.1.1. On remarque que les tendances obtenues sont très sensibles à la matrice de covariances  $M_\sigma$  donnée en *a priori* et sont donc très différentes les unes par rapport aux autres. Il arrive même assez souvent que les tendances obtenues soient de signe opposé (section INELASTIC avec JENDL-4.0 et TENDL-2010), ce qui montre une grande sensibilité de la solution avec un tel ajustement aux données d'entrée. Il apparaît clair que les matrices de covariances utilisées en *prior* doivent être intimement liées aux sections efficaces, *i.e.* que les données de covariances doivent être préparées en même temps que les sections efficaces pendant le processus d'évaluation.

Dans la Table 2.17, on trouve les incertitudes relatives *a priori* et *a posteriori* obtenues en utilisant les différents jeux de covariances disponibles. On peut voir que les écart-types *a posteriori* sont soit plus faibles, soit égaux aux écart-types *a priori*. Par ailleurs, on remarque que les incertitudes pour la section de CAPTURE n'ont guère évolué (à part le groupe 1), ceci est principalement dû aux faibles sensibilités des vidanges à cette section. Ainsi, ces paramètres auraient pu être retirés de l'ajustement sans modifier pour autant les autres valeurs ajustées. Enfin, on remarque que les tendances pour section ELASTIC dans les groupes thermiques (groupes 11 à 15) sont assez importantes avec les jeux de covariances TENDL-2010 et BOLNA. Par contre, les incertitudes *a priori* avec JENDL-4.0 pour cette section dans ce domaine d'énergie ne donnent pas assez de liberté aux paramètres pour être ajustés, ce qui explique les tendances quasi-nulles obtenues.

Avant l'ajustement, le  $\chi_{GLS}^2$  *a priori* valait 631.4. Après ajustement, on obtient respectivement, pour les jeux de covariances JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA, des valeurs de  $\chi_{GLS}^2$  de 191.4, 209.2 et 192.2. On observe donc une amélioration globale des valeurs calculées.

N° Groupe	Section	Origine Covariances		
		JENDL-4.0	TENDL-2010	BOLNA
1	ELASTIC	14.79	-0.42	0.39
	INELASTIC	-21.88	3.70	-9.05
	CAPTURE	-2.80	-6.56	-70.47
2	ELASTIC	7.74	-0.94	-1.51
	INELASTIC	-14.01	6.01	-5.95
	CAPTURE	-1.49	-0.92	-20.82
3	ELASTIC	3.31	-0.98	-1.25
	INELASTIC	-14.80	8.05	8.51
	CAPTURE	-1.59	-0.01	-1.25
4	ELASTIC	-3.27	-0.97	-1.41
	INELASTIC	25.79	12.50	30.45
	CAPTURE	-1.68	0.00	4.36
5	ELASTIC	0.00	1.27	-0.55
	INELASTIC	-13.64	16.24	14.36
	CAPTURE	-1.66	-0.06	-0.08
6	ELASTIC	-1.05	2.01	-0.82
	CAPTURE	-1.65	0.18	-1.46
7	ELASTIC	-3.30	1.32	-0.71
	CAPTURE	-1.55	-0.17	-0.49
8	ELASTIC	-3.05	1.41	-1.54
	CAPTURE	-1.55	-0.26	-0.22
9	ELASTIC	-11.87	-3.28	-7.02
	CAPTURE	-0.79	-1.54	0.00
10	ELASTIC	-14.44	-5.91	-9.51
	CAPTURE	-0.68	-2.74	-0.02
11	ELASTIC	-2.07	0.52	-8.88
	CAPTURE	0.35	-0.48	-0.03
12	ELASTIC	-0.07	1.16	-8.75
	CAPTURE	-0.16	-0.26	-0.03
13	ELASTIC	-0.07	1.18	-8.67
	CAPTURE	-0.30	-0.25	-0.03
14	ELASTIC	-0.07	1.18	-8.65
	CAPTURE	-0.66	-0.25	-0.03
15	ELASTIC	-0.08	1.15	-8.44
	CAPTURE	-0.28	-0.23	-0.02

TABLE 2.16. Tendances (en %), obtenues en utilisant les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA, sur les sections efficaces ELASTIC, INELASTIC et de CAPTURE du sodium de JEFF-3.1.1

N°Groupe	Section	Origine Covariances					
		JENDL-4.0		TENDL-2010		BOLNA	
		Prior	Posterior	Prior	Posterior	Prior	Posterior
1	ELASTIC	27.56	26.39	3.43	3.25	1.80	1.56
	INELASTIC	35.28	33.98	4.15	3.45	18.79	17.52
	CAPTURE	8.26	8.22	17.52	17.04	46.44	41.44
2	ELASTIC	6.23	4.36	3.75	2.36	4.62	3.06
	INELASTIC	8.90	7.33	3.94	2.34	8.87	6.85
	CAPTURE	8.28	8.27	4.44	4.40	24.33	23.56
3	ELASTIC	5.27	3.41	3.80	2.16	3.72	2.40
	INELASTIC	19.62	13.02	4.44	2.30	12.56	4.13
	CAPTURE	13.00	12.99	3.72	3.72	1.70	1.66
4	ELASTIC	3.21	1.73	3.77	2.16	3.01	1.94
	INELASTIC	16.63	10.90	6.61	3.75	28.00	10.70
	CAPTURE	15.55	15.53	3.37	3.37	7.44	7.33
5	ELASTIC	5.08	1.67	4.71	0.99	3.31	1.71
	INELASTIC	20.00	17.13	8.71	5.34	50.00	49.57
	CAPTURE	12.93	12.89	0.24	0.24	6.81	6.81
6	ELASTIC	4.57	1.82	6.92	1.71	3.25	1.62
	CAPTURE	12.93	12.89	23.33	23.30	23.59	23.57
7	ELASTIC	5.42	2.68	5.24	1.44	2.38	1.27
	CAPTURE	10.29	10.27	1.69	1.69	6.79	6.79
8	ELASTIC	4.00	2.25	6.39	1.58	2.87	1.50
	CAPTURE	10.60	10.58	1.46	1.46	6.63	6.63
9	ELASTIC	7.43	4.22	1.88	1.37	3.23	2.78
	CAPTURE	8.37	8.24	1.12	1.05	1.18	1.18
10	ELASTIC	11.31	6.89	3.11	2.57	4.93	3.77
	CAPTURE	8.36	8.23	1.88	1.76	2.28	2.28
11	ELASTIC	2.43	1.42	5.25	1.36	4.76	3.58
	CAPTURE	7.52	7.51	1.92	1.92	2.30	2.30
12	ELASTIC	2.75	2.75	5.65	1.39	4.73	3.54
	CAPTURE	7.55	7.55	1.91	1.91	2.29	2.29
13	ELASTIC	2.78	2.78	5.66	1.39	4.71	3.52
	CAPTURE	8.59	8.59	1.91	1.91	2.29	2.29
14	ELASTIC	2.90	2.90	5.65	1.39	4.70	3.51
	CAPTURE	8.70	8.70	1.91	1.91	2.29	2.29
15	ELASTIC	3.23	3.23	5.45	1.34	4.59	3.42
	CAPTURE	3.37	3.36	1.91	1.91	2.07	2.07

TABLE 2.17. Incertitudes relatives (en %) prior et posterior, obtenues en utilisant les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA, sur les sections efficaces ELASTIC, INELASTIC et de CAPTURE

Sur la Figure 2.6, on montre les  $\frac{C-E}{\sigma_{\text{exp}}}$  estimés *a posteriori* obtenus avec les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA et comparés avec les  $\frac{C-E}{\sigma_{\text{exp}}}$  utilisé en *a priori*. Tout d'abord, on remarque que les valeurs calculées *a posteriori*  $\vec{C}(\vec{\sigma}_{be})$  ne sont pas vraiment dépendantes des matrices de covariances utilisées en amont pour l'ajustement. Ce constat est quelque peu étonnant car ces valeurs sont calculées à partir des différences entre les sections *a posteriori* et *a priori* (cf. Equation 2.7), qui sont parfois opposées (vue précédemment dans la Table 2.16). Ensuite, on voit que la minimisation des  $\chi_{GLS}^2$  s'est faite principalement sur les expériences de vidange concernant ZPPR-10A, qui montrait des écarts *a priori* avec les valeurs expérimentales relativement importants. D'ailleurs, les valeurs *a posteriori* sur les expériences de MASURCA ne sont, en moyenne, pas améliorées ni dégradées.

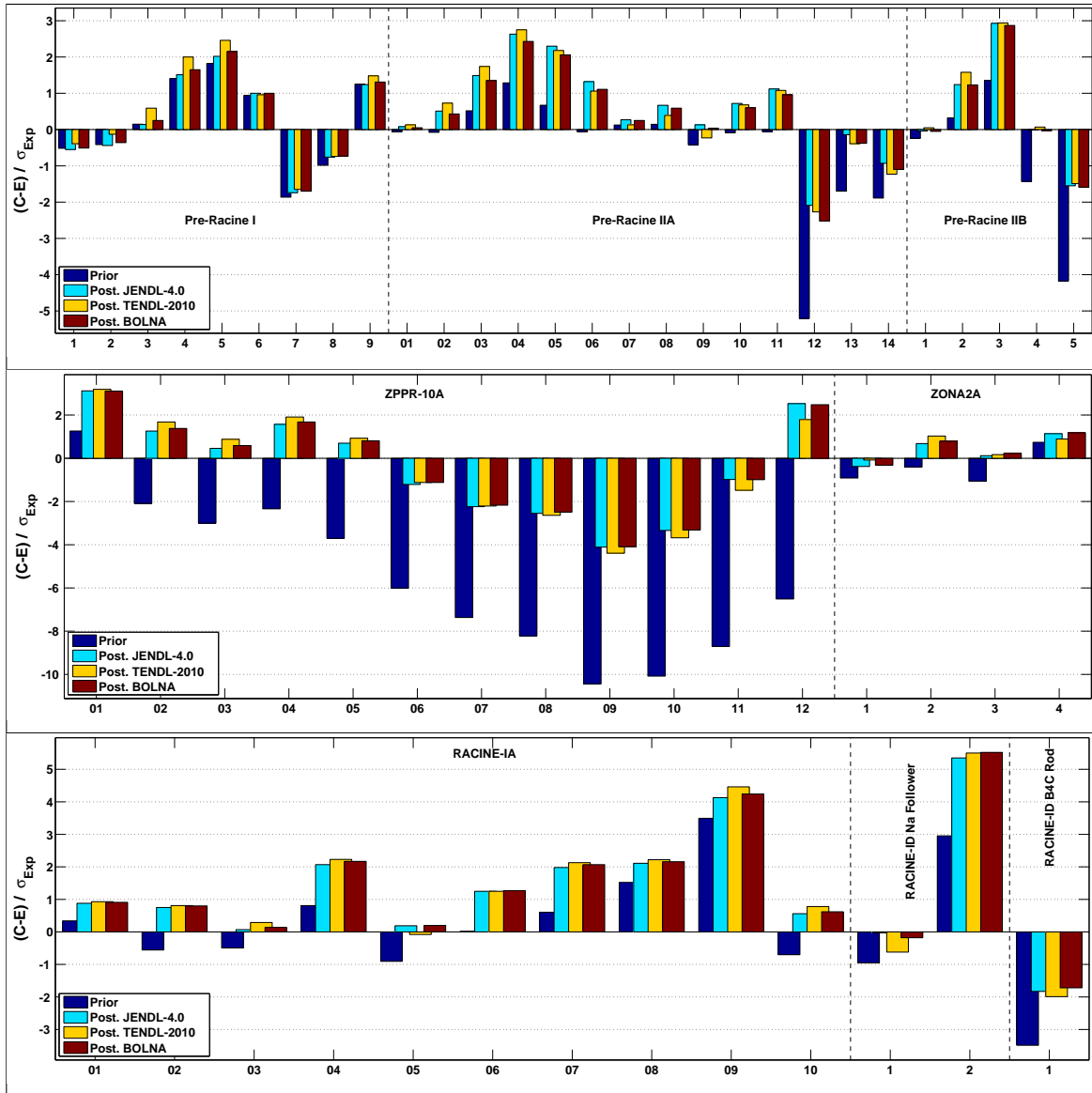


FIGURE 2.6. Valeurs  $\frac{C-E}{\sigma_{exp}}$  obtenues a posteriori en utilisant les matrices de covariances de JENDL-4.0, TENDL-2010 et BOLNA

## 2.5 Conclusion

Dans ce Chapitre, nous avons étudié et quantifié les effets des données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$  sur deux grandeurs neutroniques d'intérêt des RNR à caloporteur sodium, à savoir la masse critique et la réactivité de vidange sodium (SVRE).

Concernant cette première grandeur, on a constaté que l'utilisation des différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$  disponibles provoquait une variation moyenne d'environ 300 pcm, suivant les configurations étudiées. L'usage de distributions angulaires élastiques plus anisotropes induit une baisse systématique d'environ 100 pcm (baisse qui est généralement bien calculée avec les codes déterministes ERANOS-PARIS par rapport au calcul étalon TRIPOLI-4.7). On a remarqué également que l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1 donnait les réactivités les plus élevées.

De nombreuses configurations de vidange sodium (un total de 69) ont été étudiées pour déterminer de manière précise comment les données nucléaires du sodium influençaient ce paramètre neutronique. Il en ressort que l'évaluation dans JEFF-3.1.1 produit généralement les meilleurs écarts calcul-expérience ( $C - E$ ). De manière systématique, les valeurs calculées avec les autres évaluations du sodium étaient supérieures à celles de JEFF, parfois de plusieurs  $\sigma$  expérimentaux. Les distributions angulaires jouent également un rôle (baisse de la vidange calculée dans les combustibles et augmentation dans les éléments fertiles) sur les SVRE mais l'effet est moindre que pour la masse critique.

À partir des résultats calculés avec  $^{23}\text{Na}_{\text{JEFF}}$ , nous avons tenté un ajustement multi-groupe en employant les différentes matrices de covariances étudiées à la fin du chapitre précédent. Nous avons alors constaté l'échec d'une telle méthode puisque les tendances obtenues pour certains groupes étaient très contradictoires en fonction des matrices de covariances utilisées.

Dans le Chapitre précédent, nous avons constaté que les données évaluées dans  $^{23}\text{Na}_{\text{ENDFB}}$  et  $^{23}\text{Na}_{\text{JENDL}}$  étaient assez proches des mesures microscopiques, quand en contre-partie, celles de JEFF-3.1.1 en étaient parfois très éloignées. Or, dans ce Chapitre, cette tendance s'est complètement inversée puisque on obtient un bon accord avec les mesures intégrales en utilisant JEFF-3.1.1 et on dégrade parfois très fortement ces résultats avec les évaluations américaine ou japonaise.

En plus de ces conclusions, il faut rappeler les erreurs grossières commises sur les sections totale et élastique dans JEFF-3.1.1 (corrigé avec  $^{23}\text{Na}_{\text{J3Corr}}$ ) qui dégradent encore plus les accords avec les mesures microscopiques. Tout cela justifie la nécessité de ré-évaluer les données nucléaires du sodium, c'est-à-dire au minimum toutes les sections efficaces entre 0 et 20 MeV

---

ainsi que les distributions angulaires puisque ces dernières ne sont pas négligeables dans les configurations de taille réduite, comme sur les réacteurs maquettes telles que MASURCA et ZPPR.

La ré-évaluation va dans un premier temps consister à obtenir un accord avec les données microscopiques convenables, *i.e.* obtenir un jeu de paramètres (et ses covariances) de différents modèles de réactions nucléaires. Après l'assimilation de données microscopiques, il sera nécessaire d'absorber l'information intégrale (les expériences de vidanges) sur les paramètres de modèles, tout cela afin d'obtenir une évaluation du sodium qui réponde à la fois aux expériences microscopiques et intégrales.

Dans le Chapitre 3, les modèles de réactions nucléaires et leurs paramètres sont présentés ainsi que les outils qui seront employés lors du processus d'évaluation. Les résultats de la ré-évaluation du sodium à proprement parler sont détaillés dans le Chapitre 5.





# Aspects Théoriques

## Sommaire

<b>3.1</b>	<b>Théorie de l'Interaction Neutron-Noyau . . . . .</b>	<b>62</b>
<b>3.2</b>	<b>Modèle du Noyau Composé . . . . .</b>	<b>63</b>
3.2.1	Sections Efficaces . . . . .	67
3.2.2	Sections Efficaces Différentielles . . . . .	68
<b>3.3</b>	<b>Domaine des Résonances Résolues (RRR) . . . . .</b>	<b>69</b>
3.3.1	Formalisme de la Matrice-R . . . . .	69
3.3.2	La Matrice de Niveaux A . . . . .	71
3.3.3	Les Approximations de la Matrice-R . . . . .	72
3.3.4	L'Approximation de Reich-Moore (RM) . . . . .	74
3.3.5	Les Niveaux Externes . . . . .	75
3.3.6	Les Paramètres Utilisés dans le RRR . . . . .	76
<b>3.4</b>	<b>Domaine du Continuum . . . . .</b>	<b>76</b>
3.4.1	Le Modèle Optique . . . . .	78
3.4.2	Le Modèle Optique Sphérique . . . . .	79
3.4.3	Les Réactions Directes . . . . .	84
3.4.4	Les Réactions du Pré-Équilibre . . . . .	85
3.4.5	Les Réactions du Noyau Composé . . . . .	86
3.4.6	Récapitulatif sur les Sections Efficaces dans le Continuum . . . . .	93
<b>3.5</b>	<b>Conclusion sur les Aspects Théoriques . . . . .</b>	<b>94</b>

On détaille dans cette partie les aspects théoriques liés à l'interaction entre un neutron et un noyau. Pour une description plus approfondie, on conseille au lecteur les références [34] et [35] qui traitent le sujet de manière plus générale.

### 3.1 Théorie de l'Interaction Neutron-Noyau

Quand des noyaux d'un élément donné, par exemple le  $^{23}\text{Na}$ , sont bombardés par des neutrons, on observe des interactions nucléaires telles que la diffusion élastique, la diffusion inélastique, la capture radiative, la fission et bien d'autres encore. Les probabilités de ces processus  $(n, n)$ ,  $(n, n')$ ,  $(n, \gamma)$  ou  $(n, f)$ , sont reliées par le biais de la notion de sections efficaces dont l'unité est le barn ( $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ ) et dépendent fortement de l'énergie des neutrons incidents. Des neutrons thermiques jusqu'aux neutrons rapides (qui possèdent des énergies bien supérieures au MeV), on distingue deux types d'interaction :

- les interactions directes, avec en particulier la diffusion potentielle (aussi appelée *shape elastic* en anglais) ;
- les interactions passant par la formation d'un noyau composé, où on trouvera les réactions élastique  $(n, n)$ , inélastique  $(n, n')$ , de capture radiative  $(n, \gamma)$ , de fission  $(n, f)$  et d'autres encore comme les réactions  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$ ,  $(n, 2n)$ , ...

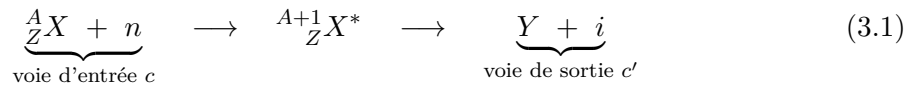
Les réactions par formation d'un noyau composé (*compound nucleus reactions*) s'opèrent quand un neutron va interagir avec un noyau pour former un composé, dans lequel les nucléons vont subir un grand nombre de collisions, qui va décroître principalement soit par production de particules, soit par décroissance  $\gamma$ , soit par fission. Dans certains cas, il est possible que le neutron incident soit absorbé directement. La réaction directe (*direct reaction*) comme la capture directe est une réaction s'opérant en une étape où les nucléons, ne participant pas à la réaction, demeurent non perturbés. La diffusion potentielle non-résonnante (*shape elastic*) est également une réaction directe. Sa section efficace est proche de la section efficace géométrique du noyau (réaction assimilable à un choc élastique entre deux billes).

Les réactions directes sont très importantes pour des neutrons avec une énergie supérieure au MeV, comme nous le verrons par la suite. Les sections efficaces du noyau composé se caractérisent par des structures résonnantes dont la largeur dépend de la durée de vie des états nucléaires dans le noyau composé. Mais à partir d'une certaine énergie, on ne peut plus distinguer les résonances de manière expérimentale. C'est pourquoi on sépare usuellement le domaine énergétique pour les applications relatives aux réacteurs ( $10^{-5} \text{ eV}$  à  $20 \text{ MeV}$ ) en trois régions énergétiques : le domaine des résonances résolues (*Resolved Resonance Range* ou RRR), le domaine des résonances non-résolues (*Unresolved Resonance Range* ou URR) et le continuum. Le RRR est décrit par la théorie de la matrice- $R$  (*R-Matrix*) qui est paramétrisé à l'aide de paramètres de résonances. Le URR est basé une formulation moyennée de la matrice- $R$ , qui utilise des paramètres de résonance moyens (obtenus grâce aux propriétés statistiques des résonances). Dans le continuum, on emploie des théories basées sur le modèle optique et des modèles statistiques. Les évaluations existantes du  $^{23}\text{Na}$  (et la notre également) ne

contiennent pas de domaine non-résolu, car le faible nombre de résonances pour cet isotope ne permet pas d'avoir une statistique suffisante pour déterminer les paramètres moyens. C'est la raison pour laquelle ce domaine se sera pas traité ici.

## 3.2 Modèle du Noyau Composé

Dans le cadre de la théorie du noyau composé de Bohr [36], on considère que la réaction induite par un neutron est un processus en deux étapes :



Le noyau composé atteint une énergie d'excitation  $E^*$  puis ce dernier se désintègre spontanément en émettant une, voire plusieurs particules ( $\gamma, n, p, \alpha, \dots$ ) comme le montre la Figure 3.1. Au moment de la désintégration du noyau composé, ce dernier n'a aucun souvenir de la manière dont il a été créé (hypothèse de Bohr). Ainsi, il est possible de former le même état du noyau composé par deux réactions différentes, l'une qui correspond à la voie d'entrée et l'autre à la voie de sortie.

Une fois que le noyau composé est formé, ce dernier va pouvoir se désexciter de différentes manières (qui sont résumées dans la Table 3.1) :

- **La diffusion élastique** : la particule incidente est absorbée par le noyau cible puis est ré-émise.
- **La capture radiative** : le noyau composé se trouve dans un état excité. Il va émettre une série de photons  $\gamma$  afin de rejoindre son état fondamental.
- **La diffusion inélastique** : l'énergie de la particule incidente  $E$  est supérieure à l'énergie  $E_1$  du premier niveau excité du noyau cible. Une particule du même type est alors ré-émise avec une énergie  $(E - E_1)$  laissant le noyau résiduel dans un état excité. Ce dernier émet un  $\gamma$  d'énergie  $E_1$  pour retrouver son état fondamental.
- **La fission** : le noyau composé (seulement les noyaux lourds avec  $Z \geq 90$ ) dans un état excité se fractionne en deux fragments, plusieurs neutrons (neutrons prompts) et une série de photons  $\gamma$ .
- **L'émission de particules** : lorsque c'est énergétiquement possible, le noyau composé va émettre une ou plusieurs particules chargées comme des protons, des particules  $\alpha$ , ...

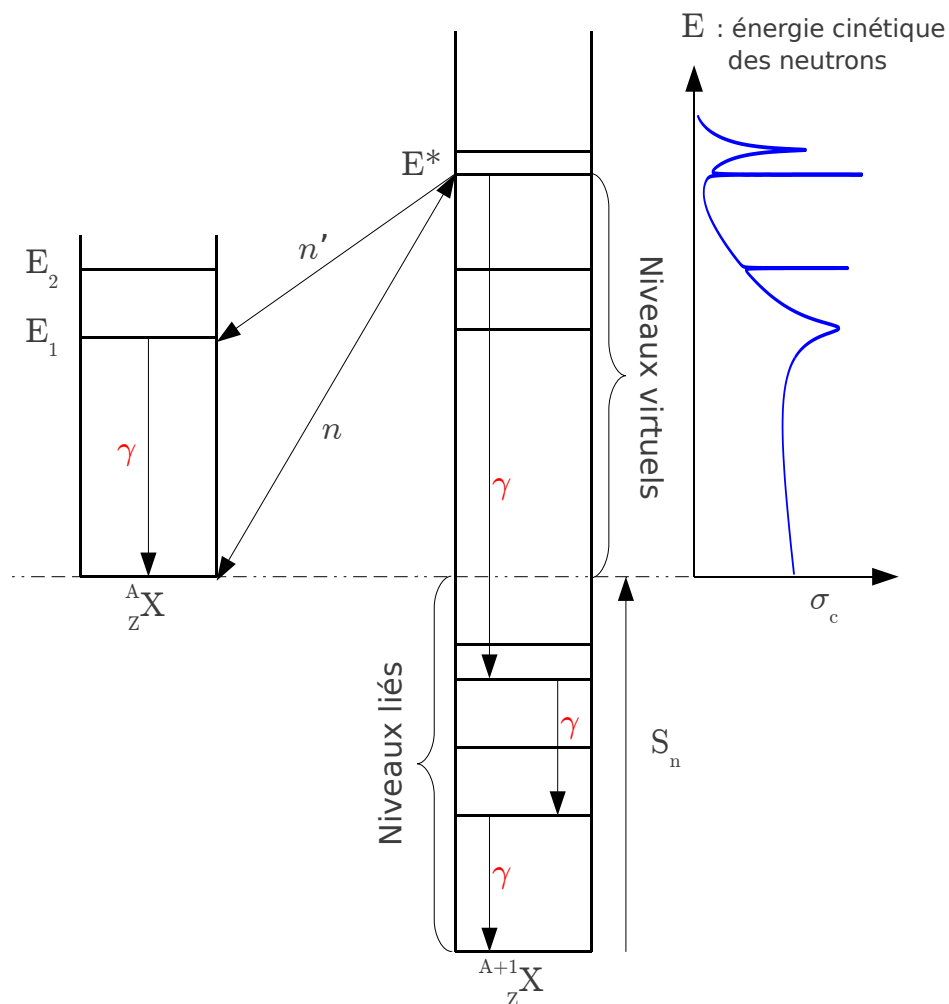


FIGURE 3.1. Schéma de niveaux du noyau composé. Les résonances excitées décroissent par émission  $\gamma$  à des niveaux d'énergie inférieure. Les réactions par diffusion inélastique peuvent se produire si l'énergie dans le centre de masse est plus grande que l'énergie du premier niveau excité du noyau cible

Élastique	Diffusion élastique potentielle	Diffusion	Noyau Composé	<b>Totale</b>
	Diffusion résonante élastique ( $n, n$ )			
Inélastique	Diffusion résonante inélastique ( $n, n'$ )	Absorption	Noyau Composé	<b>Totale</b>
	Capture radiative ( $n, \gamma$ )			
	Fission ( $n, f$ )			
	Émission de particules ( $n, p$ ), ( $n, xn$ )			

TABLE 3.1: Résumé des interactions possibles

L'énergie d'excitation totale du noyau composé  $E^*$  est la somme de l'énergie cinétique du neutron incident  $E$  dans le centre de masse (CM) et de l'énergie de séparation du neutron  $S_n$  :

$$E^* = E + S_n \quad (3.2)$$

On mesure généralement les énergies des neutrons dans le référentiel du laboratoire et on détermine l'énergie cinétique du neutron  $E$  dans le CM par la formulation :

$$E = \left( \frac{A}{A+1} \right) E_{\text{lab}} \quad (3.3)$$

avec  $A$  nombre de masse du noyau cible

On peut expliquer la présence des résonances par les niveaux virtuels ou non-liés du noyau composé dont l'énergie est supérieure à  $S_n$  (cf. Figure 3.1). On observera une résonance lorsque l'énergie d'excitation du noyau composé est égale à celle d'un tel niveau. Le temps de vie de ces résonances  $\tau_\lambda$  est relié à la largeur totale de la résonance  $\Gamma_\lambda$  par le principe d'incertitude d'Heisenberg :

$$\Gamma_\lambda \cdot \tau_\lambda \simeq \hbar \simeq 10^{-15} \text{ eV.s} \quad (3.4)$$

La largeur totale d'un niveau se décompose en largeurs partielles  $\Gamma_{\lambda c}$  qui correspondent aux probabilités de décroissance du noyau composé excité. Dans le cas du  $^{23}\text{Na}$ , seule la diffusion élastique (et la diffusion inélastique à partir de 460 keV) et la capture radiative ont lieu, on peut donc définir la largeur totale telle que :

$$\Gamma_\lambda = \Gamma_{\lambda n} + \Gamma_{\lambda \gamma} \quad \text{pour } E < 460 \text{ keV} \quad (3.5)$$

$$\Gamma_\lambda = \Gamma_{\lambda n} + \Gamma_{\lambda \gamma} + \Gamma_{\lambda n'} \quad \text{pour } E \geq 460 \text{ keV} \quad (3.6)$$

où  $\Gamma_{\lambda n}$  est la largeur neutronique ( $\Gamma_{\lambda n'}$ , la largeur neutronique inélastique) et  $\Gamma_{\lambda \gamma}$  la largeur radiative totale. Cette dernière est en fait la contribution de toutes les largeurs radiatives partielles :

$$\Gamma_{\lambda \gamma} = \sum_{x \in \gamma} \Gamma_{\lambda x} \quad (3.7)$$

Chaque résonance ( $\lambda$ ) est définie par un moment angulaire  $J$  et par sa parité  $\pi$ . Les valeurs permises dépendent tout d'abord du spin  $I$  et de la parité  $\pi_I$  du noyau cible, du spin  $i$  et de la parité  $\pi_i$  de la particule incidente, et enfin, du moment angulaire orbital  $l$  de la particule incidente. Par combinaison vectorielle, on détermine le *channel spin* appelé  $s$  et le moment angulaire totale  $J$  avec sa parité  $\pi$  de l'état composé.

Le spin  $s$  est calculé selon :

$$|I - i| \leq s \leq I + i \quad (3.8)$$

De même, on obtient le moment angulaire total et sa parité  $J^\pi$  par les relations :

$$|l - s| \leq J \leq l + s$$

$$\pi = (-1)^l \cdot \pi_I \cdot \pi_i$$
(3.9)

Les valeurs permises de  $J^\pi$  pour le  $^{23}\text{Na}$  sont résumées dans la Table 3.2. Le facteur d'existence statistique de l'état de spin  $J$  est  $g_J$  :

$$g_J = \frac{(2J + 1)}{(2I + 1) \cdot (2i + 1)}$$
(3.10)

Les deux étapes du noyau composé (formation et décroissance) sont décrites par des voies de réaction (*cf.* Équation (3.1)). Une voie de réaction  $c = \{\alpha, l, s, J^\pi\}$  est formée de :

- $\alpha$ , la paire de particules constituant la voie considérée.  $\alpha$  inclut les masses ( $m$  et  $M$ ), les charges ( $z$  et  $Z$ ), les spins ( $i$  et  $I$ ) avec leurs parités ;
- $l$ , le moment orbital de la particule incidente ;
- $s$ , le spin de la voie considérée ;
- $J^\pi$ , le moment angulaire totale de la voie associé à sa parité.

	$\ell$	$s$	$J^\pi$	$g_J$	onde
$^{23}\text{Na} (3/2^+)$	0	1	1 <sup>+</sup>	3/8	s
		2	2 <sup>+</sup>	5/8	
	1	1	0 <sup>-</sup> 1 <sup>-</sup> 2 <sup>-</sup>	1/8 3/8 5/8	p
		2	1 <sup>-</sup> 2 <sup>-</sup> 3 <sup>-</sup>	3/8 5/8 7/8	
	2	1	1 <sup>+</sup> 2 <sup>+</sup> 3 <sup>+</sup>	3/8 5/8 7/8	d
		2	0 <sup>+</sup> 1 <sup>+</sup> 2 <sup>+</sup> 3 <sup>+</sup> 4 <sup>+</sup>	1/8 3/8 5/8 7/8 9/8	

TABLE 3.2: Configuration de spins du  $^{23}\text{Na}$  pour des résonances d'onde  $s$ ,  $p$  et  $d$

Une interaction ne peut se produire seulement si la valeur  $J'^{\pi'}$  de la voie de sortie  $c' = \{\alpha', l', s', J'^{\pi'}\}$  est égale à la valeur  $J^\pi$  de la voie d'entrée  $c$  par conservation du moment angulaire total et de la parité. À chaque voie est associé un rayon  $a_c$  (*channel radius*). Comme illustré en Figure 3.2, les mécanismes du noyau composé ont lieu à l'intérieur de la région délimitée par ce rayon. Au-delà de cette région interne (c'est-à-dire la région externe), on suppose que les forces nucléaires (potentiel d'interaction) sont nulles (seule réside la force Coulombienne dans la région externe pour les particules chargées). On utilise dans la convention ENDF-6 [37] une formule empirique pour la valeur de  $a_c$  (en fm) :

$$a_c = 1.23A^{\frac{1}{3}} + 0.8$$
(3.11)

Dans le noyau composé, la fonction d'onde interne est inconnue. En revanche, on peut traiter les interactions nucléaires dans la région interne grâce à la matrice de collision  $\mathbf{U}$ , qui décrit les transitions entre les fonctions d'ondes entrantes  $c$  et sortantes  $c'$  ( $|U_{cc'}|^2$  est la probabilité de transition de la voie  $c$  vers la voie  $c'$ ). Suivant le domaine énergétique étudié (domaine des résonances résolues, continuum), les éléments de cette matrice de collision  $U$  sont calculés différemment. Par exemple, dans le domaine résolu,  $\mathbf{U}$  dépend des termes de la matrice- $R$  tandis que dans le continuum,  $\mathbf{U}$  est déterminée par résolution de l'équation de Schrödinger.

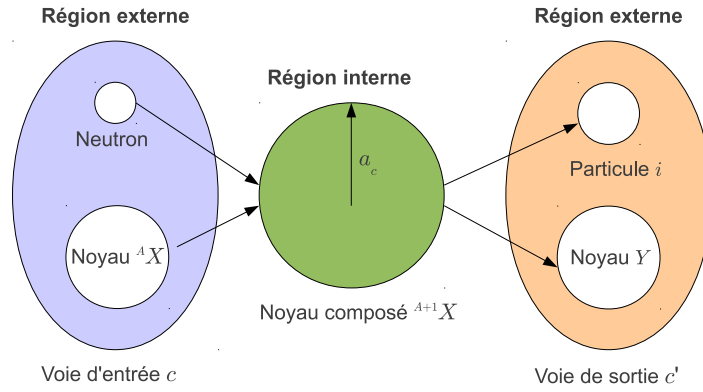


FIGURE 3.2. Description de l'interaction entre un neutron et un noyau  $^AX$ , délimitée par des régions interne et externe

### 3.2.1 Sections Efficaces

On accède à la section efficace partielle (intégrée en angle)  $\sigma_{cc'}$  d'une voie d'entrée  $c$  vers une voie de sortie  $c'$  pour un moment angulaire totale  $J$  que est calculée à partir des éléments de la matrice de collision ( $U_{cc'}$ ) selon la formule :

$$\sigma_{cc'} = \frac{\pi}{k^2} \cdot g_J \cdot |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \quad (3.12)$$

avec :

$$U_{cc'} = U_{\alpha l s, \alpha' l' s'}^J \quad \text{et} \quad \delta_{cc'} = \delta_{\alpha \alpha'} \cdot \delta_{l l'} \cdot \delta_{s s'} \quad (3.13)$$

où  $\delta_{cc'}$  se produit lorsque les particules incidentes et sortantes ne sont pas discernables (si  $c = c'$ ).  $k$  est le nombre d'onde associé à la voie d'entrée, calculé pour l'énergie cinétique  $E_{lab}$  de la particule incidente dans le laboratoire :

$$k = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{M}{m + M} \cdot \sqrt{2mE_{lab}} \quad (3.14)$$



Toutes les sections efficaces sont calculées en sommant les sections partielles de l'Équation (3.12). Ainsi, la section efficace totale est donnée par :

$$\begin{aligned}\sigma^{totale} &= \sum_c^{\forall \text{ voies d'entrée}} \sum_{c'}^{\forall \text{ voies de sortie}} \sum_J \left( \frac{\pi}{k^2} \cdot g_J \cdot |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \right) \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_c^{\forall \text{ voies d'entrée}} (1 - \text{Re}(U_{cc}))\end{aligned}\quad (3.15)$$

La section efficace élastique s'écrit (les voies d'entrée et de sortie sont les mêmes) :

$$\sigma_{nn} = \frac{\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_c^{\forall \text{ voies d'entrée}} \sum_{c'}^{\forall \text{ voies d'entrée}} |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \quad (3.16)$$

Enfin, la section efficace pour un réaction donnée (capture radiative, ...) peut se formuler :

$$\sigma_n^{reaction} = \frac{\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_c^{\forall \text{ voies d'entrée}} \sum_{c'}^{\forall \text{ voies } \in \text{ réaction}} |U_{cc'}|^2 \quad (3.17)$$

### 3.2.2 Sections Efficaces Différentielles : le Formalisme de Blatt-Biedenharn

Les sections efficaces différentielles (élastiques, inélastiques ou autres réactions) peuvent être traitées de manière analogue aux sections efficaces intégrées. En suivant la théorie de Blatt et Biedenharn [38], on obtient les distributions angulaires, sans interaction Coulombienne, dans le système du centre de masse :

$$\frac{d\sigma_{\alpha\alpha'}}{d\Omega_{CM}} = \sum_L B_{L,\alpha,\alpha'}(E) \cdot P_L(\cos\theta_{\alpha'}) \quad (3.18)$$

où l'indice  $\alpha\alpha'$  correspond au type de section considéré (*i.e.*  $\alpha$  désigne la paire de particules en entrée et  $\alpha'$  la paire en sortie),  $P_L$  est le polynôme de Legendre d'ordre  $L$  et  $\theta_{\alpha'}$  est l'angle de la particule sortante relatif à la particule entrante dans le centre de masse. Les coefficients  $B_{L,\alpha,\alpha'}(E)$  se calculent suivant :

$$\begin{aligned}B_{L,\alpha,\alpha'}(E) &= \frac{1}{4k_\alpha^2} \sum_{J_1} \sum_{J_2} \sum_{c_1=(\alpha l_1 s_1 J_1)} \sum_{c'_1=(\alpha' l'_1 s'_1 J_1)} \sum_{c_2=(\alpha l_2 s_2 J_2)} \sum_{c'_2=(\alpha' l'_2 s'_2 J_2)} \\ &\quad \times (-1)^{(s_1-s'_1)} \bar{Z}(l_1, J_1, l_2, J_2, s_1, L) \cdot \bar{Z}(l'_1, J_1, l'_2, J_2, s'_1, L) \\ &\quad \times \delta_{s_1 s_2} \delta_{s'_1 s'_2} \frac{1}{(1+i_\alpha) \cdot (1+I_\alpha)} \text{Re} \left[ \left( \delta_{c_1 c'_1} - U_{c_1 c'_1} \right) \cdot \left( \delta_{c_2 c'_2} - U_{c_2 c'_2}^* \right) \right]\end{aligned}\quad (3.19)$$

Dans cette formule, chaque somme peut être interprétée suivant :

- $J_1$  : une somme sur les groupes de spin contenant  $J_1$  (et sa parité associée)  
 $J_2$  : une somme sur les groupes de spin contenant  $J_2$  (et sa parité associée)  
 $c_1$  : une somme sur les voies d'entrée  $c_1$  appartenant au groupe de spin  $J_1$  et contenant la paire de particules  $\alpha$ , telles que  $c_1 = (\alpha, l_1, s_1, J_1)$   
 $c'_1$  : une somme sur les voies de sorties  $c'_1$  appartenant au groupe de spin  $J_1$  et contenant la paire de particules  $\alpha'$ , telles que  $c'_1 = (\alpha', l'_1, s'_1, J_1)$   
 $c_2$  : une somme sur les voies d'entrée  $c_2$  appartenant au groupe de spin  $J_2$  et contenant la paire de particules  $\alpha$ , telles que  $c_2 = (\alpha, l_2, s_2, J_2)$   
 $c'_2$  : une somme sur les voies de sorties  $c'_2$  appartenant au groupe de spin  $J_2$  et contenant la paire de particules  $\alpha'$ , telles que  $c'_2 = (\alpha', l'_2, s'_2, J_2)$

L'Équation (3.19) contient le terme  $\bar{Z}$  qui se décompose suivant :

$$\begin{aligned} \bar{Z}(l_1, J_1, l_2, J_2, s, L) &= \sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)} \\ &\times (l_1 l_2 00, L0) W(l_1 J_1 l_2 J_2, sL) \end{aligned} \quad (3.20)$$

avec  $(l_1 l_2 00, L0)$  le coefficient de Clebsch-Gordan où  $L$  respecte la combinaison vectorielle de  $l_1$  et  $l_2$ .  $W(l_1 J_1 l_2 J_2, sL)$  est le coefficient de Racah [39]. Ces coefficients s'annulent quand les relations vectorielles triangulaires de la mécanique quantique ne sont pas respectées :

$$\vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{L} = \vec{l}'_1 + \vec{l}'_2 \quad (3.21)$$

$$\vec{l}_i + \vec{s} = \vec{J}_i = \vec{l}'_i + \vec{s}' \quad (i = 1, 2) \quad (3.22)$$

À la différence des sections efficaces intégrées en angle (paragraphe précédent), des phénomènes d'interférence entre des ondes de type différent (onde  $s$  et  $p$  par exemple) peuvent se produire avec les distributions angulaires.

### 3.3 Domaine des Résonances Résolues (RRR)

#### 3.3.1 Formalisme de la Matrice- $R$

Le Domaine des Résonances Résolues (RRR) est décrit par la théorie de la matrice- $R$  (elle est plus longuement détaillée dans les Références [34, 40]), introduite par Wigner et Eisenbud[41] en 1947. Ce formalisme permet d'obtenir les éléments de la matrice de collision  $U$ , qui vont eux-même dépendre des éléments de la matrice- $R$ .

On rappelle que le potentiel nucléaire est supposé être nul dans la région externe (*cf.* Figure 3.2) ce qui permet de déterminer les interactions non polarisées (par l'intermédiaire

de deux matrices diagonales  $\mathbf{L}$  et  $\mathbf{\Omega}$  qui interviendront plus loin) qui agissent entre les deux corps indépendants.

Dans la région interne, le potentiel d'interaction nucléaire est trop complexe pour pouvoir résoudre l'équation de Schrödinger (système à  $N$  nucléons en interaction). Cependant, en imposant une série de conditions aux limites  $B_c$  afin d'assurer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée à la surface  $r = a_c$ , il est possible de décrire la fonction d'onde interne comme une combinaison linéaire de ses états-propres. La dépendance en énergie des éléments de la matrice- $R$  s'écrit alors :

$$R_{cc'}(E) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E} \quad (3.23)$$

avec  $\lambda$  un indice représentant un des états dans la région interne ;  $E_{\lambda}$  les valeurs propres, pour l'énergie, des états  $\lambda$  ;  $\gamma_{\lambda c} - \gamma_{\lambda c'}$  les amplitudes de largeur réduite des voies  $c$  et  $c'$  pour les états  $\lambda$  ;  $E$  l'énergie de la particule incidente. À noter que  $\gamma_{\lambda c}$ ,  $\gamma_{\lambda c'}$  et  $E_{\lambda}$  sont indépendants de  $E$  mais dépendent de  $a_c$  et  $B_c$ . De plus, les amplitudes  $\gamma$  sont proportionnelles à la racine carrée des largeurs partielles des résonances.

Plusieurs hypothèses sont faites pour appliquer cette théorie :

- on suppose que la mécanique quantique non-relativiste suffit à décrire le système.
- on ne traite que les processus binaires (les voies à plus de deux particules ne sont pas prises en considération).
- il n'y a pas de création ou destruction de particules, les photons sont donc exclus du traitement.
- au-delà de  $a_c$ , on peut décrire les interactions par un potentiel, qui est fonction uniquement de la distance radiale.

Dans le cadre de la théorie de la matrice- $R$  et suite à des opérations mathématiques non-triviales, la matrice de collision  $\mathbf{U}$  s'écrit :

$$U_{cc'} = \Omega_c P_c^{1/2} \left\{ [\mathbf{1} - \mathbf{R}(\mathbf{L} - \mathbf{B})]^{-1} [\mathbf{1} - \mathbf{R}(\mathbf{L}^* - \mathbf{B})] \right\}_{cc'} P_{c'}^{1/2} \Omega_{c'} \quad (3.24)$$

$$= e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left\{ \delta_{cc'} + 2i P_c^{1/2} [(\mathbf{1} - \mathbf{R}\mathbf{L}^{\circ})^{-1} \mathbf{R}]_{cc'} P_{c'}^{1/2} \right\} \quad (3.25)$$

où :

$$L_{cc'}^{\circ} \equiv L_{cc'} - B_{cc'} = (L_c - B_c) \delta_{cc'} \equiv (S_c + iP_c - B_c) \delta_{cc'} \quad (3.26)$$

On trouve dans les Équations (3.24), (3.23) et (3.26) :

- $R_{cc'}$  est un des éléments de la matrice- $R$ .
- $\Omega_c = \left( \frac{I_c}{O_c} \right)_{r=a_c}$  est la projection du rapport entre l'onde incidente  $I_c$  et l'onde sortante  $O_c$  à la surface ( $r = a_c$ ) de la voie  $c$ . Dans le cas de particules neutres,  $\Omega_c = e^{-i\varphi_c}$  où

- $\varphi_c$  représentent le décalage de phase de diffusion de la sphère dure.
- $S_c$  est appelé facteur de décalage de la barrière de potentiel.
  - $P_c$  est le facteur de pénétrabilité de la barrière de potentiel.
  - $B_c$  est une condition aux limites à la surface du noyau composé ( $r = a_c$ ).

Pour des particules incidentes comme les neutrons (la voie d'entrée  $c = n$ ),  $\varphi_l$ ,  $S_l$  et  $P_l$  selon le type d'onde  $l$  sont définis dans la Table 3.3 ci-dessous.

$l$	$P_l$	$S_l$	$\varphi_l$
0	$\rho$	0	$\rho$
1	$\frac{\rho^3}{1 + \rho^2}$	$\frac{-1}{1 + \rho^2}$	$\rho - \arctan \rho$
2	$\frac{\rho^5}{9 + 3\rho^2 + \rho^4}$	$\frac{-(18 + 3\rho^2)}{9 + 3\rho^2 + \rho^4}$	$\rho - \arctan \left( \frac{3\rho}{3 - \rho^2} \right)$
$l$	$\frac{\rho^2 \cdot P_{l-1}}{(l - S_{l-1})^2 + P_{l-1}^2}$	$\frac{\rho^2 \cdot (l - S_{l-1})}{(l - S_{l-1})^2 + P_{l-1}^2} - l$	$\varphi_{l-1} - \arctan \left( \frac{P_{l-1}}{l - S_{l-1}} \right)$

TABLE 3.3. Le facteur de pénétrabilité  $P_l$ , le facteur de décalage  $S_l$  et le décalage de phase  $\varphi_l$  en fonction de  $\rho = k \cdot a_c$  ( $k$  nombre d'onde et  $a_c$  rayon de voie) sans interaction Coulombienne. Il est coutume d'utiliser pour  $\varphi_l$  un terme  $\rho' = k \cdot R'$  où  $R'$  correspond au rayon potentiel effectif de la voie

On relie les largeurs partielles des résonances à leurs amplitudes de largeur réduite par la relation suivante :

$$\Gamma_{\lambda c} = 2\gamma_{\lambda c}^2 P_c \quad (3.27)$$

### 3.3.2 La Matrice de Niveaux A

Lorsque des éléments lourds sont traités avec la matrice- $R$ , on remarque que la taille de cette dernière devient très importante du fait des nombreuses voies  $\gamma$  de désexcitation possibles. Pour contourner ce problème, Wigner [42] a introduit une matrice de rang inférieur,

appelée matrice de niveaux  $\mathbf{A}$  telle que :

$$\left[ (\mathbf{1} - \mathbf{R}\mathbf{L}^\circ)^{-1} \mathbf{R} \right]_{cc'} = \sum_{\lambda, \mu} \gamma_{\lambda c} A_{\lambda \mu} \gamma_{\mu c'} \quad (3.28)$$

où :

$$\left( \mathbf{A}^{-1} \right)_{\lambda \mu} = (E_\lambda - E) \delta_{\lambda \mu} - \sum_c \gamma_{\lambda c} L_c^\circ \gamma_{\mu c} \quad (3.30)$$

$\gamma_{\lambda c}$  est l'amplitude de la largeur réduite associée à  $\Gamma_{\lambda c}$ , la largeur physique partielle (vue dans l'Équation (3.5) notamment), par la relation :

$$\Gamma_{\lambda c} = 2 P_c \cdot \gamma_{\lambda c}^2 \quad (3.31)$$

En utilisant la relation entre la matrice- $R$  et la matrice de niveaux  $\mathbf{A}$  de l'Équation (3.28), on peut ré-exprimer les éléments de la matrice de collision  $\mathbf{U}$  selon :

$$U_{cc'} = e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left( \delta_{cc'} + i \sum_{\lambda, \mu} \sqrt{\Gamma_{\lambda c}} A_{\lambda \mu} \sqrt{\Gamma_{\mu c'}} \right) \quad (3.32)$$

où le facteur  $\sqrt{\Gamma_{\lambda c}} \cdot \sqrt{\Gamma_{\mu c'}}$  détermine la contribution des éléments non-diagonaux de la matrice  $\mathbf{A}^{-1}$  et correspond aux interférences entre les niveaux des différentes voies de sortie. La manière de traiter ces interférences va aboutir à différentes approximations qui sont traitées dans les sections suivantes.

### 3.3.3 Les Approximations de la Matrice- $R$

#### 3.3.3.1 L'Approximation Single-Level Breit-Wigner (SLBW)

Dans cette approximation développée par Breit et Wigner [43], la matrice  $\mathbf{A}$  est réduite à un seul élément. On ne traite donc qu'un seul niveau et tous les autres sont négligés. Malgré ces hypothèses fortes, cela reste une bonne représentation pour des résonances isolées (les largeurs physiques de même spin sont plus grandes que l'espacement moyen entre les résonances). Les évaluations actuelles tendent à ne plus utiliser ce formalisme considéré aujourd'hui comme obsolète.

La matrice  $\mathbf{A}^{-1}$  (ou scalaire) s'écrit :

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{A}^{-1} \right)_{\lambda \mu} &= A^{-1} = (E_\lambda - E) - \sum_c \gamma_{\lambda c}^2 L_c^\circ \\ &= (E_\lambda - E) + \Delta_\lambda - i \frac{\Gamma_\lambda}{2} \end{aligned} \quad (3.33)$$

avec  $\Delta_\lambda$  le décalage de niveaux :

$$\Delta_\lambda = \sum_c (S_c - B_c) \gamma_c^2$$

En substituant l'expression de cette matrice dans l'Équation (3.32), on obtient la matrice de collision :

$$U_{cc'} = e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left\{ \delta_{cc'} + i \frac{\sqrt{\Gamma_{\lambda c} \cdot \Gamma_{\lambda c'}}}{(E_\lambda - E) + \Delta_\lambda - i \frac{\Gamma_\lambda}{2}} \right\} \quad (3.34)$$

Par ailleurs, si l'on prend  $B_c$  judicieusement pour que  $\Delta_\lambda$  soit nul, on peut simplifier l'expression de  $\mathbf{U}$  par :

$$U_{cc'} = e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left\{ \delta_{cc'} + i \frac{\sqrt{\Gamma_{\lambda c} \cdot \Gamma_{\lambda c'}}}{(E_\lambda - E) - i \frac{\Gamma_\lambda}{2}} \right\} \quad (3.35)$$

De l'Équation (3.35), on peut obtenir une expression simple de la section totale, dans laquelle le rôle des largeurs partielles est clarifié :

$$\sigma^{totale} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_{c=n}^{\forall \text{ voies d'entrée}} \left\{ \sin(\varphi_n)^2 + \frac{\Gamma_\lambda \Gamma_{\lambda n} \cos(2\varphi_n) + 2(E - E_\lambda) \Gamma_{\lambda n} \sin(2\varphi_n)}{4 \cdot (E - E_\lambda)^2 + \Gamma_\lambda^2} \right\} \quad (3.36)$$

Dans cette dernière équation, le terme  $\sigma_p = \frac{4\pi}{k^2} g_J \sin(\varphi_n)^2$  correspond à la diffusion potentielle élastique (diffusion de la sphère dure), diffusion provoquée sans formation d'un noyau composé. Le terme en  $\sin(2\varphi_n)$ , asymétrique, contient l'interférence entre la diffusion potentielle et la diffusion résonance par formation du noyau composé. Enfin, le terme lié au facteur en  $\cos(2\varphi_n)$ , symétrique, représente la diffusion résonante.

### 3.3.3.2 L'Approximation Multi-Level Breit-Wigner (MLBW)

Les évaluations actuelles du sodium sont traitées avec ce formalisme dans le domaine des résonances résolues. Dans le formalisme Multi Level Breit & Wigner (MLBW) dans la convention ENDF-6 [37], tous les éléments non diagonaux de la matrice inverse de niveaux  $\mathbf{A}^{-1}$  sont négligés. En d'autres termes, cela revient à négliger les termes d'interférences entre les voies mais pas entre les niveaux.

La matrice de niveaux  $\mathbf{A}$  s'écrit ici :

$$\left( \mathbf{A}^{-1} \right)_{\lambda\mu} = \left( E_\lambda - E + \Delta_\lambda - i \frac{\Gamma_\lambda}{2} \right) \delta_{\lambda\mu} \quad (3.37)$$

On obtient alors la matrice de collision  $\mathbf{U}$  telle que :

$$U_{cc'} = e^{-i(\varphi_c + \varphi_{c'})} \left\{ \delta_{cc'} + i \sum_{\lambda} \left[ \frac{\sqrt{\Gamma_{\lambda c} \cdot \Gamma_{\lambda c'}}}{(E_{\lambda} - E) - i \frac{\Gamma_{\lambda}}{2}} \right] \right\} \quad (3.38)$$

Contrairement au formalisme SLBW, la matrice de collision n'est pas unitaire, ce qui peut conduire dans certains cas à des sections efficaces non-physiques (sections négatives).

### 3.3.4 L'Approximation de Reich-Moore (RM)

Reich et Moore (RM) [44] ont développé à l'origine cette approximation dans le but de traiter les interférences des voies de fission pour les noyaux lourds (*i.e.* les actinides en particulier). Dans ce formalisme, on suppose que les interférences entre les voies  $\gamma$  sont négligeables. En effet, les contributions des voies  $\gamma$  à la somme  $\sum_{c \in \gamma} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu c} (\lambda \neq \mu)$  tendent à s'annuler car leurs largeurs de décroissance possèdent des amplitudes comparables et ont des signes aléatoires. Ainsi, les contributions non-diagonales pour ces voies sont nulles dans la matrice inverse de niveaux  $\mathbf{A}^{-1}$ . Ainsi, on somme les voies  $\gamma$  de manière à obtenir la largeur radiative totale (donnée dans l'Équation (3.7)). Et par conséquent, la matrice inverse de niveaux  $\mathbf{A}^{-1}$  se simplifie et devient :

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}^{-1})_{\lambda\mu} &= (E_{\lambda} - E) \delta_{\lambda\mu} - \sum_{c \in \text{voies } \gamma} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu c} (L_c - B_c) - \sum_{c \notin \text{voies } \gamma} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu c} (L_c - B_c) \\ &= (E_{\lambda} - E) \delta_{\lambda\mu} - \Gamma_{\lambda\gamma} (L_c - B_c) \delta_{\lambda\mu} - \sum_{c \notin \text{voies } \gamma} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu c} (L_c - B_c) \\ &= \left( E_{\lambda} - E + \Delta_{\lambda} - i \frac{\Gamma_{\lambda\gamma}}{2} \right) \delta_{\lambda\mu} - \sum_{c \notin \text{voies } \gamma} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu c} (L_c - B_c) \end{aligned} \quad (3.39)$$

De cette expression simplifiée, on peut en déduire une formulation beaucoup plus légère pour la matrice- $R$  (on exclut toutes les voies photons  $\gamma$ ) :

$$R_{cc'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E - i \frac{\Gamma_{\lambda\gamma}}{2}} \quad (c, c' \notin \gamma) \quad (3.40)$$

Le fait d'exclure les voies  $\gamma$  réduit considérablement le nombre de voies et donc, la taille de la matrice- $R$ . De ce fait, il devient très facile d'inverser  $\mathbf{1} - \mathbf{R}\mathbf{L}^{\circ}$ , nécessaire pour résoudre l'Équation (3.24) et pour calculer les sections efficaces. Parfois, quand il n'y a qu'une voie "neutron" de disponible, la matrice- $R$  devient un scalaire (une fonction) et la matrice de collision  $\mathbf{U}$  peut alors s'écrire :

$$U_{nn} = e^{-2i\varphi_n} \left( \frac{1 + iP_n R_{nn}}{1 - iP_n R_{nn}} \right) \quad (3.41)$$

Les voies  $\gamma$  n'existant plus dans ce formalisme, la section de capture radiative s'obtient par différence entre la section totale et les sections partielles (élastique, fission, inélastiques, protons, ...):

$$\sigma_\gamma(E) = \sigma^{totale}(E) - \sigma_{nn}(E) - \underbrace{\sigma_f(E) - \sigma_{nn'}(E) - \sigma_{np}(E)}_{\text{si existantes}} \quad (3.42)$$

La plupart des évaluations pour les noyaux lourds fissionnants utilise cette approximation. Par ailleurs, on trouve également dans les bibliothèques internationales des évaluations avec ce formalisme dans le cas de noyaux moyens voire légers.

### 3.3.5 Les Niveaux Externes

La théorie de la matrice- $R$  montre que les sections efficaces dans un domaine d'énergie donné dépendent non-seulement des niveaux "internes" de ce domaine mais également des niveaux "externes" à ce domaine. En effet, des problèmes apparaissent lors de l'analyse de résonances, parce qu'en-dessous du seuil de séparation des neutrons ( $E < 0$ ), les niveaux du noyaux composé ne sont pas observables et donc inconnus. Si l'on omet ces niveaux externes, il n'est pas possible d'obtenir un accord satisfaisant avec les mesures expérimentales, en particulier dans le domaine thermique. C'est pourquoi ces niveaux externes doivent être introduits d'une manière ou d'une autre dans le formalisme de la matrice- $R$ .

D'après la Référence [40], une approximation convenable consiste à prendre en compte l'effet de ces niveaux éloignés du domaine d'énergie étudié par la "queue" de résonances larges dont l'énergie est négative, aussi appelées résonances "négatives". Une paramétrisation correcte de ces résonances négatives permet généralement une bonne reproduction de la section efficace thermique ainsi que le comportement en  $1/v$  de la section de capture radiative.

De cette approximation, on peut modifier l'Équation (3.40) de la matrice- $R$  dans le formalisme Reich-Moore dans un intervalle d'énergie  $I$  donné selon :

$$R_{cc'} = R_c^\infty + \sum_{\mu \notin I} \left( \frac{\gamma_{\mu c} \gamma_{\mu c'}}{E_\mu - E - i \frac{\Gamma_{\mu\gamma}}{2}} \right) + \sum_{\lambda \in I} \left( \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E - i \frac{\Gamma_{\lambda\gamma}}{2}} \right) \quad (3.43)$$

Le premier terme  $R_c^\infty$  dans l'Équation (3.43) est appelé paramètre des niveaux éloignés (*distant level parameter*). Dans le domaine de l'analyse des résonances neutroniques, on utilise plutôt le rayon nucléaire effectif  $R'_c$  (introduit dans la Table 3.3 pour  $\varphi_n$ ) tel que :

$$R'_c = a_c (1 - R_c^\infty) \quad (\text{pour des neutrons d'onde-s}) \quad (3.44)$$



Le rayon effectif est quelquefois plus accessible que le paramètre  $R_c^\infty$  car, pour des neutrons de faible énergie, il est relié directement à la section efficace de diffusion potentielle élastique par la relation :

$$\lim_{k_c \rightarrow 0} \sigma_c^{pot} \rightarrow 4\pi a_c^2 (1 - R_c^\infty) \quad (3.45)$$

### 3.3.6 Les Paramètres Utilisés dans le RRR

Dans les paragraphes précédents, on a pu observer qu'un certain nombre de paramètres étaient nécessaires afin de calculer des sections efficaces dans le RRR. Lors d'une analyse de résonances, les paramètres qui seront ajustés sur les données expérimentales sont appelés paramètres de résonance. Une résonance est tout d'abord affiliée à un moment orbital  $l$  et à un moment angulaire total  $J^\pi$ . Les paramètres ajustables associés à cette résonance sont donc :

- une énergie de résonance  $E_\lambda$  ;
- une amplitude neutronique  $\gamma_n$  (liée à la largeur neutronique  $\Gamma_n$ ) ;
- une amplitude de capture radiative totale  $\gamma_\gamma$  (liée à  $\Gamma_\gamma$ ) ;
- une (des) amplitude(s) de fission  $\gamma_{f,i=1:n}$ , quand cela est possible ;
- d'autres amplitudes pour une réaction donnée, quand c'est énergétiquement possible.

En théorie, les moments  $l$  et  $J^\pi$  sont également ajustables mais cela n'est pas fait dans la pratique parce que cela requiert des ajustements utilisant des probabilités de distributions discrètes qui va à l'encontre de l'ajustement des amplitudes partielles des résonances où les probabilités de distribution sont continues.

## 3.4 Domaine du Continuum

Le domaine du continuum débute usuellement lorsque les résonances ne peuvent plus être séparées expérimentalement (on observe alors des sections efficaces lisses). Généralement, le continuum commence à des énergies de l'ordre du MeV pour les noyaux légers et vers le keV pour les noyaux les plus lourds.

Sur la Figure 3.3, on peut voir les différents mécanismes mis en jeu lors d'une interaction nucléaire à haute énergie dont la contribution de chacun peut varier considérablement suivant l'énergie de la particule incidente. Ainsi, les réactions dites "directes" (autres que potentielle élastique et la capture directe) n'opèrent que si l'énergie est supérieure aux seuils inélastiques. Par la suite, lorsque débute le continuum inélastique, les réactions calculées par Pré-Équilibre commencent à opérer.

En règle générale, la part du noyau composé diminue de plus en plus quand l'énergie de la particule incidente augmente. On observe également sur cette figure que toutes les réactions sont issues de deux contributions (diffusion potentielle et réaction) dont la somme constitue la section efficace totale. Pour calculer ces premières contributions, on emploie systématiquement le modèle optique décrit ci-après.

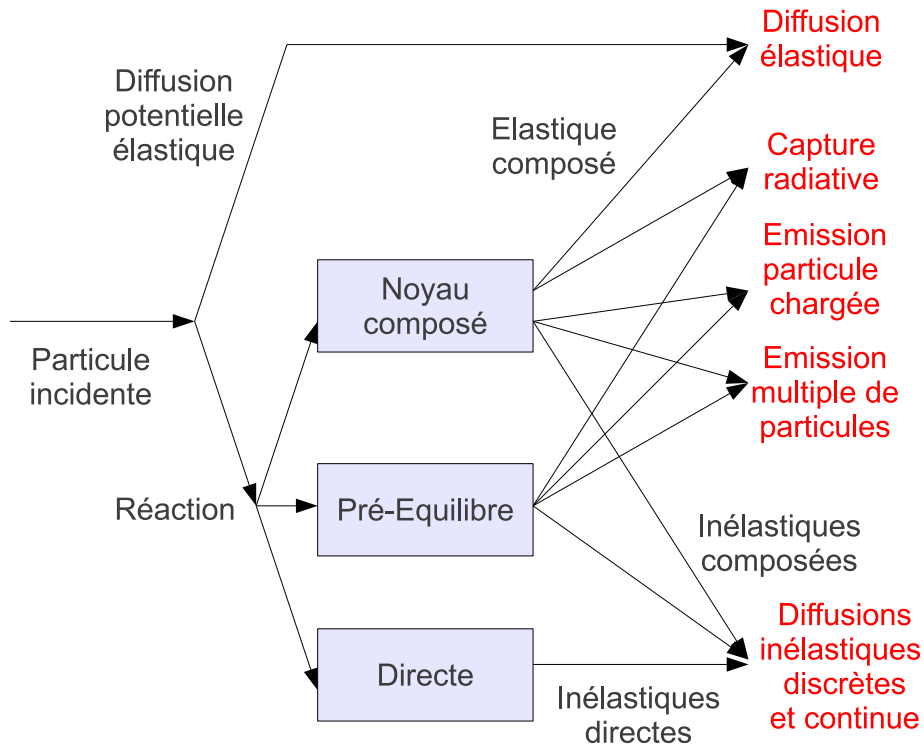


FIGURE 3.3: Schéma décrivant les différents mécanismes de réactions nucléaires

### 3.4.1 Le Modèle Optique

L'idée du modèle optique est qu'il est possible de représenter l'interaction entre une particule incidente et un noyau par un champ de potentiel complexe  $V$ , par analogie avec la diffraction et l'absorption de la lumière dans une sphère de verre opaque.

Ce potentiel  $V$  intervient dans l'équation de Schrödinger dans le système du centre de masse (CM) des deux particules :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - V(\vec{r}) - E \right] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.46)$$

$$\text{où : } \begin{cases} \mu = \frac{m \cdot M}{m+M} & : \text{masse réduite du système} \\ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 & : \text{coordonnées du système dans le CM} \\ E = \frac{E_{\text{lab}} \cdot M}{m+M} & : \text{énergie cinétique totale du système} \\ m, \vec{r}_1 & : \text{masse, coordonnées de la particule incidente dans le laboratoire} \\ M, \vec{r}_2 & : \text{masse, coordonnées du noyau cible dans le laboratoire} \end{cases}$$

La résolution numérique de l'Équation (3.46) permet d'obtenir de précieuses informations. En particulier, elle retourne une prédiction de plusieurs observables, principalement les distributions angulaires pour la diffusion élastique potentielle, les sections efficaces totale, de diffusion potentielle élastique et de réaction (cette section de réaction contient notamment les sections du noyau composé), les fonctions forces (*strength functions*) utilisées dans l'URR et également le rayon effectif de diffusion potentiel  $R'$ .

De plus, le modèle optique permet de calculer des coefficients de transmission qui sont utilisés par la suite pour les voies de réaction du noyau composé et des modèles statistiques employées pour calculer toutes les sections partielles comme  $(n, n')$ ,  $(n, \gamma)$ ...

Il existe plusieurs types de potentiel pour le modèle optique :

- le modèle optique (avec potentiel) sphérique, où l'on suppose que le noyau n'est pas déformé.
- le modèle optique, à voies couplées, rotationnel symétrique (*Coupled Channels Symmetric Rotational Model*) : le rayon utilisé dans le potentiel  $V(\vec{r})$  s'écrit :

$$R \propto r \left[ 1 + \sum_{\lambda=2,4,\dots} \beta_{\lambda} Y_{\lambda}^0(\Omega) \right]$$

où les termes  $\beta_{\lambda}$  sont les paramètres de déformation statiques à la multipolarité  $\lambda$  et  $Y$  les harmoniques sphériques.

- le modèle optique couplé vibrationnel (*CC Harmonic Vibrational Model*) : un noyau vibrationnel possède un état fondamental sphérique symétrique mais ses états excités

sont soumis à des oscillations de forme. Le rayon dans le potentiel  $V(\vec{r})$  est décrit alors comme :

$$R \propto r \left[ 1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega) \right]$$

où les opérateurs  $\alpha_{\lambda\mu}$  sont reliés aux forces de couplage  $\beta_{\lambda}$  et décrivent les amplitudes vibrationnelles de multipolarité  $\lambda$ .

- le modèle optique DWBA (*Distorted Wave Born Approximation*), qui est considéré aujourd'hui comme une approximation au premier ordre des modèles vibrationnels.
- ...

Les modèles optiques couplés (utilisant des potentiels rotationnel et vibrationnel) [45] sont utilisés pour traiter les noyaux lourds comme les actinides. Ils permettent non seulement de calculer la section totale et les processus directs élastiques (comme c'est le cas avec le modèle optique sphérique) mais également les processus directs inélastiques puisque certains niveaux inélastiques sont couplés avec l'état fondamental. Pour les noyaux sphériques ou faiblement déformés, on utilise alors le modèle DWBA [46] uniquement pour calculer les contributions inélastiques directes.

Le Sodium 23 est en théorie un noyau déformé mais nous verrons dans la suite de ce document qu'un modèle sphérique est suffisant pour reproduire les données expérimentales (on utilisera donc le modèle DWBA pour les processus inélastiques directes). Ainsi, seul le modèle optique sphérique (les données théoriques sont tirées de la référence [47]) sera plus longuement détaillé par la suite.

### 3.4.2 Le Modèle Optique Sphérique

#### 3.4.2.1 Généralités

On décompose la fonction d'onde  $\Psi(\vec{r})$  de l'Équation (3.46) en ondes partielles :

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{\ell} \frac{u_{\ell}(r)}{r} \cdot P_{\ell}(\cos \theta)$$

De cette manière, l'équation d'onde pour la partie radiale devient donc :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \mathcal{U}(r, E) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\ell}(r) = 0 \quad (3.47)$$

où  $k$  est le nombre d'onde tel que  $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$  et  $\mathcal{U}(r, E)$  est le potentiel dans la région interne du noyau. Dans la région externe où l'on considère que  $\mathcal{U}(r, E) = 0$ , les solutions

indépendantes de l'Équation (3.47) sont les fonctions d'onde régulières et irrégulières de Coulomb notées respectivement  $F_\ell$  et  $G_\ell$ .

On utilise habituellement un potentiel optique phénoménologique décomposé comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(r, E) = & -\mathcal{V}_v(r, E) - i\mathcal{W}_v(r, E) \\ & -\mathcal{V}_s(r, E) - i\mathcal{W}_s(r, E) \\ & + \mathcal{V}_{so}(r, E) \cdot \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} + i\mathcal{W}_{so}(r, E) \cdot \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} \\ & + \mathcal{V}_C(r, E) \end{aligned} \quad (3.48)$$

où  $\mathcal{V}_v$  et  $\mathcal{W}_v$  sont les composantes réelle et imaginaire du potentiel volumique,  $\mathcal{V}_s$  (généralement nul) et  $\mathcal{W}_s$  les composantes réelle et imaginaire du potentiel surfacique,  $\mathcal{V}_{so}$  et  $\mathcal{W}_{so}$  les composantes du potentiel spin-orbite. Enfin,  $\mathcal{V}_C$  est le potentiel Coulombien (non-nul dans le cas de particules chargées uniquement). Chaque terme est séparé en une profondeur de puits de potentiel qui dépend de l'énergie  $E$  et un facteur de forme géométrique radial (généralement indépendant de l'énergie) :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_v(r, E) &= V_v(E) f(r, R_v, a_v) \\ \mathcal{W}_v(r, E) &= W_v(E) f(r, R_v, a_v) \\ \mathcal{V}_s(r, E) &= V_s(E) \left[ -4a_s \frac{d}{dr} f(r, R_s, a_s) \right] \\ \mathcal{W}_s(r, E) &= W_s(E) \left[ -4a_s \frac{d}{dr} f(r, R_s, a_s) \right] \\ \mathcal{V}_{so}(r, E) &= V_s(E) C_{so} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_s, a_s) \right] \\ \mathcal{W}_{so}(r, E) &= W_s(E) C_{so} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_s, a_s) \right] \end{aligned} \quad (3.49)$$

$C_{so} = \left( \frac{\hbar}{m_\pi c} \right)$  est la constante de couplage spin-orbite ( $m_\pi \simeq 138$  MeV, masse moyenne des mésons). Par ailleurs, pour des neutrons,  $\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} = [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)]$  (avec  $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ ). Le facteur géométrique  $f(r, R_i, a_i)$  a une forme en Wood-Saxon :

$$f(r, R_i, a_i) = \frac{1}{1 + \exp \left[ \frac{(r-R_i)}{a_i} \right]} \quad (3.50)$$

où  $R_i = r_i \cdot A^{1/3}$  est le rayon géométrique ( $r_i$  le rayon réduit en fm et  $A$  la masse atomique du noyau) et  $a_i$  est la diffusivité (exprimée en fm).

Ainsi, on voit que toute la difficulté réside dans la bonne paramétrisation des puits de potentiel (qui varie suivant l'énergie  $E$ ), des rayons réduits  $r_i$  et des diffusivités  $a_i$  afin de

former un potentiel complexe  $\mathcal{U}(r, E)$  qui permet de calculer des observables comme les sections efficaces. Ces ingrédients à la base du modèle optique seront appelés par la suite *Optical Model Parameters* (OMP). Aujourd'hui, on trouve des paramétrisations globales de potentiel du modèle optique telles que celle de Koning-Delaroche [48]. Pour notre cas, nous avons préféré utiliser celle de Morillon-Romain [49], dont les termes du potentiel sont liés par des relations de dispersion.

### 3.4.2.2 Paramétrisation du Potentiel

Les relations de dispersion pour les potentiels nucléaires résultent naturellement par application du principe de causalité, où l'onde réfléchie ne peut pas être émise avant l'arrivée de l'onde incidente. Elles résultent d'une connexion entre les parties réelle  $\mathcal{V}$  et imaginaire  $\mathcal{W}$  du potentiel optique données par :

$$\begin{aligned}\mathcal{V}(r, E) &= \mathcal{V}_{HF}(r, E) + \Delta\mathcal{V}(r, E), \\ \Delta\mathcal{V}(r, E) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{W}(r, E')}{E' - E} dE'\end{aligned}\quad (3.51)$$

où  $\Delta\mathcal{V}(r, E)$  est appelé terme de correction dispersif,  $\mathcal{P}$  est la valeur principale de Cauchy et  $\mathcal{V}_{HF}(r, E)$  est la contribution au champ moyen de Hartree-Fock. Des résolutions analytique et numérique de l'Équation (3.51) sont plus longuement détaillées dans les références [50, 51].

Dans cette paramétrisation [49], on utilise les mêmes rayons réduits  $r_v = r_s = r_{so} = r$  et les mêmes diffusivités  $a_v = a_s = a_{so} = a$ .

Pour le potentiel imaginaire volumique  $W_v(E)$ , ils prennent :

$$W_v(E) = \frac{w_{v1}(E - E_F)^2}{(E - E_F)^2 + w_{v2}^2}\quad (3.52)$$

avec  $E_F$  est l'énergie de Fermi telle que  $E_F = \frac{[S_n(Z, N) + S_n(Z, N+1)]}{2}$ , où  $S_n(Z, N)$ , l'énergie de séparation du neutron pour un noyau avec  $Z$  protons et  $N$  neutrons.

Le potentiel imaginaire surfacique  $W_s(E)$  s'écrit :

$$W_s(E) = \frac{w_{s1}(E - E_F)^2}{(E - E_F)^2 + w_{s2}^2} \exp[-w_{s3}(E - E_F)]\quad (3.53)$$

Enfin, le potentiel imaginaire de la contribution spin-orbite  $W_{so}(E)$  est donné :

$$W_{so}(E) = \frac{w_{so1}(E - E_F)^2}{(E - E_F)^2 + w_{so2}^2}\quad (3.54)$$

$w_{v1}$ ,  $w_{v2}$ ,  $w_{s1}$ ,  $w_{s2}$ ,  $w_{s3}$ ,  $w_{so1}$  et  $w_{so2}$  sont les paramètres (ajustables) pour les différentes contributions de la partie imaginaire du potentiel.

Comme cela est très souvent le cas, la partie réelle du potentiel surfacique est nulle, ce qui donne au final  $V_s(E) = \Delta V_s(E)$  (contribution dispersive uniquement avec  $W_s$ ). Le potentiel réel volumique est décrit tel que :

$$V_v(E) = V_{HF}(E) + \Delta V_v(E) \quad (3.55)$$

avec :

$$V_{HF}(E) = v_{HF} \exp \left[ -\mu\beta^2 \frac{[E - V_{HF}(E)]}{2\hbar^2} + 4\mu^2\gamma^2 \frac{[E - V_{HF}(E)]^2}{\hbar^4} \right] \quad (3.56)$$

où le potentiel de Hartree-Fock  $V_{HF}(E)$  se calcule de manière itérative jusqu'à obtenir convergence de sa valeur ( $V_{HF}(E)$  se trouve des deux côtés de l'Équation (3.55)).  $v_{HF}$  représente la profondeur du puits et  $\beta$  et  $\gamma$  des paramètres de non-localité ( $\mu$  ici est la masse réduite du système).

Enfin, le potentiel réel du couplage spin-orbite, repris de la Référence [48], est décrit suivant :

$$V_{so}(E) = v_{so1} \exp[v_{so2}(E - E_F)] + \Delta V_{so}(E) \quad (3.57)$$

La Table 3.4 résume les paramètres (OMP) permettant de décrire le potentiel utilisé dans la résolution de l'Équation (3.47) de Schrödinger. On rappelle que tous ces OMP sont ajustables afin d'obtenir des sections efficaces (et distributions angulaires) qui soient en accord avec les mesures disponibles.

Contribution	Réelle	Imaginaire
Volumique	$v_{HF}$ (MeV)	$w_{v1}$ (MeV)
	$\beta$ (fm)	$w_{v2}$ (MeV)
	$\gamma$ (fm)	
Surfacique	origine dispersive	$w_{s1}$ (MeV)
		$w_{s2}$ (MeV)
		$w_{s3}$ (MeV <sup>-1</sup> )
Spin-Orbite	$v_{so1}$ (MeV)	$w_{so1}$ (MeV)
	$v_{so2}$ (MeV <sup>-1</sup> )	$w_{so2}$ (MeV)
Géométrique	$r$ (fm)	
	$a$ (fm)	

TABLE 3.4. Paramètres du modèle optique utilisés pour décrire le potentiel de Morillon-Romain

### 3.4.2.3 Résolution de l'Équation de Schrödinger Radiale

Une fois que le potentiel  $\mathcal{U}(r, E)$  est connu cela pour toutes valeurs de  $r$  et de  $E$ , l'Équation (3.47) de Schrödinger Radiale est résolue en séparant le domaine radial  $r$  en une région interne ( $r < R_M$ ) et une région externe ( $r > R_M$ ) où  $R_M$  est le rayon pour lequel le potentiel devient négligeable. Dans le domaine des résonances résolues,  $R_M$  n'est autre que le rayon de voie  $a_c$  (*channel radius*).

Dans la région interne, à une énergie  $E$  donnée et pour un  $\ell$  et  $j$ , on résoud :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2(E) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \mathcal{U}_{\ell j}(r, E) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\ell j}(r) = 0 \quad (3.58)$$

Dans la région externe, le potentiel est nul et l'équation devient (pour des particules non-chargées) :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2(E) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \psi_{\ell j}(r) = 0 \quad (3.59)$$

dont les solutions sont sous la forme des fonctions d'onde régulières et irrégulières de Coulomb  $F_\ell(r)$  et  $G_\ell(r)$ . La solution générale s'écrit :

$$\psi_{\ell j} = [F_\ell + \imath G_\ell + U_{\ell j}(F_\ell - \imath G_\ell)] \quad (3.60)$$

avec  $U_{\ell j}$  appelée *scattering matrix* ou matrice de collision. En faisant coïncider les dérivées logarithmiques des fonctions d'onde  $u_{\ell j}$  de la région interne et  $\psi_{\ell j}$  de la région externe comme :

$$\left( \frac{u'_{\ell j}}{u_{\ell j}} = \frac{\psi'_{\ell j}}{\psi_{\ell j}} \right)_{r=R_M} \quad (3.61)$$

on a finalement les éléments de  $U_{\ell j}$  :

$$U_{\ell j} = \frac{(u'_{\ell j} F_\ell - u_{\ell j} F'_\ell) - (u_{\ell j} G'_\ell - u'_{\ell j} F_\ell)}{(u_{\ell j} F'_\ell - u'_{\ell j} F_\ell) - (u_{\ell j} G'_\ell - u'_{\ell j} F_\ell)} \quad (3.62)$$



À partir de  $U_{\ell j}$ , on obtient les coefficients de transmission  $T_{\ell j}$  ainsi que les sections efficaces totale  $\sigma_{tot}$ , diffusion potentielle élastique  $\sigma_{shape}$  (*shape elastic*) et de réaction  $\sigma_{reac}$  (pour le noyau composé) :

$$T_{\ell j} = 1 - |U_{\ell j}| \quad \text{avec } j = \ell \pm \frac{1}{2} \quad (3.63)$$

$$\sigma_{reac} = \frac{\pi}{2} \sum_{\ell}^{\infty} \sum_{j=\ell-1/2}^{j=\ell+1/2} (2j+1) T_{\ell j} \quad (3.64)$$

$$\sigma_{shape} = \frac{\pi}{2} \sum_{\ell}^{\infty} \sum_{j=\ell-1/2}^{j=\ell+1/2} (2j+1) |1 - U_{\ell j}| \quad (3.65)$$

$$\sigma_{tot} = \frac{\pi}{2} \sum_{\ell}^{\infty} \sum_{j=\ell-1/2}^{j=\ell+1/2} (2j+1) [1 - \text{Re}(U_{\ell j})] \quad (3.66)$$

Par la suite, on utilise des modèles statistiques pour décomposer  $\sigma_{reac}$  entre les différentes voies de réaction.

### 3.4.3 Les Réactions Directes

Parmi les réactions directes, nous avons déjà calculé la contribution due à la diffusion potentielle élastique ( $\sigma_{shape}$ ) auparavant par modèle optique. Cependant, la section de réaction ( $\sigma_{reac}$ ) contient non-seulement les sections liées au noyau composé mais également les sections par réactions directes (autre que la diffusion potentielle élastique). Ces autres réactions directes (inélastiques, capture, émission de particules) nécessitent plusieurs modèles et doivent être prises en considération assez tôt. En effet, ces réactions deviennent très vite prépondérantes par rapport aux réactions du noyau composé quand l'énergie incidente des neutrons est suffisante.

Ces modèles ont été développés au sein du code TALYS [51] et une description exhaustive est fournie pour chacun d'entre eux dans le manuel associé au code. De ce fait, nous nous contenterons de donner une brève description des modèles employées et nous nous concentrerons plus sur les paramètres qui sont nécessaires pour utiliser ces modèles.

#### 3.4.3.1 Calcul par DWBA

Comme nous l'avons expliqué dans la section sur le modèle optique, le calcul par DWBA est employée pour calculer les contributions directes inélastiques pour des noyaux considérés comme sphériques ou faiblement déformés [52]. Pour mener à bien ces calculs, il faut rassem-

bler d'une part les paramètres de potentiel du modèle optique OMP (utilisés précédemment) et, d'autre part, des paramètres de déformation.

Pour des noyau avec un nombre de masse  $A$  impair (comme le  $^{23}\text{Na}$ ), TALYS utilise les paramètres de déformation  $\beta_L$  d'un noyau proche avec  $A$  pair ( $L$  spin des niveaux excités du noyau pair) et suppose que les niveaux du noyau impair sont faiblement couplés à ceux du noyau pair par la relation :

$$\beta_{L,J_f} = \beta_L \cdot \sqrt{\frac{2J_f + 1}{(J_i + 1) \cdot (2L + 1)}} \quad (3.67)$$

où  $J_i$  et  $J_f$  sont respectivement les spins du niveau fondamental et d'un niveau excité du noyau impaire et  $\beta_{L,J_f}$  est le paramètre de déformation (pour le niveau de spin  $J_f$ ) employé pour le calcul DWBA. Dans le cas du  $^{23}\text{Na}$ , les paramètres de déformation proviennent du  $^{22}\text{Ne}$ , qui est le noyau pair proche.

À l'issu de ces calculs DWBA, on obtient les sections inélastiques directes  $\sigma_{n,n'}^{i,dir}$  pour chaque niveau discret  $i$  ainsi que les distributions angulaires associées  $d\sigma_{n,n'}^{i,dir}/d\Omega$ . Ces réactions directes pour les niveaux inélastiques deviennent très rapidement non-négligeables devant les réactions par noyau composé (généralement quand l'énergie incidente  $E > E^i + 1$  MeV où  $E^i$  est l'énergie du niveau discret  $i$ ).

#### 3.4.4 Les Réactions du Pré-Équilibre

Les réactions par pré-équilibre (ou encore appelé *multi-step processes*) sont des processus complexes qui comprennent des particularités de l'interaction directe et du processus par formation du noyau composé. L'émission par pré-équilibre a lieu bien avant que l'énergie soit distribuée uniformément à tous les nucléons du noyau composé.

On peut imaginer que la particule incidente va créer, étape après étape, des états de plus en plus complexes dans le système du noyau composé et va oublier petit à petit son origine (énergie incidente et direction). Les processus par pré-équilibre couvrent un large spectre (typiquement de 10 MeV jusqu'à au moins 200 MeV) des sections efficaces. Pour le  $^{23}\text{Na}$ , l'utilisation du pré-équilibre débute à partir du continuum inélastique soit environ pour des énergies de neutrons incidents d'environ 6-7 MeV.

Les modèles pour définir le pré-équilibre sont nombreux et très complexes. Nous ne détaillerons pas davantage ces derniers (le manuel du code TALYS est très complet à ce sujet).

Dans notre cas, le modèle employé pour le pré-équilibre est le modèle d'exciton. En termes de paramètres, nous n'utilisons que ceux qui ont un effet de normalisation sur les sections efficaces.

On considère souvent les réactions du pré-équilibre comme directes, pour bien les différencier de celles calculées par formation d'un noyau composé. À noter que les sections efficaces calculées par pré-équilibre sont celles du continuum inélastique  $\sigma_{n,n'}^{cont,PE}$ , la capture radiative  $\sigma_{n,\gamma}^{PE}$  et celles des particules chargées  $\sigma_{n,p}^{PE}$ ,  $\sigma_{n,\alpha}^{PE}$ , etc...

### 3.4.5 Les Réactions du Noyau Composé

Une fois que toutes les réactions directes/pré-équilibre sont calculées, il reste à décomposer la contribution de la formation du noyau composé suivant les réactions possibles. La théorie la plus couramment employée est celle d'Hauser-Feshbach [53] corrigée par des facteurs de fluctuations. Les sections efficaces partielles issues du noyau composé sont données telles que :

$$\sigma_{a,b}^{comp} = D^{comp} \frac{\pi}{k^2} \sum_J g_J \frac{T_a^J(E_a) \langle T_b^J(E_b) \rangle}{\sum_c \langle T_c^J(E_c) \rangle} W_{ab}^J \quad (3.68)$$

où

- $a$  est la voie entrante telle que  $a = \{\alpha, l, s, J^\pi\}$  (on suppose que le noyau cible n'est pas excité)
- $b$  est la voie sortante telle que  $b = \{\alpha', l', s', J^\pi, E_x\}$
- $E_a$  est l'énergie de la particule entrante
- $E_b$  énergie de la particule éjectée, *i.e.*  $E_b = E_{tot} - S_b - E_x$ ,  $E_x$  énergie d'excitation du noyau résiduel,  $S_b$  énergie de séparation,  $E_{tot}$  énergie totale du noyau composé
- $D^{comp}$  est un facteur de normalisation qui tient compte des calculs directes et pré-équilibre
- $T_a^J$  est le coefficient de transmission
- $W_{ab}^J$  est appelé facteur correctif de fluctuations (détaillé au paragraphe suivant)

Le facteur de normalisation  $D^{comp}$  s'écrit dans notre cas :

$$D^{comp} = \frac{\sigma_{reac} - \sigma_{DWBA}^{dir} - \sigma_{PE}}{\sigma_{reac}} \quad (3.69)$$

La notation  $\langle T_b^J \rangle$  pour les coefficients de transmission de la voie sortante est écrite ainsi pour distinguer deux cas de figure. Dans le premier cas, l'énergie d'excitation  $E_x$  correspond à un état discret connu (*i.e.* tiré d'une base de données) du noyau résiduel alors :

$$\langle T_b^J(E_b) \rangle = T_b^J(E_b) \quad (3.70)$$

Si  $E_x$  se trouve dans le continuum, alors le coefficient de transmission est moyenné dans un groupe ou *bin* d'énergie d'excitation  $\Delta E_x$  :

$$\langle T_b^J(E_b) \rangle = \int_{E_x - \frac{1}{2}\Delta E_x}^{E_x + \frac{1}{2}\Delta E_x} \rho(E_x, J, \Pi) \cdot T_b^J(E_{tot} - S_b - E_x) dE_x \quad (3.71)$$

où apparaît  $\rho$ , la densité de niveaux qui est un ingrédient essentiel dans les mécanismes de réactions nucléaires et qui sera plus longuement détaillée plus loin.

Les coefficients de transmission sont calculés par modèle optique (*cf.* Équation (3.63) pour les voies neutrons, protons, etc. . . De la même manière qu'il existe une paramétrisation du potentiel pour les neutrons, on trouve également de nombreuses paramétrisations pour les particules chargées. Pour la ré-évaluation du  $^{23}\text{Na}$ , nous avons décidé d'utiliser la description globale du potentiel de Koning-Delaroche (modèle sphérique) pour les transmissions de particules chargées ( $c' = p, \alpha \dots$ ) où nous pouvons cependant renormaliser les valeurs des puits, rayons et diffusivités afin d'obtenir des sections efficaces assez proches des mesures. La manière dont on calcule les coefficients de transmission pour les émissions  $\gamma$  est expliquée un peu plus bas.

De manière analogue au calcul des sections efficaces du noyau composé, il est également possible de calculer les distributions angulaires associées, qui se décomposent en coefficients de polynôme de Legendre :

$$\frac{d\sigma_{a,b}^{comp}}{d\Omega} = \sum_L C_L^{comp} P_L(\cos\theta) \quad (3.72)$$

où les coefficients  $C_L^{comp}$  sont calculées de manière analogue à l'Équation (3.19) dans la théorie de la matrice- $R$ .

#### 3.4.5.1 Le Facteur Correctif de Fluctuations

TALYS utilise par défaut la formulation de Moldauer [54, 55] pour le facteur correctif de fluctuations  $W_{ab}$ , qui suppose que les largeurs partielles  $\Gamma$  respectent une distribution de  $\chi^2$  à  $\nu$  degrés de liberté encore appelé distribution de Porter-Thomas. Avec le modèle de Moldauer,  $W_{ab}$  s'écrit :

$$W_{ab} = \left(1 + \frac{2\delta_{ab}}{\nu_a}\right) \int_0^\infty \prod_c \left(1 + \frac{2T_c \cdot x}{\nu_c \sum_i T_i}\right)^{-(\delta_{ac} + \delta_{bc} + \nu_c/2)} \quad (3.73)$$

où le degré de liberté  $\nu_c$  pour la voie  $c$  est donné suivant la formule empirique :

$$\nu_c = 1.78 + \left(T_c^{1.212} - 0.78\right) \exp\left(-0.228 \sum_c T_c\right) \quad (3.74)$$

D'autres modèles existent également dans le code TALYS pour prendre en compte les corrections de fluctuations.

### 3.4.5.2 Les Densités de Niveaux

Presque tous les modèles statistiques de calcul de sections efficaces nécessitent des modèles représentant les densités de niveaux nucléaires. En effet, pour des énergies incidentes importantes, il arrive très souvent que les informations sur les niveaux discrets soient manquantes dans les bases de données de type ENSDF [56]. Avec le modèle optique, les densités de niveaux nucléaires sont probablement les ingrédients cruciaux pour l'analyse théorique des observables physiques comme les sections efficaces.

Le plus connu des modèles de densité de niveaux est sans aucun doute le *Fermi Gas Model* (FGM) développé par Bethe [57] en 1937, qui dépend principalement du paramètre de densité de niveaux  $a$ . On peut citer des modèles plus élaborés tels que le *Back-Shifted Fermi Gas Model* ou encore le *Generalized Superfluid Model*. Cependant, le modèle de densité de niveaux employé par défaut dans le code TALYS est appelé *Composite Gilbert-Cameron Model* [58], que nous allons maintenant détailler.

#### Le modèle *Composite Gilbert-Cameron* :

Ce modèle utilise deux formulations différentes de la densité de niveaux suivant l'énergie d'excitation  $E_x$ . De 0 MeV à une énergie de raccordement ou *matching energy*  $E_M$ , les lois du modèle à température constante (*Constant Temperature Model* ou CTM) s'appliquent. Au delà de cette énergie  $E_M$ , on utilise le *Fermi Gas Model*.

#### Le Fermi Gas Model :

Bethe proposa ce modèle basé sur l'hypothèse physique que les états de la particule qui construisent les niveaux excités du noyau sont espacés de manière régulière, et où l'on suppose que les effets de type collectif sont absents. Dans un système de fermions à deux composantes (neutrons et protons excités), la densité de niveaux du gaz de Fermi s'écrit :

$$\rho_F(E_x, J, \Pi) = \frac{1}{2} \cdot \frac{2J+1}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} \cdot \exp\left[-\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)}{2\sigma^2}\right] \cdot \frac{\sqrt{\pi} \exp(2\sqrt{aU})}{12 a^{1/4} U^{5/4}} \quad (3.75)$$

où le facteur  $\frac{1}{2}$  en début de formule suppose une équi-répartition de la parité  $\Pi$ .  $a$  est appelé paramètre de densité de niveaux, que l'on peut théoriquement calculer suivant  $a = \frac{\pi^2}{6} (g_\pi + g_\nu)$ , avec  $g_\pi$  ( $g_\nu$ ) l'espacement du proton (neutron) des états de la particule à proximité de l'énergie de Fermi. Le plus souvent, on détermine  $a$  à partir d'autres paramètres

(mesurés pour certains d'entre eux). Par ailleurs, il est la plupart du temps dépendant de l'énergie dans les modèles analytiques contemporains.  $U$  est l'énergie effective d'excitation et est définie comme :

$$U = E_x - \Delta \quad (3.76)$$

dans laquelle  $\Delta$  est une énergie de décalage, reliée aux énergies d'appariement des neutrons et protons (énergie requise pour former une paire de nucléons de même type). Ce dernier paramètre est souvent ajusté afin de reproduire plus fidèlement les observables qui sont disponibles. Enfin,  $\sigma$  (dans l'Équation (3.75)) est le paramètre de *spin cut-off* et représente la largeur de la distribution des moments angulaires. En sommant  $\rho_F(E_x, J, \Pi)$  pour tous les spins et toutes les parités, on obtient la densité de niveaux totale de Fermi :

$$\rho_F^{tot}(E_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{12} \cdot \frac{\exp(2\sqrt{aU})}{a^{1/4}U^{5/4}} \quad (3.77)$$

Les Équations 3.75 et 3.77 nous montrent que  $\rho_F(E_x, J, \Pi)$  et  $\rho_F^{tot}(E_x)$  dépendent de trois paramètres :  $a$ ,  $\sigma$  et  $\Delta$ , où les deux premiers possèdent une dépendance avec l'énergie d'excitation  $E_x$ .

Dans le modèle du Gas de Fermi, le paramètre de densité de niveaux  $a$  est dérivé de l'espacement moyen  $D_0$  entre les résonances d'onde  $s$  à l'énergie de séparation des neutrons  $S_n$  ( $D_0$  est souvent simple à mesurer/estimer pour une large gamme d'isotopes). Le lien entre ces deux paramètres s'obtient suivant la formule :

$$\frac{1}{D_0} = \sum_{J=|I-\frac{1}{2}|}^{J=|I+\frac{1}{2}|} \rho_F(S_n, J, \Pi) \quad I, \text{ spin du noyau cible} \quad (3.78)$$

#### Le paramètre de densité de niveaux $a$ :

On peut obtenir, via l'Équation (3.78), le paramètre  $a$  par une recherche itérative. Comme on peut le voir, cette formulation suggère une valeur constante (dépendante du noyau) pour le paramètre de densité de niveaux  $a$  et il est vrai que l'analyse systématique des premiers niveaux de nombreux isotopes montrent que  $a$  est indépendant de l'énergie. Cependant, Ignatyuk [59] montre qu'il existe une corrélation entre le paramètre  $a$  et le terme de correction de couche dans la formule de la goutte liquide. Ainsi, il proposa une nouvelle formulation phénoménologique de  $a$  qui prend en compte les effets de couche à basse énergie et leurs disparitions à haute énergie :

$$a = a(E_x) = \tilde{a} \cdot \left[ 1 + \delta W \cdot \frac{1 - \exp(-\gamma U)}{U} \right] \quad (3.79)$$

$\tilde{a}$  est appelé valeur asymptotique de la densité de niveaux, obtenue en l'absence des effets de couches, *i.e*  $\tilde{a} = a(E_x \rightarrow +\infty)$  dans le cas général mais on a également  $\tilde{a} = a(E_x)$  si  $\delta W = 0$  quelle que soit la valeur de l'énergie d'excitation  $E_x$ . Le paramètre d'amortissement  $\gamma$  permet de déterminer la vitesse à laquelle  $a(E_x)$  va tendre vers  $\tilde{a}$ . Enfin,  $\delta W$  est l'énergie de correction de couches. La valeur asymptotique  $\tilde{a}$  est donnée sous la forme :

$$\tilde{a} = \alpha A + \beta A^{\frac{2}{3}} \quad (3.80)$$

où  $A$  est le nombre de masse du noyau. Le paramètre d'amortissement  $\gamma$  s'écrit quant à lui :

$$\gamma = \frac{\gamma_1}{A^{\frac{1}{3}}} + \gamma_2 \quad (3.81)$$

$\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma_{1-2}$  dans les Équations 3.80 et 3.81 sont des paramètres globaux (ajustables) déterminés afin d'obtenir la meilleure description des densités de niveaux en moyenne sur une grande gamme de noyaux. L'énergie  $\delta W$  (en MeV) est obtenue à partir de la différence entre la masse mesurée expérimentalement et la masse calculée à partir de la formule de la goutte liquide. Si  $U$  devient négative ou nulle, c'est-à-dire  $E_x < \Delta$  alors on estime  $a(E_x)$  par un développement de Taylor au premier ordre :

$$\lim_{U \rightarrow 0} a(E_x) = \tilde{a} \cdot (1 + \gamma \cdot \delta W) \quad (3.82)$$

Pour la suite, quand on utilisera le paramètre  $a$ , on supposera implicitement que  $a = a(E_x)$  de l'Équation (3.79) ou de l'Équation (3.82)

### Le Constant Temperature Model :

Dans le *Constant Temperature Model* (CTM), introduit par Gilbert et Cameron [58], l'énergie effective d'excitation  $U$  s'écrit  $U = E_x - \Delta^{CTM}$  où l'énergie de décalage est donnée selon :

$$\Delta^{CTM} = \chi \frac{12}{\sqrt{A}} \quad \text{avec } \chi = \begin{cases} 0 & , \text{ pour les noyaux impair-impair} \\ 1 & , \text{ pour les noyaux impair-pair} \\ 2 & , \text{ pour les noyaux pair-pair} \end{cases} \quad (3.83)$$

Pour les faibles énergies d'excitation, le modèle est basé sur la preuve expérimentale que les premiers niveaux discrets cumulés sous forme d'un histogramme  $N(E_x)$  suivent une loi exponentielle :

$$N(E_x) = \exp\left(\frac{E_x - E_0}{T}\right) \quad (3.84)$$

appelée la loi de la température constante. La température nucléaire  $T$  et l'énergie  $E_0$  sont des paramètres utilisés pour ajuster les niveaux discrets mesurables. De cette manière,

la densité de niveaux totale se lit comme :

$$\rho_T^{tot} = \frac{dN(E_x)}{dE_x} = \frac{1}{T} \cdot \exp\left(\frac{E_x - E_0}{T}\right) \quad (3.85)$$

Pour des énergies plus importantes, on préfère utiliser le *Fermi Gas Model* plus adapté dans ce cas et la densité de niveaux totale est donnée par l'Équation (3.77). Comme expliqué plus tôt, il faut que les valeurs et les dérivées de  $\rho_T^{tot}$  et  $\rho_F^{tot}$  à l'énergie de raccordement  $E_M$  soient égales. Ainsi, la continuité exige que :

$$\begin{aligned} \rho_T^{tot}(E_M) &= \rho_F^{tot}(E_M) \\ \text{d'où} \\ E_0 &= E_M - T \ln \left[ T \cdot \rho_F^{tot}(E_M) \right] \end{aligned} \quad (3.86)$$

Ensuite, la continuité des dérivées fait que :

$$\left[ \frac{d\rho_T^{tot}(E_x)}{dE_x} \right]_{E_x=E_M} = \left[ \frac{d\rho_F^{tot}(E_x)}{dE_x} \right]_{E_x=E_M}$$

ce qui conduit à :

$$\frac{1}{T} = \left[ \frac{d \ln \rho_F^{tot}(E_x)}{dE_x} \right]_{E_x=E_M} \quad (3.87)$$

Les deux équations de continuité nous donnent deux solutions pour trois inconnues :  $T$ ,  $E_0$  et  $E_M$ . C'est pourquoi une contrainte supplémentaire est nécessaire où l'on demande que la loi de température constante reproduise les niveaux discrets expérimentaux d'un niveau inférieur  $N_L$  (d'énergie  $E_L$ ) à un niveau supérieur  $N_U$  (d'énergie  $E_U$ ), ce qui peut s'écrire comme :

$$N_U = N_L + \int_{E_L}^{E_U} \rho_T^{tot}(E_x) dE_x \quad (3.88)$$

ou encore, en la combinant avec l'Équation (3.85) :

$$N_U = N_L + \left[ \exp\left(\frac{E_U - E_0}{T}\right) - \exp\left(\frac{E_L - E_0}{T}\right) \right] \quad (3.89)$$

On a pu voir que les modèles de densité de niveaux (employés dans notre cas) sont complexes et nécessitent un nombre important de paramètres qui peuvent être ajustés. Il ne faut pas oublier que ces modèles sont propres à un isotope et que cela nécessite en conséquence une base de données de structure nucléaire très riche, comme la base de données de RIPL [50].



### 3.4.5.3 Les Coefficients de Transmission par Émission Gamma

Les coefficients de transmission par émission  $\gamma$  sont nécessaires pour la description des voies par émission  $\gamma$  des réactions nucléaires (en compétition avec les autres coefficients de transmission calculés par modèle optique), en particulier pour les calculs par Hauser-Feshbach décrits auparavant dans l'Équation (3.68). Le coefficient de transmission  $\gamma$  pour la multipolarité  $\ell$  de type  $X$  (avec  $X = M$  ou  $X = E$ ) est donné suivant :

$$T_{\gamma, X_\ell} = 2\pi \cdot f_{X_\ell}(E_\gamma) \cdot E_\gamma^{2\ell+1} \quad (3.90)$$

où  $E_\gamma$  est l'énergie du photon  $\gamma$  émis et  $f_{X_\ell}$  est la fonction force (*strength function*) d'émission gamma qui dépend de l'énergie.

#### Les fonctions force $\gamma$ :

Il existe plusieurs formes pour les *strength functions* d'émission  $\gamma$  pour décrire la résonance dipolaire géante (*Giant Dipole Resonance* ou GDR). Pour la plupart des multipolarités et des types, le code TALYS emploie le modèle de Brink-Axel [60, 61], basé sur une forme standard de Lorentzienne :

$$f_{X_\ell}(E_\gamma) = \frac{1}{(2\ell + 1) \pi^2 \hbar^2 c^2} \cdot \frac{\sigma_{X_\ell} E_\gamma \Gamma_{X_\ell}^2}{(E_\gamma^2 - E_{X_\ell}^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_{X_\ell}^2} \quad (3.91)$$

où  $\sigma_{X_\ell}$ ,  $E_{X_\ell}$  et  $\Gamma_{X_\ell}$  sont respectivement la force, l'énergie et la largeur de la résonance géante. Pour les transitions de type  $E_1$ , TALYS utilise la forme généralisée de Lorentzienne de Kopecky-Uhl [62] :

$$f_{E_1}(E_\gamma, T) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2 c^2} \cdot \left[ \frac{E_\gamma \tilde{\Gamma}_{E_1}(E_\gamma)}{(E_\gamma^2 - E_{E_1}^2)^2 + E_\gamma^2 \tilde{\Gamma}_{E_1}^2(E_\gamma)} + \frac{0.7 \Gamma_{E_1} 4\pi^2 T^2}{E_{E_1}^3} \right] \quad (3.92)$$

où la largeur d'amortissement (dépendante de l'énergie) s'écrit :

$$\tilde{\Gamma}_{E_1}(E_\gamma) = \Gamma_{E_1} \cdot \frac{E_\gamma^2 + 4\pi^2 T^2}{E_{E_1}^2} \quad (3.93)$$

et la température nucléaire  $T$  [63] est donnée par :

$$T = \sqrt{\frac{E_n + S_n - \Delta - E_\gamma}{a(S_n)}} \quad (3.94)$$

On retrouve ici  $E_n$  l'énergie du neutron incident,  $S_n$  l'énergie de séparation du neutron,  $\Delta$  la correction d'appariement et  $a$  le paramètre de densité de niveaux présentés (détaillés auparavant).

$\sigma_{X_\ell}$ ,  $E_{X_\ell}$  et  $\Gamma_{X_\ell}$ , décrits plus haut, sont des paramètres (ajustables) de la GDR et sont calculés en général à partir de systématiques compilées par Kopecky [50], qui ne seront pas détaillées ici.

#### Normalisation des transmissions $\gamma$ :

Pour des neutrons avec des énergies suffisamment faibles, la largeur de capture radiative moyenne  $\langle \Gamma_\gamma \rangle$  peut être tirée de la seule interaction des ondes  $s$  et la valeur de cette largeur à  $S_n$  est souvent employée pour re-normaliser les coefficients de transmission  $\gamma$ . Si la valeur de  $\langle \Gamma_\gamma \rangle$  n'est pas disponible expérimentalement, TALYS utilise une systématique proposée par Kopecky telle que  $\langle \Gamma_\gamma \rangle = 1593/A^2$  eV. La largeur radiative pour les ondes  $s$  est obtenue en intégrant les coefficients de transmission sur les densités des états finaux qui peuvent atteindre les premières étapes de la cascade de décroissance  $\gamma$ . La normalisation se fait suivant :

$$\frac{2\pi \langle \Gamma_\gamma \rangle}{D_0} = G_{norm} \sum_J \sum_\Pi \sum_{X_\ell} \sum_{I'=|J-\ell|}^{I'=J+\ell} \sum_{\Pi'} \int_0^{S_n} T_{\gamma, X_\ell}(E_\gamma) \rho(S_n - E_\gamma, I', \Pi') h(X, \Pi', \ell) dE_\gamma \quad (3.95)$$

$$\text{avec les lois de sélection multipole : } \begin{cases} h(E, \Pi', \ell) = 1 & \text{si } \Pi = \Pi' (-1)^\ell \\ h(M, \Pi', \ell) = 1 & \text{si } \Pi = \Pi' (-1)^{\ell+1} \\ h(X, \Pi', \ell) = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

En pratique, TALYS multiplie automatiquement les coefficients  $T_{\gamma, X_\ell}$  par  $G_{norm}$  avant de les utiliser dans un calcul Hauser-Feshbach, ceci pour que les contributions des voies  $\gamma$  soient en accord avec les données expérimentales disponibles.

#### 3.4.6 Récapitulatif sur les Sections Efficaces dans le Continuum

Un grand nombre de réactions s'ouvrent lorsque le domaine du continuum débute. On a pu voir que les sections efficaces, correspondantes à ces réactions, ont de multiples origines et sont résumées ci-dessous :

- $\sigma_{tot}$  : modèle optique
- $\sigma_{elas}$  : modèle optique (section potentielle élastique  $\sigma_{shape}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{elas}^{comp}$ )
- $\sigma_{inel}^i$  (inélastique pour le niveau  $i$ ) : calculs DWBA (contribution directe  $\sigma_{inel}^{i,dir}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{inel}^{i,comp}$ )
- $\sigma_{inel}^{cont}$  (continuum inélastique) : pré-équilibre ( $\sigma_{inel}^{cont,PE}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{inel}^{cont,comp}$ )
- $\sigma_{n,\gamma}$  : pré-équilibre ( $\sigma_{n,\gamma}^{PE}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{n,\gamma}^{comp}$ ) couplé à un modèle de résonance dipolaire géante
- $\sigma_{n,p}$  : pré-équilibre ( $\sigma_{n,p}^{PE}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{n,p}^{comp}$ ) utilisant des coefficients de transmission tirés de modèle optique avec un proton comme particule incidente

- $\sigma_{n,\alpha}$  : pré-équilibre ( $\sigma_{n,\alpha}^{PE}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{n,\alpha}^{comp}$ ) utilisant des coefficients de transmission tirés de modèle optique avec un  $\alpha$  comme particule incidente
- $\sigma_{n,2n}$  : pré-équilibre ( $\sigma_{n,2n}^{PE}$ ) et noyau composé ( $\sigma_{n,2n}^{comp}$ )
- ...

### 3.5 Conclusion sur les Aspects Théoriques

Nous avons vu que, suivant les domaines d'énergie étudiés, on utilise des modèles de réactions nucléaires très différents. Suivant la complexité et le nombre des voies de sortie, il arrive qu'un modèle nécessite une série de sous-modèles qui gèrent une fonction bien particulière. Il est donc nécessaire, en vue de la ré-évaluation du  $^{23}\text{Na}$ , d'avoir tous ces modèles dans des codes permettant l'analyse de données nucléaires.

Pour l'analyse du domaine des résonances résolues (RRR), on peut citer le code SAMMY [64] développé par N. Larson à ORNL ou encore le code REFIT [65], créé par M. Moxon et utilisé à l'IRMM à Geel en Belgique.

Concernant le domaine complexe du continuum, le développement de TALYS [66], en collaboration entre NRG à Petten (Hollande) et le CEA-DAM ces dernières années, nous permet d'avoir aujourd'hui un code fiable et souple. En outre, on peut mentionner le code EMPIRE [37] développé initialement par M. Herman à partir de 1980 et le code GNASH [67].

Le Laboratoire d'Études Physiques (LEPh), dans lequel est effectué cette thèse, a développé depuis 2005 un code nommé CONRAD [68], qui permet d'évaluer les données nucléaires. Le prochain chapitre est dédié à la présentation succincte et aux développements, indispensables pour mener à bien ces travaux de ré-évaluation, de l'outil CONRAD.

# Le Code d'Évaluation CONRAD

---

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Présentation du Code . . . . .</b>	<b>95</b>
4.1.1	Les Modèles Théoriques . . . . .	97
4.1.2	La Simulation Expérimentale . . . . .	97
4.1.3	Les Outils d'Analyse . . . . .	99
<b>4.2</b>	<b>Les Développements Nécessaires . . . . .</b>	<b>102</b>
4.2.1	Développement/Interface de Modèles Théoriques . . . . .	102
4.2.2	L'Assimilation d'Expériences Intégrales . . . . .	109

---

Dans ce chapitre, nous souhaitons présenter de manière non-exhaustive le code d'évaluation de données nucléaires nommé CONRAD, pour “*COde for Nuclear Reaction Analysis and Data Assimilation*” et les fonctionnalités qu'il proposait avant les développements nécessaires pour l'élaboration de ces travaux de thèse. Ainsi, dans une première partie, nous exposons les outils/modèles déjà présents au sein de CONRAD. Dans un second temps, nous présentons les principaux développements qui ont permis de ré-évaluer le sodium.

## 4.1 Présentation du Code

Le développement [68] de CONRAD a débuté en 2005 au SPRC/LEPh du CEA de Cadarache, avec pour but l'évaluation et la propagation des incertitudes sur les sections efficaces de réactions nucléaires. CONRAD est développé en C++ (orienté objet) mais peut être interfacé avec d'autres programmes ou routines écrits dans un langage différent. Le code contient une bibliothèque dynamique (*conradlib*) qui est liée à un exécutable (*conradtui*) permettant à l'utilisateur d'utiliser de différentes manières les fonctionnalités de la bibliothèque.

La bibliothèque se décompose suivant plusieurs sous-ensembles :

- un ensemble de classes liées à l'analyse : ajustements, marginalisations. . .

- un ensemble théorique qui contient les classes de modèles de réactions nucléaires associées à leurs classes de paramètres.
- des classes qui décrivent les aspects expérimentaux, afin de traiter les mesures microscopiques (sections, transmissions, rendements) et également les mesures intégrales.
- des classes d'interface qui gèrent les dialogues et les données entre les autres classes de la bibliothèque mais aussi les entrées et sorties avec des fichiers dans plusieurs formats (Registre, ENDF, EXFOR).

Le code est géré dans un cadre de développement collaboratif (rendu possible grâce à *svn*<sup>1</sup>, un outil de *versioning*), où les membres du laboratoire peuvent ajouter ou modifier les modèles théoriques/expérimentaux qui leur sont nécessaires.

### Gestion des incertitudes :

Les incertitudes sur les observables théoriques (sections efficaces, etc...) résultent des incertitudes sur les paramètres de modèles. Plus formellement, on peut calculer par exemple les sections efficaces selon  $\vec{\sigma}(\vec{x})$ , où  $\vec{x}$  est le vecteur contenant la valeur moyenne des paramètres. Dans le cadre d'une loi classique de propagation des erreurs, la matrice de covariances  $M_\sigma$  d'une observable, par exemple une section efficace, se calcule par :

$$M_\sigma = G_x^T \cdot M_x \cdot G_x \quad (4.1)$$

où  $M_x$  (de taille  $n_p, n_p$ ) est la matrice de covariances sur les paramètres de modèle  $\vec{x}$  et  $G_x$  est la matrice rectangulaire ( $n_p, n_m$ ) de dérivées qui s'écrit :

$$G_x = \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial \sigma_m}{\partial x_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \sigma_1}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial \sigma_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

avec  $\frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j}$ , la dérivée partielle de la section efficace à l'énergie  $E_i$  par rapport au  $j^e$  paramètre de  $\vec{x}$ .

Dans un cadre plus général, il est également possible de propager les incertitudes des paramètres de modèles, en utilisant leurs densités de probabilité associées  $p(\vec{x})$ , sur les sections efficaces par des méthodes Monte-Carlo.

---

1. Site internet de *svn* : <http://subversion.tigris.org>

### 4.1.1 Les Modèles Théoriques

Plusieurs modèles théoriques sont déjà implémentés dans CONRAD, notamment :

- pour le domaine des résonances résolues (RRR), on trouve le formalisme Multi-Level et le formalisme de Reich-Moore, où il est possible de calculer les sections efficaces totale, de diffusion élastique et de fission (si elle est possible) à partir de paramètres de résonance.
- pour le domaine des résonances non-résolues (URR), il y a :
  - le modèle de la matrice- $R$  moyenne ;
  - des modèles statistiques pour la capture et la fission.
- pour le continuum, un début d'interface avec le code ECIS-03 [69], développé en FORTRAN par J. Raynal, a été mis en place pour permettre les calculs par modèles optiques (sphérique et voies couplées) et obtenir des sections efficaces et des coefficients de transmission.

On associe à chaque modèle une grille de calcul en énergie sur laquelle le modèle va produire les sections efficaces demandées par l'utilisateur et, si cela est requis, les dérivées partielles (estimées numériquement sauf dans le RRR où ces dernières sont analytiques) de ces sections efficaces vis-à-vis des paramètres.

Enfin, il faut souligner les capacités de *multithreading* (utilisation de plusieurs processeurs pour certaines tâches) sur tous les modèles théoriques développés dans CONRAD, à l'exception de l'interface avec ECIS<sup>2</sup>. Le *multithreading* est employé (avec  $n$  threads) dans les modèles théoriques au niveau de la grille énergétique de calcul, qui se trouve alors subdivisée en  $n$  sous-grilles auxquelles sont associées  $n$  modèles théoriques totalement indépendants.

### 4.1.2 La Simulation Expérimentale

L'évaluation des données nucléaires se traduit par l'estimation de paramètres d'un ou plusieurs modèles de réactions nucléaires, qui sont par la suite confrontées à des données expérimentales.

La difficulté réside dans la modélisation de ces expériences, c'est-à-dire qu'il faut reproduire le plus fidèlement possible les conditions expérimentales dans lesquelles s'est déroulée l'expérience.

---

2. Il est en effet délicat, en termes de gestion de mémoire, de séparer en plusieurs *threads* l'utilisation d'une routine FORTRAN comme c'est le cas ici.

CONRAD peut ainsi simuler :

- des mesures de sections efficaces au sens classique du terme, *i.e.* la section en barns (ou parfois en millibarns) pour une réaction donnée comme on peut en trouver bien souvent sur la base de données expérimentales EXFOR.
- des mesures de transmission, qui mesurent indirectement la section efficace totale  $\sigma_i^{tot}$  de l'isotope  $i$  (par la formule  $T = \exp\left(-\sum_{i \in iso} \sigma_i^{tot} \cdot n_i\right)$  avec  $n_i$  la densité de l'isotope  $i$  dans la cible).
- des mesures de rendements de capture (liées à la section de capture et à la section de diffusion), à travers des modèles expérimentaux, soit analytiques, soit simulés par Monte-Carlo.
- des mesures de type intégral.

On voit qu'un grand nombre de mesures disponibles ne sont pas directement liées aux section efficaces microscopiques mais à des fonctionnelles plus ou moins complexes de ces sections. Ainsi, dans CONRAD, à chaque modèle expérimental est associé un modèle théorique qui va lui fournir les informations nécessaires pour re-simuler l'expérience.

Cette simulation nécessite des modules, implementés dans CONRAD, représentant les conditions expérimentales (température de la salle de mesure, épaisseur des cibles, ...) :

- plusieurs modèles d'élargissement Doppler : Gaz Libre (*Free Gas Model*) et modèle cristallin (*Crystal Lattice Model*)
- effets de la diffusion multiple (*Multiple Scattering*) pour les mesures de rendement de capture dans le cas de cible épaisse.

Par ailleurs, les données expérimentales sont fournies sous forme de spectre (tableau contenant énergies, donnée, incertitudes, etc. . .) où un traitement spécial est fait pour séparer les incertitudes statistiques et les incertitudes systématiques. On utilise dans CONRAD la décomposition de type AGS [70] proposée par C. Bastian selon :

$$M_E = D_{stat} + S \cdot S^T \quad (4.3)$$

où  $M_E$  (de taille  $n_E, n_E$ ) est la matrice de covariances expérimentale complète (statistiques + systématiques),  $D_{stat}$  la matrice diagonale contenant les variances statistiques expérimentales ( $D_{stat}$  a la même taille que  $M_E$ ) et  $S$  est une matrice rectangulaire de taille  $(n_E, n_k)$  avec  $n_k$  qui représente le nombre de source d'incertitudes systématiques (normalisation, bruit de fond, etc. . .). Par exemple, dans le cas d'une expérience où il existe une incertitude sur la normalisation de 3%,  $S$  est une matrice colonne dont les termes s'écrivent  $S_{i,j} = S_i = 0.03 \cdot y_i$  avec  $y_i$ , la donnée du spectre pour le  $i^e$  point.

### 4.1.3 Les Outils d'Analyse

Comme expliqué auparavant, l'évaluation consiste en l'analyse de données expérimentales par l'intermédiaire de modèles expérimentaux, qui s'appuient eux-même sur des modèles théoriques de réactions nucléaires. On peut distinguer plusieurs types d'analyse, qui vont être détaillés par la suite.

#### 4.1.3.1 L'Analyse Statistique des Résonances

Le premier type d'analyse est statistique et s'applique au RRR. Il permet de traduire, en termes de paramètres moyens utilisés pour le URR (comme les espacements moyens  $D_\ell$ , fonctions forces  $S_\ell$ , largeur radiative moyenne  $\overline{\Gamma}_\gamma$ , etc. . .) les paramètres de résonances, en particulier les largeurs neutroniques. Il fournit également des tests statistiques, basés sur des lois de probabilités de distribution bien particulières (Porter-Thomas. . .). Cette analyse est plus ou moins équivalente à celle que permet le code ESTIMA [71] en termes de fonctionnalités.

#### 4.1.3.2 L'Estimation de Paramètres de Modèles

B. Habert, dans sa thèse [72], a explicité de manière exhaustive, l'estimation (ou *fit*) des paramètres de modèles de réactions nucléaires. Nous allons décrire brièvement la méthode d'ajustement qui est implémentée dans CONRAD. Cette dernière s'appuie sur le théorème de Bayes [73], généralisé à des densités de probabilité continues, qui donne la relation suivante :

$$p(\vec{x}|\vec{y}, U) = \frac{p(\vec{x}, U) \cdot p(\vec{y}|\vec{x}, U)}{\int p(\vec{x}, U) \cdot p(\vec{y}|\vec{x}, U) d\vec{x}} \quad (4.4)$$

où  $U$  représente les informations connues *a priori* (on suppose que  $U$  est indépendante de  $\vec{y}$ ). On appelle la densité de probabilité  $p(\vec{x}, U)$  *a priori* et  $p(\vec{y}|\vec{x}, U)$  la "fonction de vraisemblance", qui fournit la vraisemblance entre les nouvelles mesures  $\vec{y}$  sachant  $U$ . Enfin,  $p(\vec{x}|\vec{y}, U)$  symbolise la densité de probabilité *a posteriori* de  $\vec{x}$  (le dénominateur dans l'Équation (4.4) sert de constante de normalisation). On peut simplifier cette formule sous la forme :

$$posterior [p(\vec{x}|\vec{y}, U)] \propto prior [p(\vec{x}, U)] \cdot likelihood [p(\vec{y}|\vec{x}, U)] \quad (4.5)$$



Afin de résoudre analytiquement ce problème, on fait les hypothèses suivantes :

- les distributions de l'*a priori* suivent une loi gaussienne.
- la fonction de vraisemblance est une gaussienne centrée sur la mesure dont la covariance est celle de l'expérience.
- on suppose que la distribution obtenue *a posteriori* est une gaussienne centrée au maximum de cette distribution.

Dans le cas de problème linéaire, on obtient les valeurs moyennes des paramètres *a posteriori*  $\vec{x}$  ainsi que les matrices de covariances sur ces paramètres *a posteriori*  $M_x$ , décrits dans le Chapitre 2 à travers les Équations 2.3 et 2.4 qui résultent de la minimisation d'une fonction de coût (fonction des moindres-carrés généralisée) :

$$\chi_{GLS}^2 = (\vec{y} - \vec{t})^T \cdot (M_E)^{-1} \cdot (\vec{y} - \vec{t}) + (\vec{x} - \vec{x}^{prior})^T \cdot (M_x^{prior})^{-1} \cdot (\vec{x} - \vec{x}^{prior}) \quad (4.6)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \vec{x}^{prior} & \text{le vecteur contenant la valeur des paramètres } a \text{ priori,} \\ M_x^{prior} & \text{la matrice de covariances associée aux paramètres } a \text{ priori,} \\ \vec{y} & \text{le vecteur contenant les valeurs expérimentales} \\ M_E & \text{la matrice de covariance expérimentale} \\ \vec{t} & \text{le vecteur contenant les valeurs théoriques correspondantes à } \vec{y} \end{cases}$$

Cependant, lors de l'utilisation de modèles non-linéaires (comme c'est le cas la plupart du temps avec les modèles de réactions nucléaires), il est possible de résoudre le problème par une méthode de Newton. CONRAD emploie cette méthode de manière itérative pour estimer la distribution des paramètres *a posteriori*. De fait, la matrice de covariances sur les paramètres *a posteriori*  $M_x^{post}$  s'écrit :

$$M_x^{post} = M_x^{(n)} = \left[ (M_x^{prior})^{-1} + G_{(n-1)}^T \cdot (M_E)^{-1} \cdot G_{(n-1)} \right]^{-1} \quad (4.7)$$

où  $M_x^{prior}$  est la matrice de covariances sur les paramètres *a priori*,  $G_{(n-1)}$  la matrice contenant les dérivées à l'itération  $(n-1)$ . De même, le vecteur contenant les paramètres *a posteriori* est donné selon :

$$\vec{x}^{(n)} = \vec{x}^{prior} + M_x^{(n)} \cdot G_{(n-1)}^T \cdot (M_E)^{-1} \cdot \left[ \vec{y} - \vec{t}_{(n-1)} - G_{(n-1)} \cdot (\vec{x}^{prior} - \vec{x}^{(n-1)}) \right] \quad (4.8)$$

Implicitement, on a  $\vec{x}^{prior} = \vec{x}^{(0)}$  et le vecteur des valeurs théoriques  $\vec{t}_{(n-1)}$  est calculé en utilisant le vecteur de paramètres  $\vec{x}^{(n-1)}$  estimé à l'itération  $(n-1)$ . Pour la première itération  $(n=1)$ , on retrouve également les Équations 2.3 et 2.4 vues dans le Chapitre 2. On suppose dans CONRAD que la convergence de l'ajustement est atteinte lorsque :

$$\frac{|\chi_{(n)}^2 - \chi_{(n-1)}^2|}{\chi_{(n-1)}^2} \leq \varepsilon_{user} \quad (4.9)$$

où  $\varepsilon^{user}$  est l'erreur relative de convergence définie par l'utilisateur et  $\chi_{(n)}^2$  est la fonction de coût à l'itération ( $n$ ) que l'on minimise dans l'ajustement et qui s'écrit dans ce cas :

$$\begin{aligned} \chi_{(n)}^2 = & \left( \vec{y} - \vec{t}_{(n)} \right)^T \cdot (M_E)^{-1} \cdot \left( \vec{y} - \vec{t}_{(n)} \right) \\ & + \left( \vec{x}^{(n)} - \vec{x}^{prior} \right)^T \cdot (M_x^{prior})^{-1} \cdot \left( \vec{x}^{(n)} - \vec{x}^{prior} \right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

### 4.1.3.3 Les Techniques de Marginalisation

En général, les mesures que l'on utilise lors du *fit* sont associées à des paramètres expérimentaux (température, normalisation, etc...), qui ne sont plus utiles après l'analyse. Ces paramètres sont appelés paramètres de nuisance puisqu'ils "disparaissent" du jeu de paramètres finaux. La marginalisation permet, dans de nombreux cas, d'absorber l'incertitude de ces paramètres de nuisance dans les paramètres de modèles de réactions nucléaires. La thèse de B. Habert [72] a permis d'implémenter deux techniques de marginalisation des paramètres de nuisance : une par Monte-Carlo [74] et une analytique [75].

#### Marginalisation par Monte-Carlo :

Cette technique est assez simple à mettre en œuvre : les paramètres de nuisance sont échantillonnés (distribution gaussienne) autour de leur valeur moyenne et l'on résout l'analyse classique (décrite dans le paragraphe précédent) un grand nombre de fois (on fait  $h$  *fits*). À la fin de chaque *fit*, on enregistre le vecteur de paramètres ajustés et la matrice de covariances associée. Quand les  $h$  *fits* sont terminés, on utilise le théorème de la covariance totale qui nous donne la covariance finale sur les paramètres de modèles.

#### Marginalisation analytique :

La marginalisation analytique suppose que l'ajustement classique (le *fit*) a déjà été fait auparavant, en utilisant la matrice de covariances expérimentale contenant seulement les incertitudes de type statistique. Les incertitudes systématiques sont donc contenues par les paramètres de nuisance qui doivent être absorbés par les paramètres de modèles. Ainsi, on sépare l'ensemble des paramètres en deux types : les paramètres ajustés et les paramètres de nuisance tels que :

$$M = \begin{pmatrix} M_x^{stat} & 0 \\ 0 & M_\theta \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

À la fin de la marginalisation, la matrice de covariances des paramètres marginalisés, ayant absorbé les paramètres de nuisance, est donnée suivant :

$$M_x^{marg} = M_x^{stat} + \left( G_x^T \cdot G_x \right)^{-1} \cdot G_x^T \cdot G_\theta \cdot M_\theta \cdot G_\theta^T \cdot G_x \cdot \left( G_x^T \cdot G_x \right)^{-1} \quad (4.12)$$

Cela suppose que la matrice  $(G_x^T \cdot G_x)$  (matrice carrée de la taille du nombre de paramètres ajustés) est inversible donc qu'il y a plus de points expérimentaux que de paramètres ajustés, ce qui généralement le cas. Cette méthode est bien plus rapide que celle par Monte-Carlo. En revanche, on peut être confronté à des problèmes d'ordre numérique lorsque des paramètres peu sensibles sont ajustés ou quand plusieurs paramètres présentent des profils de dérivées similaires (relations linéaires entre des vecteurs colonnes de  $G_x$ ).

## 4.2 Les Développements Nécessaires

Pour mener à bien ces travaux de thèse dans le but de la ré-évaluation des données nucléaires du sodium, nous avons dû prendre part à certains développements pour apporter un lots de modèles théoriques manquants dans CONRAD ainsi que de nouvelles méthodologies en terme d'analyse. Les développements, qui ont été essentiels à cette thèse, vont maintenant être présentés.

### 4.2.1 Développement/Interface de Modèles Théoriques

#### 4.2.1.1 Interface avec ECIS

Au sein de CONRAD, dans son état actuel, l'interface avec le code ECIS n'était pas bien exploitée. En effet, une classe *Parser*<sup>3</sup>, déjà codée dans le code, permettait de lire les paramétrisations des potentiels du modèle optique (et paramètres de déformation) qui sont listées dans la base de données RIPL [50]. Cependant, tous ces paramètres n'étaient en aucun cas ajustables à ce moment (on ne faisait que les utiliser en l'état) et cela empêchait donc le travail d'évaluation à haute énergie puisque ces paramètres de potentiels sont l'unique moyen d'obtenir une section efficace totale (dans le continuum) et d'y associer des incertitudes.

Tout d'abord, il a fallu créer des interfaces pour que l'utilisateur puisse librement modifier ces paramètres de potentiels et leur attribuer des incertitudes (et d'éventuelles corrélations). La Figure 4.1 montre la différence entre ce qui est donné dans la base RIPL et le fichier d'entrée pour CONRAD. On voit que seules les valeurs non nulles des paramètres de potentiel subsistent dans CONRAD tandis que l'on trouve de nombreux zéros dans la base de données RIPL. Par ailleurs, on remarque qu'il est facile d'attribuer une incertitude et un type (*Constant*, *Fitted*, etc. . .) à un paramètre en particulier dans le fichier d'entrée de CONRAD.

---

3. Classe qui permet de lire et écrire dans un certain type de format. Par exemple, il existe des *Parsers* pour les fichiers XML.

Fichier d'entrée dans RIPL-3	Fichier d'entrée pour CONRAD
<pre> 1416 A.J.Koning, J.P.Delaroche Nucl. Phys. A713, 231 (2003). Local and Global Nucleon Optical Models from 1 keV to 200 MeV. Based on detailed fits of neutron total and nucleon elastic cross sections and angular distributions with the ECISVIEW interactive code. See ref # 2405 for a global potential with same methodology.   0.001 200.0000  26  26  56  56   0  0  1  1  0   1 200.000  1.18600 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0           0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0   0.66300 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0           0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0  56.80000 0.00000+0 7.10000-3 0.00000+0 1.90000-5 0.00000+0 7.00000-9           0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0           0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 -9.42000+0 0.00000+0           0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 1.00000+0 0.00000+0   1 200.000  1.18600 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0           0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 0.00000+0 ... </pre>	<pre> [/Theory/NuclearProcess] Projectile = "Neutron" Target     = "Fe56" Reactions  = "TOTAL" [/Theory/NuclearModel] NuclearModelType = "Ecis" [/Theory/OpticalModel] OpticalModelType = "KoningDelaroche" PotentialType    = "Spherical" DispersionRelations = "Non-Dispersive" RelativisticParam = "Kinematics" [/Theory/OpticalModel/RealVolume] r_0 = 1.186 +/- 0.036 *FITTED* a_0 = 0.663 +/- 0.020 *FITTED* p_0 = 56.80 +/- 2.84 *FITTED* p_2 = 7.1E-03 p_4 = 1.9E-05 p_6 = 7.0E-09 p_17 = -9.42 [/Theory/OpticalModel/ImagVolume] p_0 = 13.0 +/- 0.65 *FITTED* p_2 = 80.0 +/- 4.0 *FITTED* [/Theory/OpticalModel/ImagSurface] r_0 = 1.282 +/- 0.038 *CONSTANT* ... </pre>

FIGURE 4.1. Exemple de fichiers d'entrée de la base RIPL et de CONRAD pour les paramètres de potentiels

Pour les sections du sodium, nous avons initialement hésité entre l'utilisation du modèle optique sphérique ou à voies couplées. Nous avons donc laissé la possibilité d'utiliser de nombreuses paramétrisations (on peut donc faire des calculs sphériques ou couplés rotationels, avec une option d'activation des relations de dispersion entre partie réelle et imaginaire du potentiel) pour qu'aucune option pour le modèle optique choisi ne soit écartée. Comme ECIS est un des rares codes à proposer des calculs par voies couplées (d'autres existent mais ECIS reste une référence en la matière), l'utilisation d'ECIS par CONRAD nous est alors apparue évidente.

Dans ce but, nous avons employé la dernière version du code ECIS (ECIS06 [69] proposé par la Agence pour l'Énergie Nucléaire) et ensuite renforcé l'interface entre ce dernier et CONRAD. Dorénavant, les sections efficaces ainsi que les coefficients de transmission transitent d'ECIS à CONRAD sans passer par des fichiers intermédiaires. Par ailleurs, le code ECIS nécessite un fichier d'entrée contenant, pour une énergie de neutron incident, les parties réelle et imaginaire de chaque composante du potentiel d'interaction (composante volumique, surfacique et spin-orbite, voir l'Équation (3.49) dans le chapitre précédent). CONRAD s'occupe, à travers une classe de sa bibliothèque, de calculer les composantes du potentiel suivant la paramétrisation choisie et d'écrire ces informations dans un fichier qui sera ensuite utilisé par ECIS, lancé à partir de CONRAD.

#### 4.2.1.2 Interface avec TALYS

Une fois l'interface entre CONRAD et ECIS optimisée, nous avons à notre disposition des sections totale, *shape elastic* et réaction, avec la dernière qui se doit d'être décomposée par des modèles statistiques décrits dans le chapitre précédent. Deux choix nous étaient alors possibles : développer nous-mêmes (à l'intérieur de CONRAD) les modèles statistiques manquants ou utiliser le code TALYS [51] qui possède déjà en son sein tous ces modèles (et bien plus encore). Le temps qu'il aurait fallu dédier pour la première option aurait retardé de manière considérable ces travaux de thèse : nous nous sommes donc penchés sur l'interfaçage entre CONRAD et TALYS (dans sa version 1.2 sortie fin 2009).

Les avantages et inconvénients, quant à l'utilisation de TALYS pour CONRAD, sont listés ci-dessous :

- ✓ Tous les calculs par modèle optique de TALYS reposent, tout comme CONRAD, sur le code ECIS.
- ✓ TALYS contient tous les modèles statistiques manquants dans CONRAD.
- ✓ Il peut produire toutes les observables qui nous intéressent pour la thèse.
- ✓ Le code est souple au niveau du fichier d'entrée
- ✗ TALYS (tout comme ECIS) produit un nombre impressionnant de fichiers de sortie, qui doivent être gérés pour l'interface avec CONRAD.
- ✗ Les calculs avec ce code sont lents (surtout avec des isotopes lourds, comme les actinides), en particulier quand débutent les calculs par Pré-Équilibre.
- ✗ Nous n'avons pas la maîtrise du code, c'est-à-dire que nous sommes tributaires des évolutions du code. De ce fait, à chaque nouvelle version de TALYS, nous devons réviser la classe d'interface avec CONRAD (c'est d'ailleurs ce qui s'est produit quand TALYS est passé de la version 1.0 à la version 1.2).

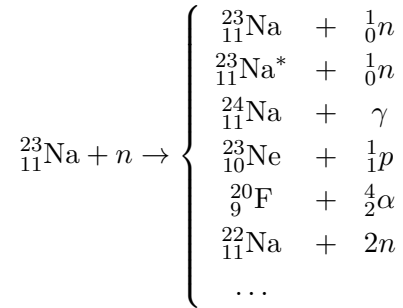
L'interface entre CONRAD et TALYS a été développée de manière analogue à celle d'ECIS. Les sections efficaces transitent ainsi entre TALYS et CONRAD (les tableaux de données sont partagés entre les deux codes) et ne sont donc pas lues à travers les différents fichiers créés en sortie par TALYS.

Une fois cette interface mise en place, il a fallu créer une gestion des différents paramètres (gestion dans le sens qu'ils sont ajustables, *i.e.* ils possèdent une valeur moyenne et une incertitude qui peuvent évoluer au cours de l'analyse) qui sont utilisés par TALYS à travers ses multiples modèles statistiques.

Nous avons décidé ainsi de créer une classe de paramètres par type de modèle statistique pour gérer :

- les paramètres liés au modèle de densité de niveau : le paramètre de densité de niveau  $a(S_n)$ , la valeur asymptotique  $\tilde{a}$ , la température nucléaire  $T$  et les paramètres d’espacement proton-neutron  $g_\pi, g_\nu$  utilisé pour calculer  $a$ .
- les paramètres liés au calcul par DWBA : ceux sont les paramètres de déformation des niveaux inélastiques collectifs d’un noyau pair.
- les paramètres liés à la *Giant Dipole Resonance* : on y trouve les forces  $\sigma_{X_\ell}$ , les énergies  $E_{X_\ell}$  et les largeurs  $\Gamma_{X_\ell}$  de la résonance géante ainsi que les largeurs radiatives moyennes  $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ .
- les autres paramètres (il n’est pas prévu de les utiliser dans CONRAD pour le moment) : les paramètres qui contrôlent le Pré-Équilibre dans TALYS ainsi que les paramètres qui permettent de re-normaliser les potentiels des modèles optiques pour les particules chargées.

On rappelle que tous ces paramètres sont propres à un isotope en particulier. Or, à des énergies de neutrons importantes, des éléments autres que le sodium vont être créés :



Ainsi, la ré-évaluation du sodium requiert non-seulement les paramètres de modèles statistiques du  ${}^{23}\text{Na}$ , mais également ceux du  ${}^{24}\text{Na}$ ,  ${}^{23}\text{Ne}$ ,  ${}^{20}\text{F}$  et  ${}^{22}\text{Na}$  (et d’autres si l’énergie incidente est suffisante).

Les interfaces avec les codes ECIS et TALYS ont été validées par rapport à la version *stand-alone* (version “nue” où le code est compilé et lancé en externe) en Annexe C, dans laquelle on montre que le calcul via CONRAD fonctionne correctement, quelle que soit l’isotope et la paramétrisation du potentiel choisie (sphérique, rotationnel avec ou sans les relations de dispersion). On expose également dans cette Annexe les calculs effectués avec TALYS en passant par CONRAD correspondent exactement aux calculs réalisés avec TALYS seul.

### 4.2.1.3 Modèle Optique Sphérique

Au cours de ces travaux de développement et après quelques essais sur le sodium, nous sommes aperçus que l'utilisation d'un modèle rotationnel pour l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  ne permettait pas de reproduire de manière satisfaisante les données expérimentales pour la section totale, alors qu'un modèle sphérique (avec relations de dispersion) permet d'obtenir de bons accords avec les mesures (voir Chapitre suivant).

Enfin, sachant que le *multithread* n'est pas facile à mettre en place avec des routines FORTRAN comme ECIS, nous avons préféré développer notre propre modèle optique sphérique, basé sur le code SCAT2000 écrit par O. Bersillon [47]. Cela nous permet donc d'employer le *multithreading* pour gagner un temps précieux par la suite lors des analyses.

Tout comme ECIS et TALYS, le modèle développé au sein de CONRAD est comparé à SCAT2000 afin de le valider (*cf.* Annexe C) sur des cas sphériques de référence (avec et sans relations de dispersion).

### 4.2.1.4 Sections Inélastiques dans le RRR

Le sodium étant un élément léger, on est capable de mesurer des structures résonnantes très importantes jusqu'à plusieurs MeV sur les sections efficaces (on renvoie le lecteur au Chapitre 1 aux Figures 1.3, 1.6 et 1.10). Or, le seuil inélastique du sodium démarrant vers 460 keV, les mesures de section efficace inélastique sont par conséquent très marquées par ces résonances à haute énergie.

Les modèles de la matrice- $R$  dans CONRAD (Multi-Level et Reich-Moore) ne traitaient pas à l'époque les voies inélastiques (en effet, seules les sections efficaces totale, élastique, de fission et de capture radiative étaient prises en compte). Tout d'abord, il a fallu développer des classes qui permettaient de gérer les largeurs partielles inélastiques (qui peuvent être nombreuses le cas échéant si le nombre de niveaux inélastiques considérés est important).

Dans le cas du sodium, le niveau fondamental possède un spin  $3/2+$  et le 1<sup>er</sup> niveau excité est un  $5/2+$ . Si l'on reprend les moments orbitaux totaux  $J^\pi$  possibles détaillés dans la Table 3.2, on obtient les correspondances des voies de sortie listées dans la Table 4.1. Afin de couvrir tous les  $J^\pi$  proposés par les voies d'entrée, il est nécessaire d'augmenter le moment orbital  $\ell$  des neutrons des voies de sortie inélastiques (Pour le 1<sup>er</sup> niveau excité, on a  $\ell = 3$  tandis que  $\ell = 2$  pour le fondamental).

On s'aperçoit alors qu'il existe, pour un même  $J^\pi$ , plusieurs voies inélastiques avec des  $\ell$  différents. Cela a des conséquences importantes : supposons par exemple que nous ayons

une résonance avec  $\ell = 2$  et  $J^\pi = 2^+$  (onde  $d$ ), nous aurons comme largeurs partielles :

- une largeur radiative de capture  $\Gamma_\gamma$  ;
- une largeur neutronique  $\Gamma_n$ . En théorie, on aurait 3 largeurs neutroniques : une pour la voie avec  $\ell = 0$  et 2 pour les voies avec  $\ell = 2$  (une avec  $s = 2$  et une avec  $s = 3$ ). En fait, le spin de voie  $s$  est indiscernable ce qui induit une équiprobabilité pour les voies  $\ell = 2$  et donc une seule largeur. Par contre, la voie  $\ell = 0$  n'est pas prise en compte dans le format ENDF-6 [6], *i.e.* la largeur associée est nulle (en théorie, on pourrait avoir une valeur non nulle pour cette voie car cette dernière est ouverte).
- deux largeurs neutroniques inélastiques :  $\Gamma_{n',\ell=0}$  pour la voie inélastique avec  $\ell = 0$  et  $\Gamma_{n',\ell=2}$  pour les deux voies inélastiques avec  $\ell = 2$  (équiprobabilité du spin de voie).

La théorie de la matrice- $R$  n'utilise pas les largeurs physiques mais les amplitudes qui leur sont associées. Pour l'amplitude neutronique d'une résonance à une  $E_\lambda$  de moment  $\ell$ , on rappelle qu'on a la relation suivante (*cf.* Équation (3.31) du Chapitre précédent) :

$$\gamma_{\lambda n} = \sqrt{\frac{\Gamma_{\lambda n}}{2 \cdot P_\ell(E_\lambda)}} \quad (4.13)$$

Pour les amplitudes neutroniques inélastiques (liées à une voie inélastique de moment  $\ell'$ ), cela devient :

$$\gamma_{\lambda(n',\ell')} = \sqrt{\frac{\Gamma_{\lambda(n',\ell')}}{2 \cdot P_{\ell'}(E_\lambda - E^*)}} \quad (4.14)$$

où  $E^*$  est l'énergie du seuil inélastique dans le système du centre de masse. L'Équation (4.14) nous montre qu'il est d'autant plus légitime qu'il y ait plusieurs largeurs inélastiques pour des  $\ell$  différents, puisque les amplitudes associées seront très différentes au final à cause du facteur de pénétrabilité  $P_{\ell'}$  (qui dépend du moment  $\ell'$  de la voie).

L'ajout des voies inélastiques s'inscrit naturellement dans les approximations de la matrice- $R$  décrites auparavant. Ainsi, dans l'approximation de Reich-Moore, la matrice- $R$  (pour une voie d'entrée neutron  $c = n$  et pour une voie de sortie  $c' = n'$ ) s'écrit :

$$R_{n,n'} = \sum_\lambda \frac{\gamma_{\lambda n} \gamma_{\lambda n'}}{E_\lambda - E - i \frac{\Gamma_{\lambda n}}{2}} \quad (4.15)$$

Pour calculer la section efficace inélastique d'un niveau inélastique  $i$ , on emploie la matrice de collision  $\mathbf{U}$  (la formule pour la matrice est inchangée par rapport au précédent chapitre) selon :

$$\sigma_{n,n'_i} = \frac{\pi}{k^2} \sum_J g_J \sum_c^{\forall \text{ voies d'entrée}} \sum_{c'}^{\forall \text{ voies } \in \text{ inél. } i} |U_{cc'}|^2 \quad (4.16)$$



Ces ajouts théoriques ont été implémentés dans CONRAD et validés à l'aide du code SAMMY, qui permet ce genre de calcul, validation que l'on trouve en Annexe C. De même, les dérivées analytiques aux largeurs inélastiques, nécessaires lors de l'ajustement, y sont également testées.

$J^\pi$	Voies de sortie		$J^\pi$	Voies de sortie	
	Voies quantiques	Niveau		Voies quantiques	Niveau
$0^-$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 1)$	Fond.	$0^+$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau
$1^-$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 1)$	Fond.	$1^+$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 0, s = 1)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 2)$	Fond.		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau
$2^-$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 1)$	Fond.	$2^+$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 0, s = 2)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 2)$	Fond.		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 0, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau
$3^-$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 2)$	Fond.	$3^+$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	Fond.
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 1, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 0, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 3, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau		$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau
$4^+$	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	Fond.			
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 2)$	1 <sup>er</sup> niveau			
	$n + {}^{23}_{11}\text{Na} (\ell = 2, s = 3)$	1 <sup>er</sup> niveau			

TABLE 4.1. Correspondance des voies de sortie en fonction du moment orbital  $J^\pi$  pour le sodium, pour son niveau fondamental et son 1<sup>er</sup> niveau excité

#### 4.2.1.5 Mesures de Distributions Angulaires

Des mesures à haute résolution de distributions angulaires élastiques sont disponibles dans la base de données EXFOR, pour le sodium en particulier. Il nous est apparu important de pouvoir les prendre en compte lors du processus d'évaluation, *i.e.* de réaliser un ajustement contenant simultanément des mesures de section efficace intégrée en angle (en barns) et des

mesures de sections différentielles (généralement en barns/sr).

Pour cela, nous avons intégré la théorie de Blatt-Biedenharn (page 3.2.2 au dernier Chapitre) dans CONRAD (ces ajouts ont été une nouvelle fois validés avec le code SAMMY et les résultats de ces comparaisons sont fournis en Annexe C) dans le formalisme de Reich-Moore.

Le code TALYS, interfacé avec CONRAD, calcule déjà les coefficients des polynômes de Legendre pour une réaction donnée. Il suffit donc à CONRAD de reprendre ces données comme il le fait pour les sections efficaces dans le continuum.

Les mesures des sections différentielles sont détaillées à un angle de sortie fixé  $\theta_0$ , c'est-à-dire que nous avons à notre disposition des mesures de  $\left(\frac{d\sigma(E)}{d\Omega}\right)_{\theta=\theta_0}$ . Une classe d'interface a été créée dans CONRAD pour prendre en compte ces mesures où l'utilisateur précise l'angle (dans le système du laboratoire ou du CM) dans lequel a été réalisée la mesure.

## 4.2.2 L'Assimilation d'Expériences Intégrales

Pendant longtemps, il était relativement difficile de prendre directement en compte les expériences de type intégral lors du processus l'évaluation. En effet, le fichier d'évaluation était généralement basé uniquement sur les expériences dites microscopiques (mesures de sections efficaces intégrées ou différentielles) quand ces dernières étaient disponibles puis les physiciens des réacteurs fournissaient leurs "retours" (ou *feedbacks*) sur cette évaluation en la comparant à des mesures intégrales ( $k_{\text{eff}}$ , coefficients de température/vidange, taux de réaction, etc...). À partir de ces retours, l'évaluateur pouvait alors modifier les paramètres de modèles (ou directement les sections efficaces) afin de trouver un compromis entre expériences microscopiques et intégrales.

Le LEPH est un laboratoire travaillant à la fois sur l'évaluation des données nucléaires (avec le projet européen JEFF) et sur l'application de ces données dans les calculs en réacteurs. Il était donc indispensable de développer des méthodes (méthodes que nous appelons au LEPH *Integral Data Assimilation* ou IDA, qui sont illustrées par des graphes dans la suite) pour intégrer plus tôt l'information des expériences intégrales dans les évaluations.

### 4.2.2.1 Méthode "low fidelity"

Dans la thèse de B. Habert [72], une première méthode d'assimilation de données intégrales a permis de créer une connexion directe entre mesures intégrales et paramètres de modèles de réactions nucléaires. Cette méthode utilise, à juste titre, le même processus d'ajustement développé dans les Équations 4.7 et 4.8 avec quelques modifications.

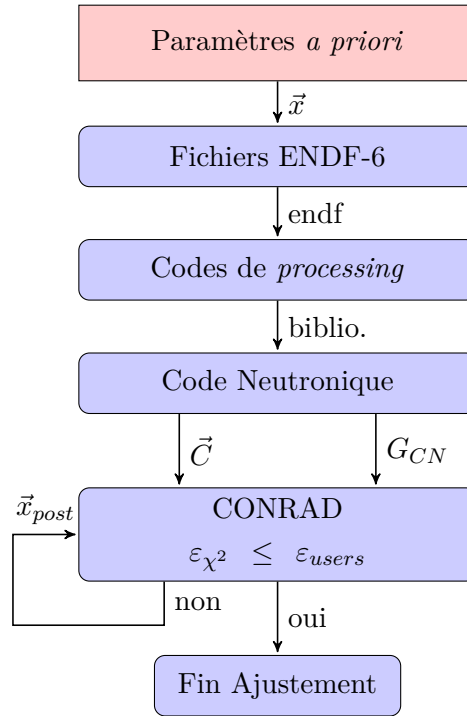


FIGURE 4.2: L'Assimilation de Données Intégrales (IDA) avec la méthode "low fidelity"

Tout d'abord, le vecteur  $\vec{y} = \vec{E}$  contient dorénavant les valeurs des mesures intégrales.  $M_E$  devient la matrice de covariances associée à ces expériences intégrales. Ensuite, le vecteur  $\vec{t} = \vec{C}$  contient les valeurs calculées (avec un code de neutronique la plupart du temps) à partir du jeu de paramètres de modèles  $\vec{x}$  (en passant par la création d'un fichier ENDF contenant les données nucléaires calculées avec  $\vec{x}$ ). Enfin, la matrice  $G$  contient les dérivées des valeurs intégrales, calculées aux paramètres de modèles, telles que  $G_{i,j} = \frac{\partial C_i}{\partial x_j}$ .

On voit là apparaître plusieurs difficultés pour la mise en place de l'IDA :

- Le module d'ajustement de CONRAD est itératif ce qui implique une mise à jour du vecteur de valeurs calculées  $\vec{C}_{(n)}$  et de la matrice de dérivées associées  $G_{(n)}$  à chaque itération ( $n$ ).
- L'estimation de la matrice de dérivées est très délicate, puisque on a du mal à appréhender l'impact d'un paramètre de modèle sur un calcul neutronique.

B. Habert, dans sa méthode (cf. Figure 4.2), décompose cette matrice  $G_{(n)}$  (à l'itération ( $n$ ) de l'ajustement) en deux composantes suivant :

$$G_{(n)} = G_{CN} \cdot (G_{\bar{\sigma}})_{(n)} \quad (4.17)$$

où  $G_{CN} = \frac{\partial C}{\partial \bar{\sigma}}$  est la matrice contenant les dérivées (ou sensibilités) des valeurs intégrales

aux sections multigroupes et  $(G_{\bar{\sigma}})_{(n)}$  est la matrice des dérivées des sections multigroupes aux paramètres de modèles. Avec cette méthode, on suppose que  $G_{CN}$  reste constante pour des faibles variations des sections multigroupes.  $(G_{\bar{\sigma}})_{(n)}$  est mise à jour à chaque itération puisqu'elle est calculée par CONRAD. Pour mettre à jour les valeurs calculées, on utilise :

$$\vec{C}_{(n)} = \vec{C}_{(0)} + (G_{\bar{\sigma}})_{(n)} \cdot (\vec{x}^{(n)} - \vec{x}^{(0)}) \quad (4.18)$$

avec  $\vec{C}_{(0)}$  le vecteur des valeurs intégrales avant l'ajustement, qui s'appuie sur le vecteur de paramètres *a priori*  $\vec{x}^{(0)}$ .

Le gros avantage de cette méthode est sa simplicité d'application : l'utilisateur doit seulement introduire les valeurs calculées  $\vec{C}_{(0)}$  par un code de transport neutronique et la matrice de sensibilités  $G_{CN}$  calculée à l'aide de modules de perturbations généralement fournis avec les codes déterministes.

Cette méthode, dite "low fidelity", s'appuie cependant sur plusieurs hypothèses :

- On suppose que  $\vec{C}_{(0)}$  et  $G_{(n)}$  varient linéairement par une modification des paramètres de modèles.
- Seules les sections efficaces sont prises en compte dans ce processus. Or, dans le continuum en particulier, les paramètres de modèles ont un impact non seulement sur les sections efficaces mais aussi sur les distributions angulaires/énergétiques, qui auront bien évidemment un poids dans les valeurs intégrales calculées.
- Les effets de l'autoprotection et de la dilution dans le calcul des sensibilités sont négligés. En effet, on calcule en fait  $G_{CN} = \partial C / \partial \tilde{\sigma}$  dans les codes déterministes où  $\tilde{\sigma}$  est la section efficace multigroupe autoprotégée à une certaine section de dilution tandis que dans CONRAD, on calcule  $\bar{\sigma}$  qui est la section multigroupe non-autoprotégée à dilution infinie. Par ailleurs, il est important de noter que l'autoprotection se fait à l'aide des tables de probabilités et non des sections efficaces dans certains codes, en particulier dans le domaine non-résolu.

Malgré ces inconvénients, la méthode "low fidelity" fonctionne relativement bien comme cela est démontré dans la référence [76]. Nous avons vu, au cours du Chapitre 2, que les distributions angulaires avaient une importance non-négligeable sur les calculs de vidange. C'est pourquoi nous avons développé deux autres méthodes, détaillées ci-dessous, pour l'assimilation de données intégrales.

## 4.2.2.2 Méthode “brute force”

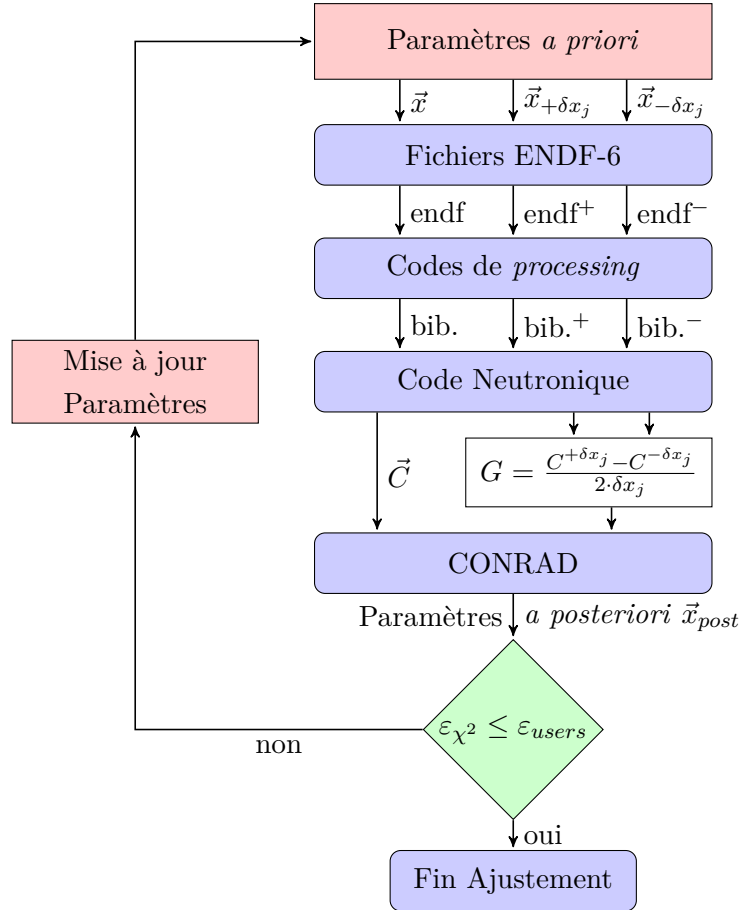


FIGURE 4.3. L'Assimilation de Données Intégrales (IDA) avec la méthode “brute force” (ou méthode de référence)

La méthode “brute force” est ici celle qui nous sert de référence, dans le sens où aucune approximation n'est faite. Nous définissons au préalable  $N_x$  comme le nombre de paramètres de modèles contenus dans le vecteur  $\vec{x}$  et  $N_E$  comme le nombre d'expériences intégrales à calculer (taille du vecteur  $\vec{C}$ ). Dans cette méthode (cf. Figure 4.3), on crée  $(2N_x + 1)$  évaluations différentes de l'isotope considéré.

La première évaluation est basée sur le jeu de paramètres  $\vec{x}$  et celle-ci est utilisée pour évaluer  $\vec{C}$ . Ensuite, à chaque paramètre  $x_j$  de  $\vec{x}$ , on crée deux évaluations basées respectivement sur les jeux de paramètres  $\vec{x}_{+\delta x_j} = \{x_0, \dots, x_j + \delta x_j, \dots, x_{N_x}\}$  et  $\vec{x}_{-\delta x_j} = \{x_0, \dots, x_j - \delta x_j, \dots, x_{N_x}\}$ . À partir des vecteurs de paramètres  $\vec{x}_{+\delta x_j}$  et  $\vec{x}_{-\delta x_j}$ , on peut calculer  $\vec{C}^{+\delta x_j}$  et  $\vec{C}^{-\delta x_j}$ . De cette manière, les termes de la matrice de dérivées  $G$  peuvent

s'écrire comme :

$$G_{(n)}(i, j) = \left( \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right)_{(n)} \simeq \left( \frac{C_i^{+\delta x_j} - C_i^{-\delta x_j}}{2\delta x_j} \right)_{(n)} \quad (4.19)$$

Cette méthode a le gros inconvénient du temps puisque l'utilisateur se doit d'effectuer  $(2N_x + 1) \cdot N_E$  calculs avec un code de transport neutronique. Cependant, on voit que les dérivées calculées sont exactes (la perturbation induite par un paramètre est estimée à l'approximation de l'Équation (4.19), qui est du second ordre, près) et qu'il est possible d'appliquer cette méthode à la fois pour des codes déterministes et des codes stochastiques (à condition, dans ce dernier cas, que l'écart  $(C_i^{+\delta x_j} - C_i^{-\delta x_j})$  soit supérieur à l'incertitude statistique).

À chaque itération de la procédure d'ajustement, il est nécessaire de re-calculer  $\vec{C}$  et  $G$  par le biais de cette méthode. Une classe d'interface a été mise en place pour accueillir ces informations étape par étape au cours de l'ajustement.

La méthode présentée ci-dessus ne convient guère lorsque le nombre de paramètres ajustés  $N_x$  ou le nombre de valeur à calculer  $N_E$  est trop élevé. Mais elle a l'avantage de valider, si besoin est, les autres méthodes d'IDA.

#### 4.2.2.3 Méthode "coupled"

On peut voir d'une part, que la méthode "brute force" exige des temps de calcul très longs. D'autre part, la méthode "low fidelity" n'est pas adaptée pour un certain nombre de cas. Ainsi, la méthode "coupled", détaillée sur la Figure 4.4, essaie de combiner les avantages des deux précédentes techniques d'IDA. Ici, on décompose la matrice de dérivées  $G$ , à la  $n^e$  itération, sous forme de deux matrices :

$$G_{(n)} = G_{CN}^{(n)} \cdot G_{njoy}^{(n)} \quad (4.20)$$

où  $G_{CN}^{(n)}$  est la matrice de dérivées/sensibilités calculée par un code déterministe à l'itération  $(n)$  de l'ajustement. Pour  $G_{njoy}^{(n)}$ , on crée, comme auparavant,  $(2N_x + 1)$  évaluations de l'isotope étudié, qui vont être *processées* (ou transformées en bibliothèques d'application<sup>4</sup>, *i.e.* en ECCOLIB pour le code ERANOS [21], en APOLIB pour le code APOLLO [78], etc...) afin d'obtenir, des sections multigroupes  $\sigma_g$  (et matrices de diffusion) pour le code

4. Le *processing* est une phase importante pour les fichiers d'évaluation. Elle consiste à transformer, selon le besoin d'un code, les évaluations sous forme de fichier ENDF en bibliothèques applicatives binaires. Cette transformation nécessite une série de codes dits de *processing*, dont NJOY [77] qui est le plus connu et le plus utilisé.

déterministe employé pour  $G_{CN}$ . On peut donc écrire  $G_{njoy}^{(n)}$  telle que :

$$G_{njoy}^{(n)}(i, j) = \left( \frac{\partial (\sigma_g)_i}{\partial x_j} \right)_{(n)} \simeq \left( \frac{(\sigma_g)_i^{+\delta x_j} - (\sigma_g)_i^{-\delta x_j}}{2\delta x_j} \right)_{(n)} \quad (4.21)$$

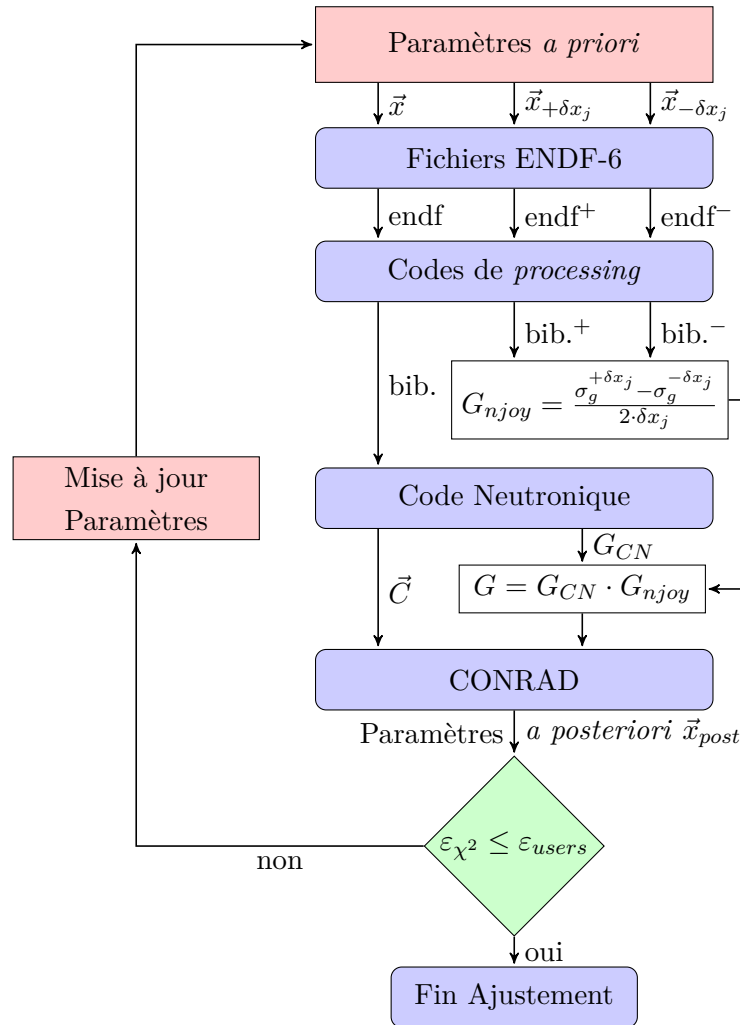


FIGURE 4.4: L'Assimilation de Données Intégrales (IDA) avec la méthode "coupled"

Cette méthode combine une partie de la rapidité de la méthode "low fidelity" (les calculs de *processing* se font en des temps bien moindres que des calculs de neutronique) et permet de faire moins d'approximations. En effet, comme pour la méthode "brute force", le vecteur  $\vec{C}$  et la matrice  $G$  doivent être recalculés. Les problèmes liés à l'autoprotection et à la dilution sont cependant toujours présents, même s'il est possible dans le *processing* de fournir une section de dilution.

Par ailleurs, si le code de neutronique possède des outils de perturbation performants, il est même envisageable d'avoir des dérivées aux matrices de sections de diffusion (qui sont une combinaison des sections efficaces et des distributions angulo-énergétiques) qui permettent d'avoir des informations relatives à l'anisotropie.

#### 4.2.2.4 Conclusion sur les Méthodes IDA

Les trois méthodes pour l'Assimilation des Données Intégrales (IDA) présentées ont l'avantage de fonctionner pour tous les types de paramètres (paramètres de résonances, du non-résolu, du modèle optique et statistiques) et pour un grand nombre d'expériences intégrales. Il faut néanmoins être très prudent dans l'utilisation de ces techniques.

Tout d'abord, les expériences intégrales sélectionnées doivent être dédiées à l'isotope étudié, *i.e.* elles doivent être très sensibles aux données nucléaires de l'élément.

De plus, il n'est pas conseillé de traiter à la fois des expériences microscopiques et des expériences intégrales. En effet, le poids des mesures microscopiques est généralement bien plus important dans le  $\chi^2$  (*cf.* Équation (4.10)) que la contribution intégrale. Ainsi, nous proposons de traiter l'analyse en deux temps : (1) on contraint les paramètres *a priori* à l'aide des expériences microscopiques, (2) les paramètres obtenus *a posteriori* après l'analyse (et marginalisation) des mesures microscopiques sont utilisés comme *prior* pour l'analyse des données intégrales.

L'assimilation de données intégrales a notamment été testée par G. Palmiotti dans la Référence [79]. Une description des méthodes (présentées plus haut), accompagnée d'un exemple d'application, est explicitée dans la Référence [80]. Des applications concrètes et réussies de ces méthodes sont disponibles :

- pour le  $^{23}\text{Na}$  [81] où les paramètres de potentiel du modèle optique sont ajustés sur des expériences de vidange du sodium ;
- pour les premières résonances du  $^{155}\text{Gd}$  [82] avec des expériences d'oscillation réalisées dans le réacteur MINERVE [83] ;
- pour les produits de fission du  $^{143}\text{Nd}$  (résonance négative) et du  $^{149}\text{Sm}$  (première résonance positive) [84] également à partir des expériences dans MINERVE.

Enfin, l'utilisation de l'IDA pour une révision de l'évaluation (dans le domaine des résonances résolues) de  $^{241}\text{Am}$  est actuellement en phase d'essai dans le laboratoire et les résultats préliminaires semblent conforter les méthodes implantées dans CONRAD.





# Évaluation des Sections Efficaces Neutroniques du Sodium avec les Mesures Microscopiques

---

## Sommaire

<b>5.1</b>	<b>Évaluation dans le Domaine des Résonances Résolues . . . . .</b>	<b>118</b>
5.1.1	Les Données Expérimentales . . . . .	118
5.1.2	Corrections Expérimentales . . . . .	120
5.1.3	Analyse des Résonances . . . . .	122
5.1.4	Résultats sur les Sections Efficaces . . . . .	125
5.1.5	Covariances sur les Sections Efficaces . . . . .	130
5.1.6	Sections Efficaces Différentielles . . . . .	134
<b>5.2</b>	<b>Évaluation dans le Continuüm . . . . .</b>	<b>136</b>
5.2.1	Les Données Expérimentales . . . . .	136
5.2.2	Analyse des Mesures et Résultats . . . . .	137
5.2.3	Covariances sur les Sections Efficaces . . . . .	144
<b>5.3</b>	<b>Conclusion sur l'Évaluation avec les Données Microscopiques . . . .</b>	<b>148</b>

---

Dans ce Chapitre, nous présentons les résultats de l'évaluation des sections efficaces neutroniques du  $^{23}\text{Na}$ , qui tiennent compte uniquement des mesures microscopiques. Au Chapitre suivant, on montrera le comportement de l'évaluation obtenue ici sur les calculs intégraux (analyse de configurations de vidange du sodium).

Notre analyse est décomposée suivant deux domaines, le domaine des Résonances Résolues et le domaine du continuüm, qui font chacun l'objet d'une étude spécifique dans cette partie. Mais avant d'exposer les résultats pour ces domaines, nous souhaitons présenter le schéma de calcul qui a été utilisé avec CONRAD pour l'analyse et la propagation des incertitudes expérimentales.

Pour chaque domaine énergétique étudié, nous avons procédé en deux étapes pour réaliser cette évaluation :

1. on analyse les données expérimentales afin de trouver les valeurs moyennes des paramètres (on essaie d'obtenir le meilleur accord entre les valeurs théoriques et expérimentales à l'aide de l'ajustement) ;
2. une fois l'ajustement effectué, on propage les incertitudes expérimentales de type systématique sur les paramètres de modèles par des techniques de marginalisation (soit analytique, soit par Monte Carlo). On construit ainsi la matrice de covariances sur les paramètres sans modifier leur valeur moyenne.

## 5.1 Évaluation dans le Domaine des Résonances Résolues

### 5.1.1 Les Données Expérimentales

Nous avons à notre disposition plusieurs mesures de section totale qui sont triées par ordre chronologique dans la Table 5.1.

Auteur	Date de mesure	Énergie Min	-	Énergie Max
J.E. Lynn [85]	1958	590 eV	-	19 keV
F. Rahn [86]	1965	87 eV	-	17 keV
A. Langsford [87]	1965	179 keV	-	120 MeV
S. Cierjacks [12]	1969	288 keV	-	32 MeV
J.C. Clement [88]	1971	650 keV	-	45 MeV
D.C. Larson [11]	1976	32 keV	-	37 MeV

TABLE 5.1. *Liste des principales mesures de section efficace totale pour le sodium en-dessous de 2 MeV*

Les données de Larson [11] présente une excellente résolution, comparées aux autres mesures (celles de Cierjacks [12] possèdent également une bonne résolution mais semblent comporter une erreur systématique de normalisation). Nous avons donc choisi cette mesure pour l'analyse des résonances (on utilisera également cette dernière pour le domaine du continuum). On peut remarquer que les données de Larson ne commencent qu'à partir de 32 keV. La première résonance (la très large à 2.8 keV) ne peut pas être analysée avec ces données et nous avons utilisé les valeurs de Rahn [86] pour l'analyse entre 100 eV et 15 keV.

Les mesures de section de capture sont presque inexistantes (très peu de points de mesure avec souvent des incertitudes expérimentales importantes), et nous négligerons cette section pour l'analyse des résonances. Par contre, plusieurs mesures de capture au point thermique ( $E_n = 25$  meV) sont présentes dans EXFOR et nous serviront pour ajuster correctement la résonance négative du sodium. Par ailleurs, on s'inspirera aussi des informations présentes dans le "barn book" de Mughabghab [9] pour le point thermique.

La section efficace inélastique pour le premier niveau excité s'ouvre autour de 459 keV (le second niveau débute bien plus tard, à partir de 2.17 MeV). Sur EXFOR, deux mesures avec une bonne résolution sont disponibles :

- F.G. Perey [14], réalisée en 1971, de 459 keV à 2.17 MeV.
- S. Kopecky [89, 13], mesurée en 1994 et publiée en 1997, débute à partir du seuil et s'étend jusqu'à 2 MeV.

On préfère utiliser la mesure de Kopecky [13] qui offre une meilleure résolution que celle de Perey [14]. Au-delà de 2 MeV, il n'existe plus de mesure à haute résolution pour les sections partielles (niveaux inélastiques surtout), ce qui nous empêche d'étendre l'analyse des résonances après cette énergie. Cela est regrettable puisque les mesures de la section totale de Larson montrent des structures résonantes encore très importantes jusqu'à presque 5 MeV.

Nous allons ainsi étendre le domaine résolu de notre évaluation à 2 MeV, alors qu'il s'arrêtait à 350 keV dans l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1 et à 500 keV dans ENDF/B-VII.0.

Dans le Chapitre précédent, nous avons développé des outils dans CONRAD afin d'analyser des mesures de sections différentielles (en barns/sr). Dans EXFOR, on trouve deux mesures de sections efficaces différentielles (ou distributions angulaires) pour la réaction élastique :

- Mesures de W.E. Kinney [15] en 1976 qui s'étendent de 550 keV à 2 MeV pour les angles (dans le CM)  $\theta_{CM} = [25^\circ, 41^\circ, 57^\circ, 92^\circ, 127^\circ, 142^\circ, 156^\circ]$ .
- Mesures de S. Kopecky [89, 13] réalisées en 1997, qui s'étendent de 311 keV à 2 MeV, pour les angles (dans le lab.)  $\theta_{lab} = [24^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 78^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 137^\circ, 150^\circ]$ .

L'analyse des distributions angulaires est délicate puisque des interférences, entre des résonances avec des spins différents, apparaissent d'après la théorie de la matrice- $R$ . Ainsi, l'objectif de notre analyse des résonances porte en premier lieu sur l'obtention d'un bon accord avec les mesures de sections intégrées. Nous essayerons ensuite d'avoir un accord correct avec les distributions angulaires tout en restant cohérent avec ce que nous permettent les mesures des sections efficaces intégrées.

### 5.1.2 Corrections Expérimentales

Plusieurs corrections expérimentales doivent être prises en compte pour l'analyse de résonances. En premier lieu, on doit mentionner les corrections liés à l'effet Doppler, puisque les expériences de mesure sont généralement réalisées à température ambiante. Ensuite, il faut également citer les effets dus à la fonction de résolution.

#### 5.1.2.1 L'Effet Doppler

Les sections efficaces que l'on estime à partir des modèles théoriques, sont calculées pour des noyaux cibles immobiles, *i.e.* sans agitation thermique. Or, dans le laboratoire où est réalisée la mesure, les noyaux contenus dans cette cible sont soumis à une agitation thermique et sont en mouvement autour de leur position d'équilibre. Dans le centre de masse, l'énergie disponible va donc fluctuer et cela a des répercutions sur les sections efficaces, particulièrement pour les résonances. Cet effet de déplacement du noyau cible par rapport au neutron est appelé "effet Doppler" qui a pour conséquences d'élargir les sections efficaces théoriques (qui sont non-élargies) au niveau des résonances et d'atténuer leur amplitudes.

On obtient les sections efficaces élargies par effet Doppler  $\sigma_D$  en convoluant les sections efficaces non-élargies  $\sigma$  avec une fonction de transfert  $S$  (fonction qui contient toutes les informations relatives à la dynamique dans le noyau et aux processus de diffusion du neutron) :

$$\sigma_D(E) = \int_0^{+\infty} S(E', E) \cdot \sigma(E') dE' \quad (5.1)$$

où  $E'$  est l'énergie transférée au noyau cible et  $E$  est l'énergie incidente du neutron.

Il existe plusieurs modèles pour décrire la fonction de transfert, notamment le *Crystal Lattice Model* et le *Free Gas Model* [90]. Dans CONRAD pour le cas du sodium, nous utiliserons ce dernier modèle, qui permet de décrire l'effet Doppler par un noyau libre dans un gaz parfait monoatomique. La fonction de transfert  $S(E', E)$  s'écrit dans ce cas :

$$S_{FGM}(E', E) = \frac{1}{\Delta\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{E'}{E}} \cdot \left\{ \exp \left[ -4 \left( \frac{E - \sqrt{EE'}}{\Delta} \right)^2 \right] - \exp \left[ -4 \left( \frac{E + \sqrt{EE'}}{\Delta} \right)^2 \right] \right\} \quad (5.2)$$

avec  $\Delta$ , la largeur dite Doppler :

$$\Delta = \sqrt{\frac{4k_B T_{eff}}{A} \cdot E} \quad (5.3)$$

où  $A$  la masse du noyau cible,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T_{eff}$  est la température dite effective dont l'expression approchée couramment utilisée est,  $T_{eff} \simeq \frac{3}{8}\theta_D \coth\left(\frac{3}{8}\theta_D/T\right)$ .  $T$  est la température de l'échantillon employé pour la mesure et  $\theta_D$  est la température de Debye. Pour des mesures réalisées à température ambiante, le *Free Gas Model*, dans l'Équation (5.2), est considéré comme une très bonne alternative pour décrire l'élargissement Doppler des résonances. À noter que le *Crystal Lattice Model* fournit des résultats similaires à température ambiante mais il est bien meilleur à des températures inférieures<sup>1</sup> puisque ce dernier prend en compte les effets de vibration du réseau cristallin.

### 5.1.2.2 La Fonction de Résolution

Indépendamment de l'effet Doppler décrit plus haut, l'élargissement dû à la résolution de la mesure est également à prendre en compte. En effet, une majorité des mesures sont réalisées par technique de temps de vol (*Time Of Flight* ou *ToF*). Le temps de vol du neutron possède une distribution en temps (ou en distance par équivalence) appelée fonction de résolution, qui change d'une base expérimentale à une autre. Tout comme l'effet Doppler, la grandeur mesurée  $A_{exp}$  (section efficace, transmission, rendements de capture) résulte de la convolution de la grandeur réelle  $A_{reelle}$  (non affectée par la résolution) par la résolution expérimentale  $R$  :

$$A_{exp}(E) = \int_0^{+\infty} A_{reelle}(E') \cdot R(E, E') dE' \quad (5.4)$$

La résolution expérimentale  $R(E, E')$  est elle-même le produit de convolution de différentes contributions :

- la largeur d'impulsion du faisceau d'électrons et de la cible ;
- le modérateur ;
- le détecteur ;
- la largeur des canaux expérimentaux ;
- ...

Dans CONRAD, une fonction de résolution pour simuler la distribution en temps du modérateur est disponible et peut être utilisée.

### 5.1.2.3 Corrections Expérimentales dans le Cas du Sodium

Suite aux corrections expérimentales décrites précédemment, la largeur totale observée pour une résonance  $\Gamma_{obs}$  est donc la largeur naturelle théorique  $\Gamma_{tot}$ , à laquelle il faut ajouter une largeur due à l'effet Doppler  $\Gamma_{dop}$  et une largeur due à la fonction de résolution

1. Pour des mesures réalisées par exemple avec un refroidissement à l'azote liquide, où  $T = 77^\circ\text{K}$ .

$\Gamma_{res}$ . Habituellement, on approxime la valeur de la largeur observée  $\Gamma_{obs}$  comme la somme quadratique de toutes les contributions :

$$\Gamma_{obs}^2 \simeq \Gamma_{tot}^2 + \Gamma_{dop}^2 + \Gamma_{res}^2 \quad (5.5)$$

Dans notre cas, les résonances du  $^{23}\text{Na}$  sont fort heureusement très larges (*i.e.* les  $\Gamma_{tot}$  sont souvent supérieures au keV, voire au MeV) ce qui fait que l'effet Doppler ou la fonction de résolution n'ont, en pratique, pas ou peu d'influence. Seules quelques résonances isolées sont concernées, au moins par l'effet Doppler, pour notre étude et seront traitées avec ces corrections expérimentales.

### 5.1.3 Analyse des Résonances

Nous avons utilisé comme *a priori* les informations sur les résonances provenant de l'évaluation de JEFF-3.1.1 et des références [9, 10]. Comme expliqué auparavant, nous avons décidé d'étendre le domaine résolu de 350 keV (comme cela est actuellement le cas pour le sodium de JEFF-3.1.1) à 2 MeV. Le "barn book" [9] liste 41 résonances, en précisant pour la moitié d'entre elles, que le moment orbital  $\ell$  et le moment total  $J$  proposé sont mals connus.

Notre ré-évaluation du domaine résolu fut ainsi délicate puisqu'il a fallu déterminer non seulement les largeurs neutroniques et les largeurs neutroniques inélastiques (à l'apparition du premier niveau) mais également le moment orbital  $\ell = \{0, 1, 2\}$  et surtout le moment total  $J$  auquel on peut associer 9 valeurs possibles (voir Table 4.1 dans le Chapitre 4).

Les largeurs de capture radiatives sont restées inchangées pour celles qui étaient déjà connues. On a ensuite attribué, pour les nouvelles résonances analysées, une largeur radiative moyenne suivant le moment orbital  $\ell$  de la résonance.

Pour le rayon effectif  $R'$  (*cf.* Équation (3.45) dans le Chapitre 3), nous avons déterminé sa valeur suite à des calculs par modèle optique, qui sont détaillés un peu plus loin. En effet, on rappelle que la section potentielle élastique  $\sigma_{pot}$ , dans le domaine des résonances résolues, peut s'approcher par :

$$\sigma_{pot} \simeq 4\pi R'^2 \quad (5.6)$$

Cette section potentielle est difficilement mesurable dans le domaine résolu, cependant le modèle optique permet de calculer très simplement cette section et fixe ainsi la valeur de  $R'$  grâce à l'Équation (5.6).

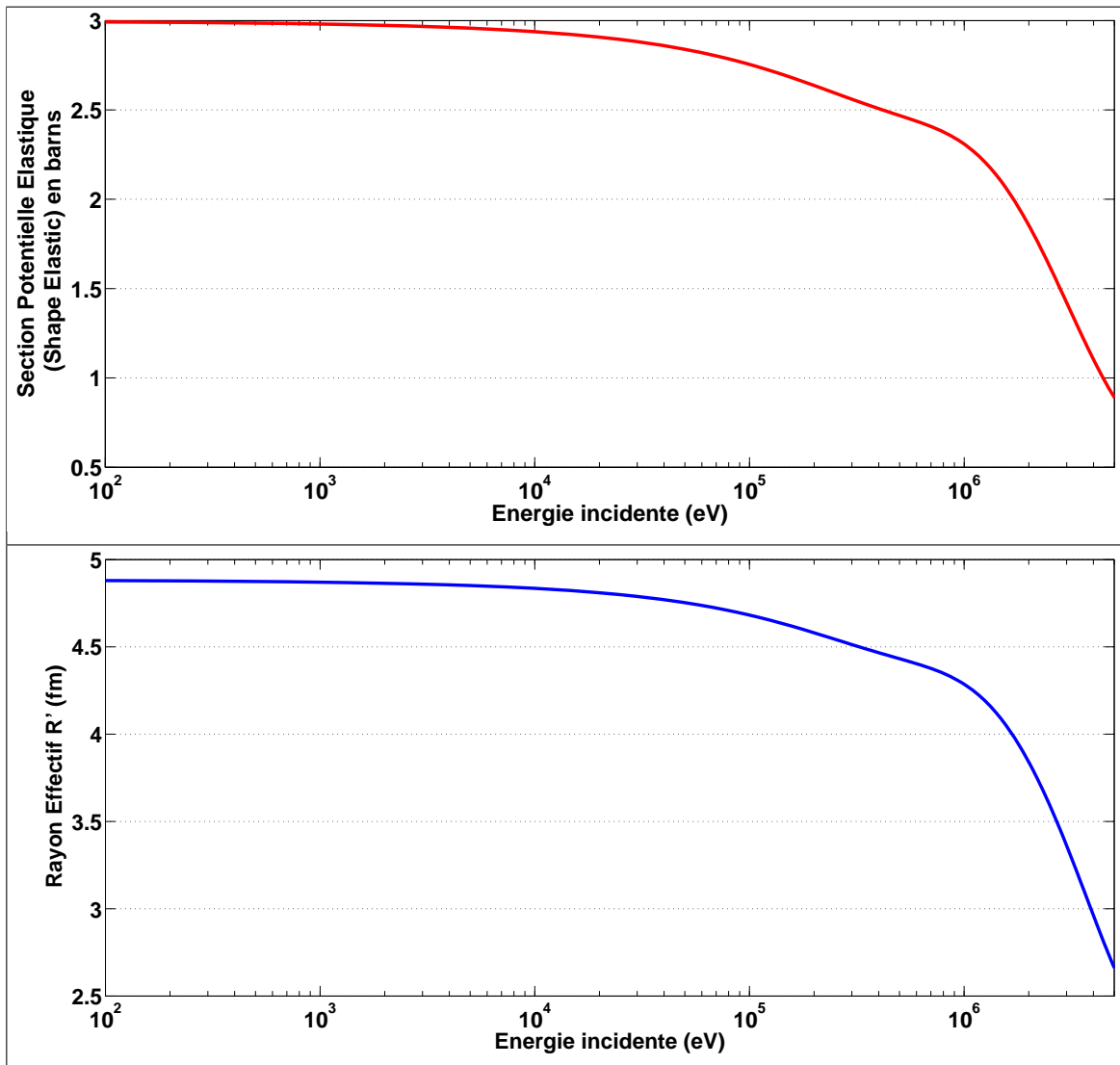


FIGURE 5.1. Section potentielle élastique du Sodium calculée par modèle optique en fonction de l'énergie incidente du neutron et rayon effectif  $R'$  équivalent suivant l'Équation (5.6)

Par ailleurs, nous avons mis en place dans CONRAD la possibilité d'avoir un rayon effectif dépendant de l'énergie incidente du neutron. En effet, la section potentielle  $\sigma_{pot}$  calculée par modèle optique est, certes, constante à basse énergie, mais diminue de manière très prononcée pour des neutrons d'énergie supérieure à plusieurs centaines de keV comme le montre la Figure 5.1.



Le format ENDF-6 (format unique pour les évaluations) autorise les voies de réaction pour les niveaux discrets inélastiques<sup>2</sup> dans les résonances, par contre, il est difficile d'y mettre un rayon effectif  $R'$  qui dépend de l'énergie.

Suite à ces limitations dues au format, nous avons fait l'approximation que ce rayon effectif était constant jusqu'au premier seuil inélastique puisqu'il variait en fonction de l'énergie comme le montre la Figure 5.1. De cette manière, seules les résonances avant le seuil sont données dans l'évaluation (pour la *File2*) et les sections efficaces entre 460 keV et 2 MeV sont calculées par CONRAD et mises dans la *File3* (où se trouvent les sections ponctuelles dans le format ENDF-6). Ces limitations de format ne sont pas importantes dans le cas du sodium, puisque une grande majorité des résonances ne sont pas sensibles à l'élargissement Doppler. Le modèle optique nous donne la valeur constante de  $R'$  d'environ 4.9 fm, ce qui est en parfait accord avec la référence [9].

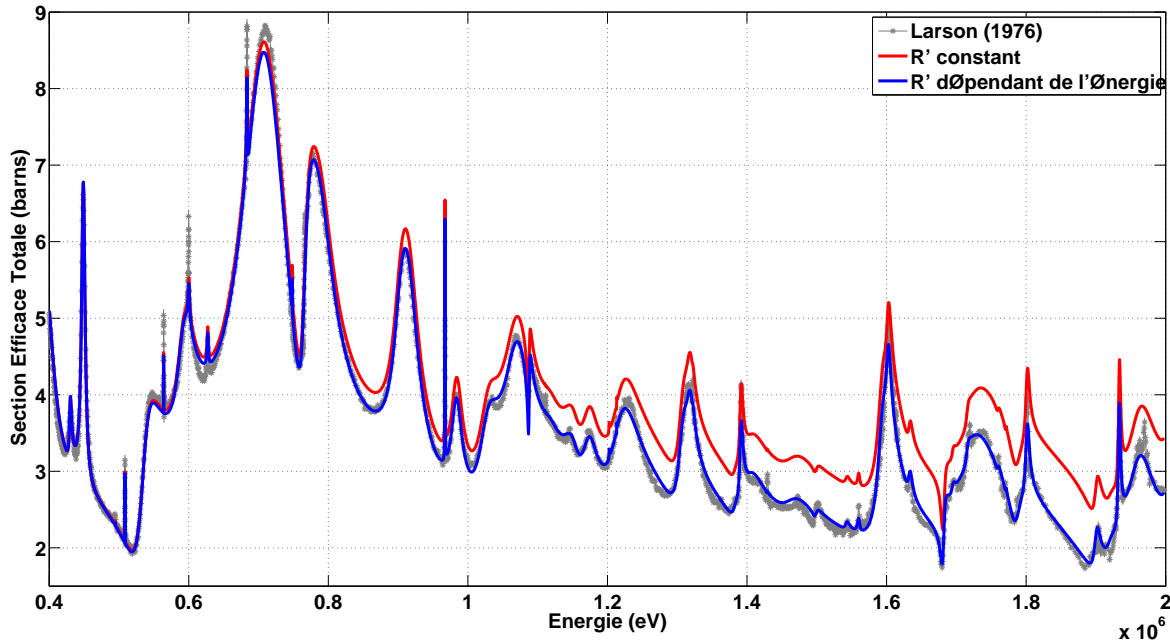


FIGURE 5.2. Sections efficaces totales calculées avec CONRAD, avec et sans prise en compte de la dépendance énergétique du rayon effectif

On découple ainsi le  $R'(E)$  entre une valeur constante  $R'_{cst}$  (4.9 fm dans notre cas) et une fonctionnelle dépendante de l'énergie  $f_R(E)$ . Pour notre évaluation, nous avons pris une forme polynômiale pour cette fonctionnelle, dont les coefficients sont ajustés sur la forme obtenue avec les calculs par modèle optique (*cf.* Figure 5.1). On rappelle que pour des

2. Dans le manuel ENDF-6 [6], on peut appliquer à la *File2* (pour les paramètres de résonance) le *flag* LRF=7, autrement dit le formalisme *R-Matrix Limited*, qui n'est autre que l'approximation de Reich-Moore avec un nombre illimité de voies.

énergies assez faibles (inférieures à la dizaine de keV ici), on a  $f_R \rightarrow 1$  (on retombe sur un  $R'$  constant). Dans CONRAD, on utilise donc les formules suivantes :

$$R'(E) = R'_{cst} \cdot f_R(E) \quad (5.7)$$

$$\text{où } f_R(E) = \sum_{i=0}^{nR} a_i E^i \quad (5.8)$$

Le nombre de coefficients ( $nR$ ) vaut 6 dans notre cas et cela permet de décrire avec suffisamment de précision la forme du rayon de la Figure 5.1. La non-prise en compte de cette dépendance énergétique de  $R'$  dans le domaine résolu rend l'analyse des résonances très difficile, si ce n'est impossible, en particulier pour des énergies de neutron incident supérieures à 1 MeV. La Figure 5.2 permet de mesurer l'importance de cette dépendance sur la section totale calculée avec CONRAD, comparée avec les données expérimentales.

En toute théorie, il faudrait ajouter également à notre section inélastique (et donc à la section totale), qui ne contient que la contribution du noyau composé dans ce modèle, une partie directe qui serait calculée avec TALYS (en passant par CONRAD). Cependant, les premiers calculs montrent que cette contribution directe inélastique reste inférieure à 100 millibarns. Par conséquent, nous supposons dans la suite que la partie directe de la section inélastique est négligeable dans le domaine des résonances résolues.

#### 5.1.4 Résultats sur les Sections Efficaces

Dans la suite, nous exposons les résultats de l'analyse traduits sous forme de sections efficaces. Suite à l'extension du domaine résolu à 2 MeV, nous avons pu évaluer 86 paramètres de résonances tandis qu'on en comptait 20 dans l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  de la bibliothèque JEFF-3.1.1. Ces paramètres de résonance (valeurs et incertitudes) sont placés en Annexe D, nous invitons le lecteur à s'y référer si celui-ci est intéressé.

##### 5.1.4.1 Sections Efficaces au Point Thermique

$\sigma_{th}$	Ce Travail	JEFF-3.1.1	JENDL-4.0	ENDF/B-VII.0	Atlas Res.
$(n, el)$	$3.053 \pm 4.42\%$	3.090	$3.089 \pm 3.25\%$	$3.393 \pm 0.46\%$	$3.038 \pm 0.23\%$
$(n, \gamma)$	$0.524 \pm 7.80\%$	0.531	$0.531 \pm 8.70\%$	$0.528 \pm 15.21\%$	$0.517 \pm 0.70\%$

TABLE 5.2. Sections efficaces élastique et de capture au point thermique suite à l'analyse de résonances du  $^{23}\text{Na}$

À la suite de notre analyse de résonances, la Table 5.2 montre les sections efficaces élastique et de capture radiative au niveau du point thermique ( $E_n = 25$  meV) obtenues et comparées avec les autres évaluations. L'incertitude associée la section de capture thermique pour le  $^{23}\text{Na}$  dans cette Table est liée à la dispersion des mesures sur cette section, comme on peut le constater sur la Figure 5.3.

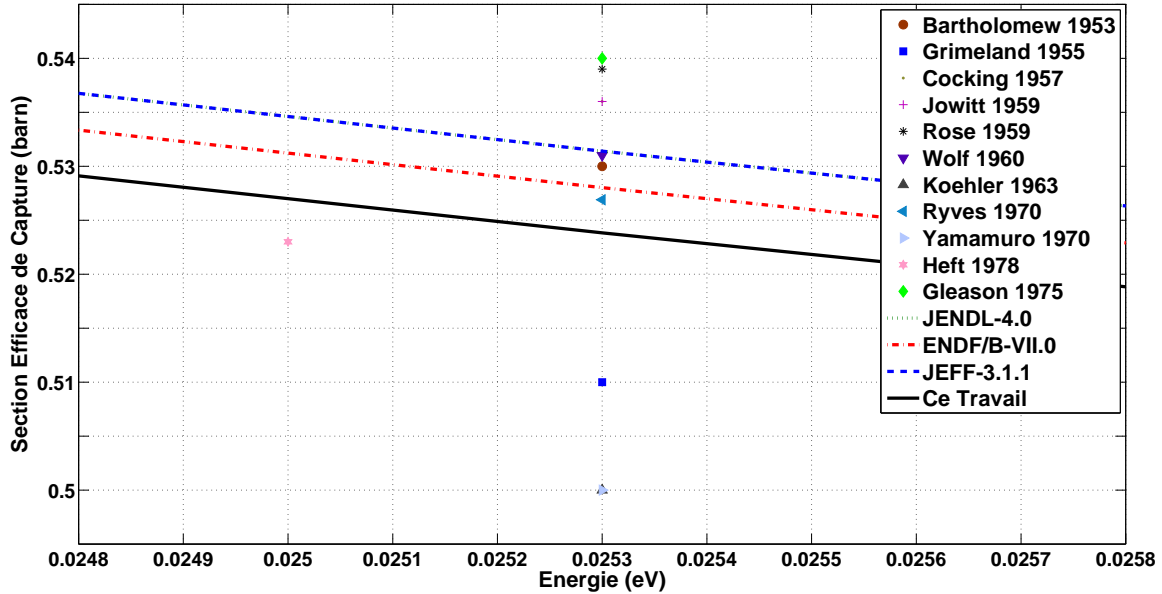


FIGURE 5.3. Section efficace de capture au point thermique, comparée aux mesures (les références sont disponibles dans la base de données EXFOR) et aux évaluations du sodium existantes

#### 5.1.4.2 Section Efficace Totale

Les Figures 5.4, 5.5 et 5.6 montrent notre section efficace totale ré-évaluée dans divers domaines en énergie. À titre de comparaison, nous avons également donné les sections totales provenant de JEFF-3.1.1 (=JENDL-4.0) et ENDF/B-VII.0. On obtient un bon accord avec les données de Rahn [86] pour la résonance- $s$  à 2.8 keV.

Avec les données expérimentales de Larson [11] au-delà de 30 keV, nous sommes parvenus à une bonne adéquation en ce qui concerne les résonances jusqu'à 350 keV. Après le seuil inélastique (460 keV), nous avons recherché, par tâtonnement, les valeurs des largeurs partielles ainsi que les nombres quantiques des résonances ( $\ell$  et  $J^\pi$ ) pour obtenir au final un assez bon compromis. Cependant, on peut remarquer sur la Figure 5.6 qu'il reste des différences sur quelques structures résonantes, bien que ces écarts soient largement couverts par la dispersion des mesures de sections totales.

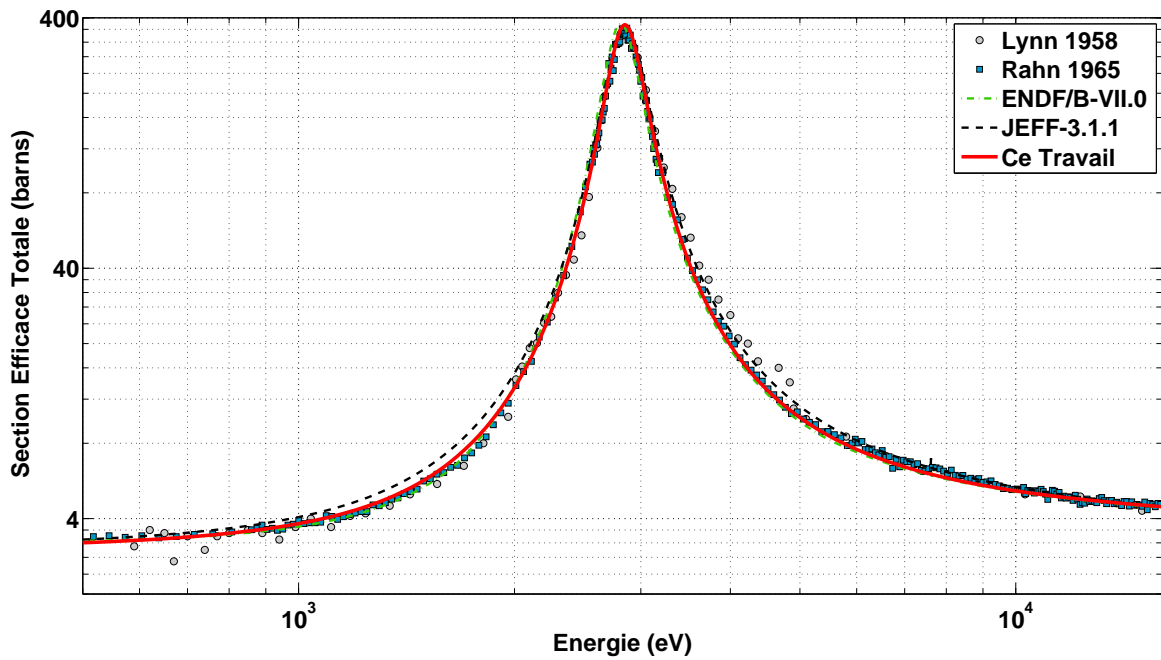


FIGURE 5.4. *Section efficace totale, entre 500 eV et 16 keV, ajustée sur les mesures de Rahn et comparée aux évaluations du sodium existantes*

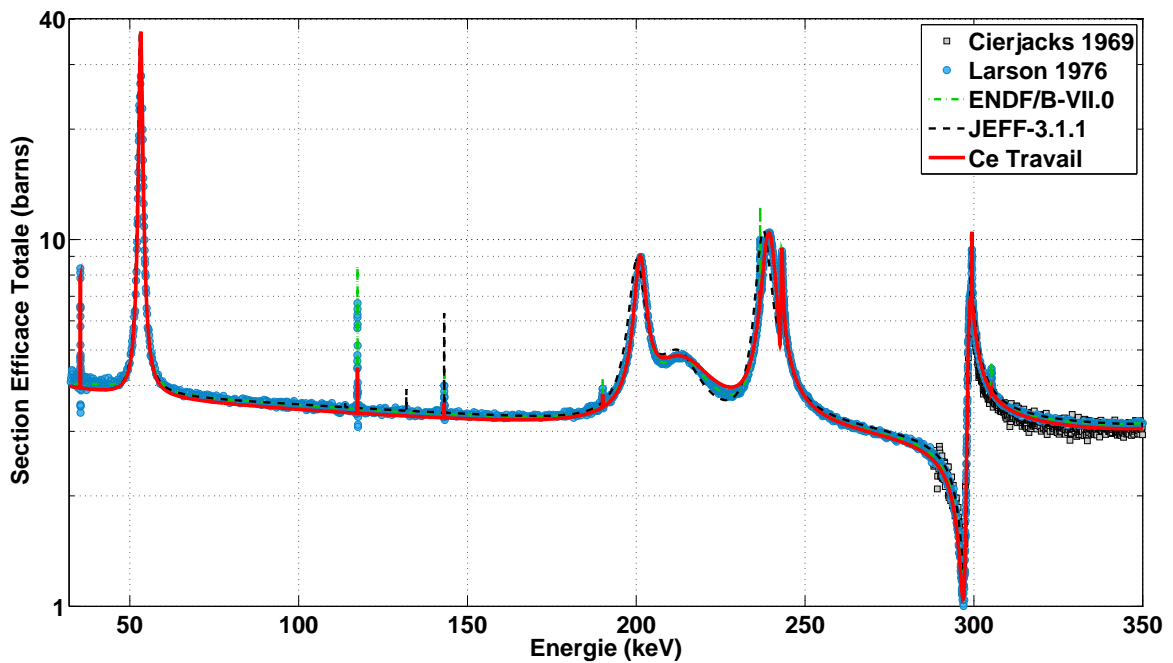


FIGURE 5.5. *Section efficace totale, entre 32 keV et 350 keV, ajustée sur les données de Larson et comparée aux évaluations du sodium existantes*

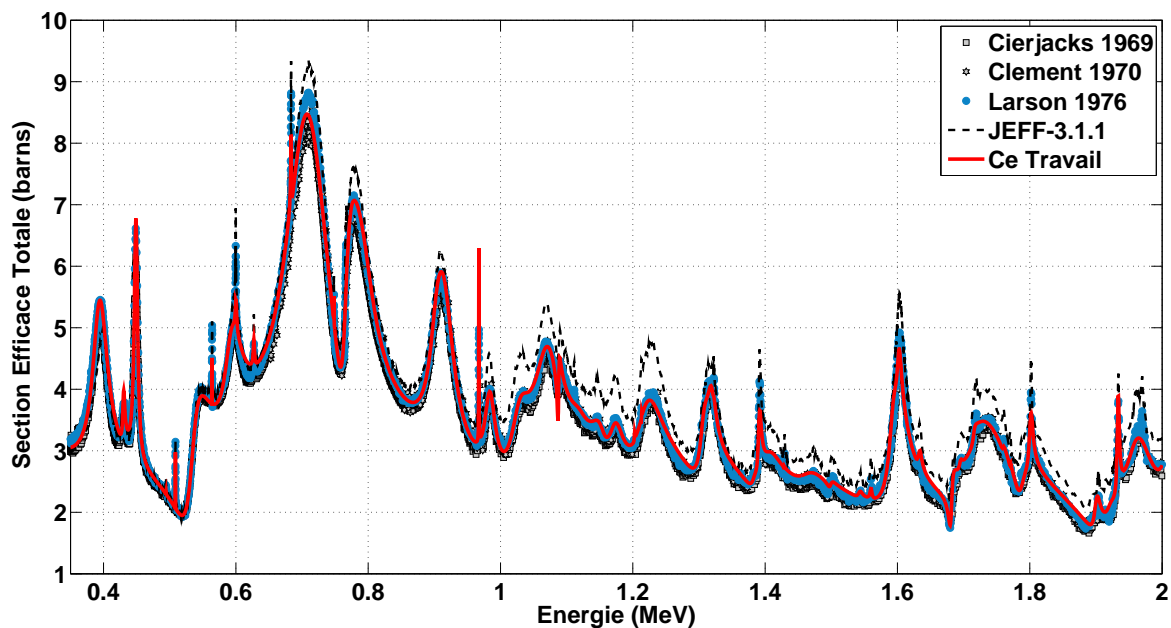


FIGURE 5.6. Section efficace totale, entre 350 keV et 2 MeV, ajustée sur les mesures de Larson et comparée à l'évaluation du sodium dans JEFF-3.1.1

#### 5.1.4.3 Section Efficace Inélastique

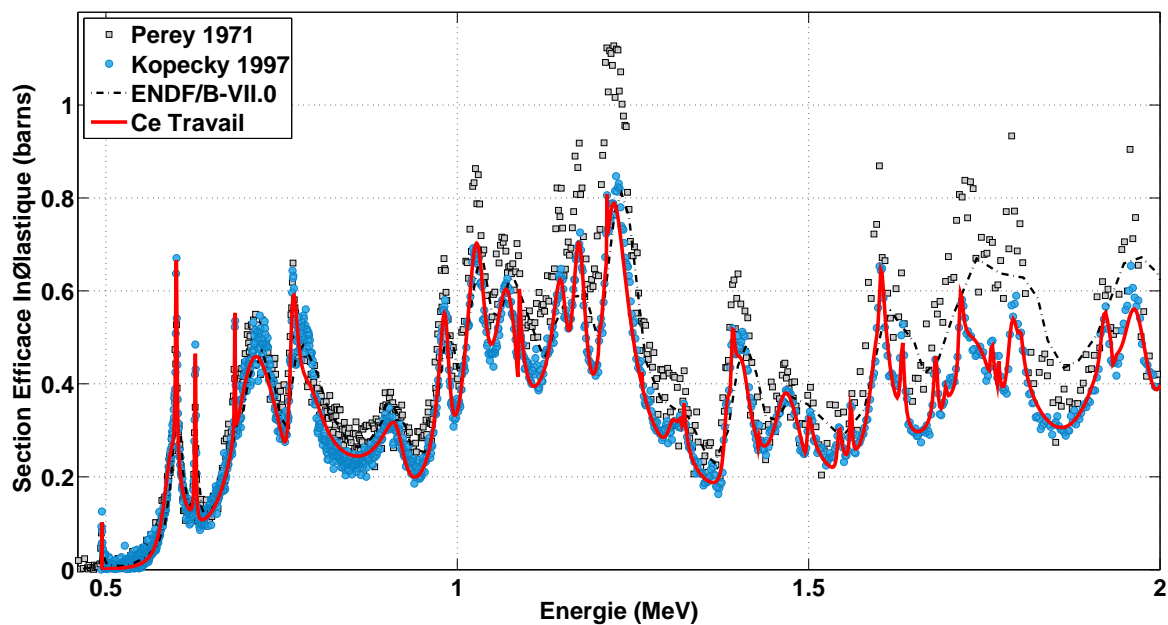


FIGURE 5.7. Section efficace du premier niveau inélastique, entre 460 keV et 2 MeV, ajustée sur les mesures de Kopecky et comparée à l'évaluation du sodium dans ENDF/B-VII.0

Nous avons obtenu un accord très satisfaisant dans l'ensemble avec les mesures de Kopecky [13], sachant que les largeurs inélastiques nous étaient totalement inconnues au début de l'analyse.

La Figure 5.7 permet d'observer notre section efficace inélastique face aux données expérimentales et aux valeurs de l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans ENDF/B-VII.0 (les valeurs dans JEFF-3.1.1 proviennent directement des mesures de Kopecky).

#### 5.1.4.4 Sections Efficaces Post-Processing

Une fois les paramètres de résonances analysés, nous avons commencé le montage d'un fichier évalué (au format ENDF-6) où ces paramètres (seules les largeurs radiatives et neutroniques y figurent, pas les largeurs inélastiques) sont placés dans la *MF2*, réservée aux paramètres de résonance. En *MF3*, du seuil inélastique (460 keV) à 2 MeV, nous avons introduit les sections efficaces ponctuelles totale, élastique, inélastique et de capture calculées à l'aide de CONRAD (à 293.6°K).

Cette évaluation subit ensuite un *processing*, géré par le code NJOY [77], ce qui permet de vérifier que les résultats exposés auparavant sont bien transposables dans le format ENDF-6 et donc utilisables par la suite dans les codes de neutronique. La Figure 5.8, après *processing* dans NJOY, montre les sections efficaces ponctuelles élargies à 293.6°K. Ces sections pourraient être alors utilisées par un code stochastique tel que TRIPOLI [26] ou MCNP [33].

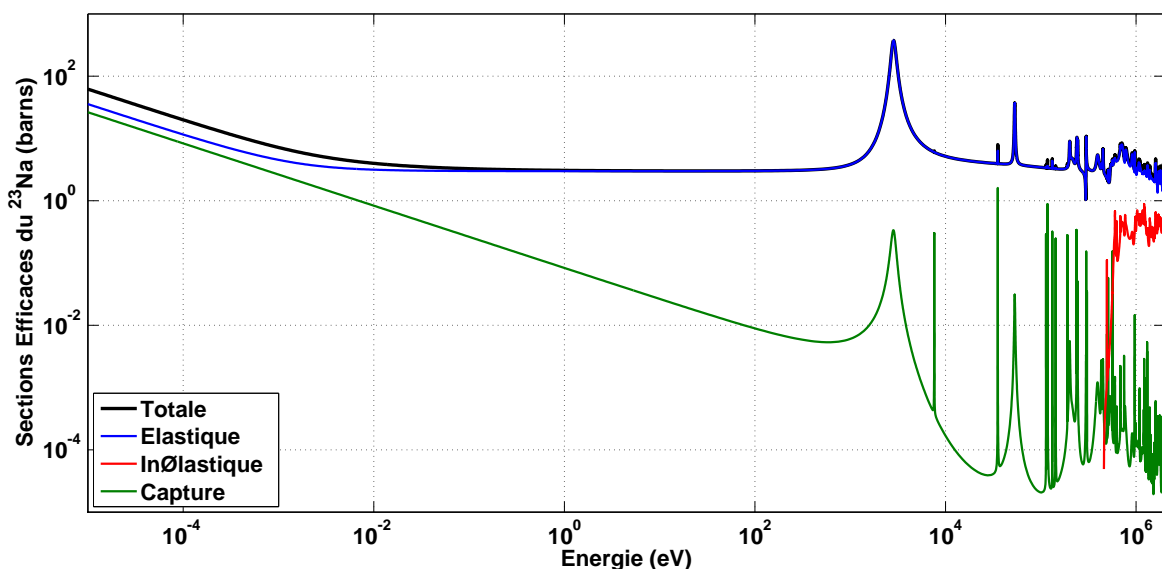


FIGURE 5.8: Sections efficaces ponctuelles du  $^{23}\text{Na}$  calculées par NJOY à 293.6°K

### 5.1.5 Covariances sur les Sections Efficaces

#### 5.1.5.1 Incertitudes Expérimentales

Larson [11] indique, dans les informations sur la base de données EXFOR, que l'incertitude systématique est estimée à 3% sur tout le domaine énergétique couvert par les mesures (de 32 keV à 37 MeV). Cependant, si l'on tient compte des données expérimentales existantes par ailleurs, qui montrent une dispersion (voir Figures 5.5 et 5.6) des valeurs mesurées assez prononcée, il nous semble que l'incertitude annoncée est trop optimiste.

Pour la section totale, nous avons donc choisi une incertitude systématique plus importante et qui varie suivant les domaines en énergie (pour tenir compte du plus grand nombre de mesures vers 800 keV) :

- de 80 eV à 800 keV : incertitude systématique de 4%.
- de 800 keV à 2 MeV : incertitude systématique de 5%.

Concernant la section inélastique, Kopecky précise, dans la Référence [89], que l'incertitude systématique est d'environ 6.5% sur ses mesures. Une nouvelle fois, cette incertitude nous paraît sous-estimée puisque de nettes différences entre les mesures de Kopecky [13] et de Perey [14] apparaissent après 1.5 MeV.

- De ce fait, notre incertitude systématique sur la section inélastique se décompose suivant :
- de 460 keV à 1.5 MeV : incertitude systématique de 6.5%.
  - de 1.5 MeV à 2 MeV : incertitude systématique de 8%.

Pour la section de capture, comme aucune mesure n'est disponible, nous avons directement associé une incertitude sur les largeurs radiatives  $\Gamma_\gamma$ , sans les corrélérer. Nous avons ainsi attribué une incertitude de 40% pour les largeurs  $\Gamma_\gamma$  des premières résonances pour finir à une incertitude d'environ 100%, dans le but d'assurer une continuité de l'incertitude avec le domaine du continuum.

À ces incertitudes provenant des données expérimentales, il faut également mentionner l'incertitude sur le rayon effectif  $R'$ , que l'on tire d'un calcul par modèle optique (*cf.* prochaine section pour le domaine du continuum). Le rayon effectif  $R'$  jouant essentiellement sur la section efficace élastique (par l'intermédiaire de la diffusion potentielle) et donc sur la section efficace totale, son incertitude ne sera visible que sur ces deux sections. Le calcul par modèle optique nous a permis d'estimer le rayon effectif à :

$$R' = 4.9 \pm 0.1 \text{ fm} \quad (5.9)$$

### 5.1.5.2 Propagation des Incertitudes

Pour des raisons numériques, nous avons préféré utiliser la méthode de marginalisation par Monte-Carlo plutôt que la méthode analytique pour la propagation des incertitudes de type systématique. En effet, plusieurs largeurs partielles sur quelques résonances ne contribuent pas “assez” à l’incertitude sur les sections efficaces (résolution trop faible des mesures ou/et largeurs de résonance trop étroites) ce qui résulte en des incertitudes non-physiques avec la méthode analytique de marginalisation.

Après utilisation de la marginalisation, nous avons à notre disposition une matrice de covariances sur les paramètres de résonances (les largeurs partielles dans notre cas) qui permet de calculer les incertitudes sur les observables physiques telles que les sections efficaces.

### 5.1.5.3 Incertitudes et Corrélations Multigroupes

Usuellement, les matrices de covariances pour les sections efficaces sont fournies dans un format multigroupe et sont ensuite placées en *MT33* dans le fichier évalué ENDF-6. Cependant, dans le but de prendre en compte les effets de l’auto-protection et de dilution lors de la phase de *processing*, il est commun de trouver les covariances relatives aux paramètres de résonance en *MF32* qui seront alors traitées par le code NJOY.

Dans notre cas, les résonances sont peu nombreuses et surtout peu sensibles à l’auto-protection; de ce fait, nous avons décidé d’insérer les covariances sur les sections efficaces directement en *MT33* dans un découpage à 33 groupes d’énergie (le découpage “classique” dans le code ERANOS). CONRAD, parmi ses nombreuses fonctionnalités, est capable de générer des matrices de covariances sur les sections efficaces à partir des matrices de covariances sur les paramètres de modèles de réactions nucléaires. Ainsi, nous passerons par CONRAD pour créer les matrices de corrélations et incertitudes associées pour les réactions totale, élastique, inélastique et de capture radiative.

Tout d’abord, la Figure 5.9 montre les sections efficaces multigroupes et les incertitudes associées à chaque réaction (les valeurs des sections et des incertitudes sont données dans l’Annexe D). Ensuite, on peut trouver sur la Figure 5.10, les matrices de corrélations pour les principales réactions. Seules les matrices de corrélations pour les mêmes réactions sont proposées ici, le lecteur avisé pourra trouver en Annexe D toutes les matrices de corrélations et surtout de cross-corrélations (corrélations entre des réactions différentes, par exemple entre les réactions élastique et inélastique).



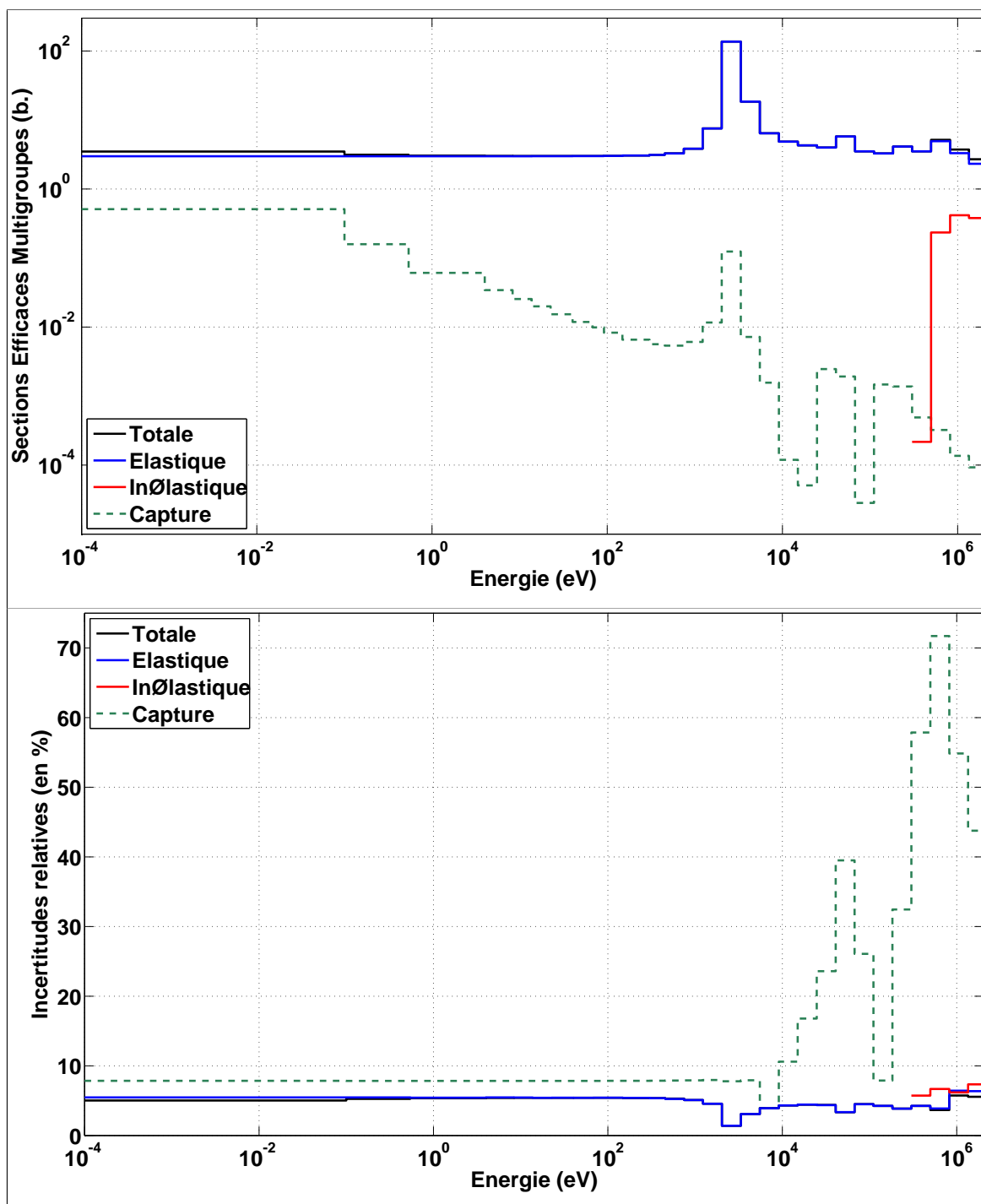


FIGURE 5.9. Sections efficaces multigroupes (dans le découpage à 33 groupes) et incertitudes relatives (en %) du domaine des résonances résolues pour notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$

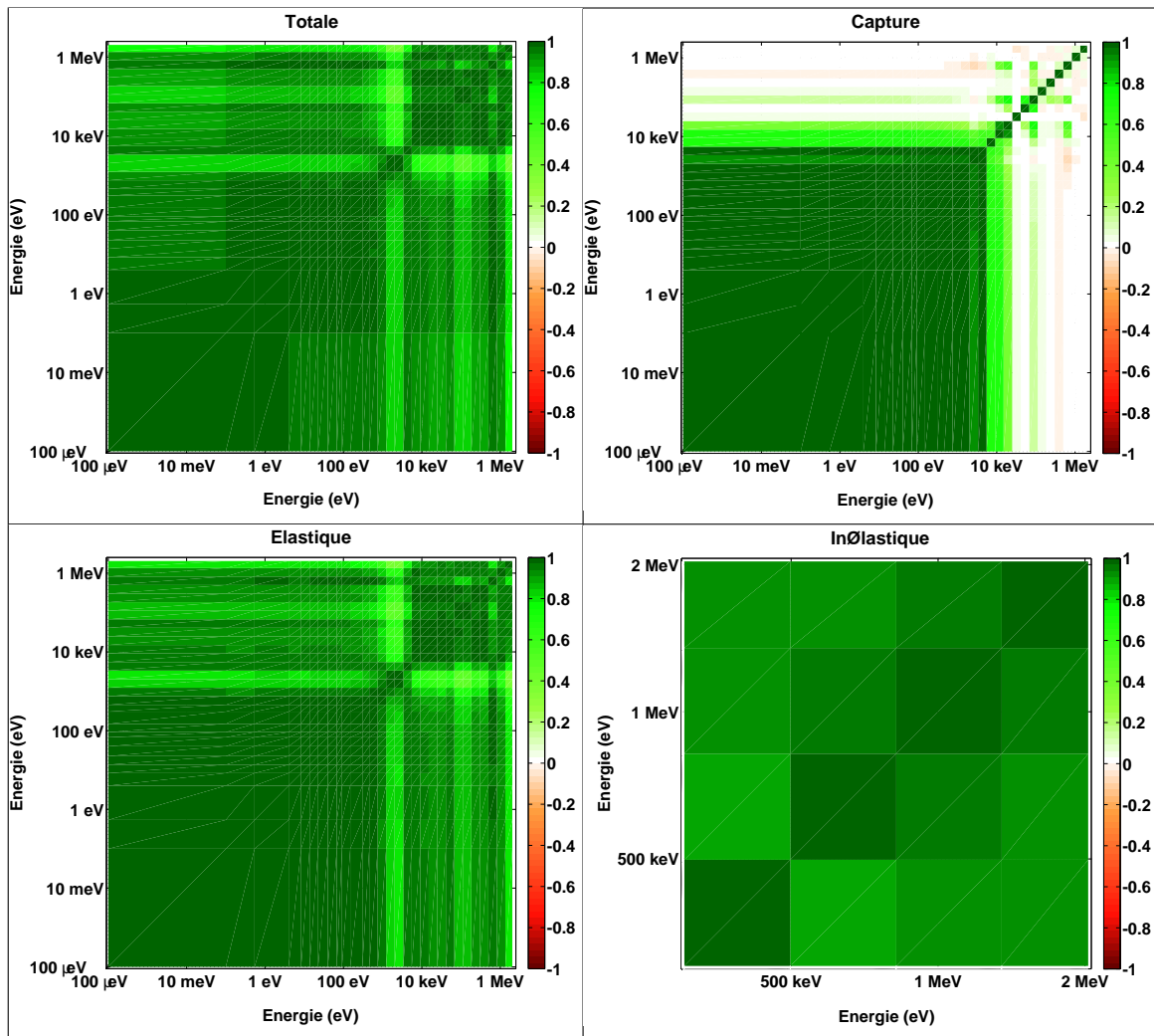


FIGURE 5.10. Matrices de corrélations multigroupes (33 groupes d'énergie) dans le domaine des résonances résolues du  $^{23}\text{Na}$  pour les sections efficaces totale, de capture, élastique et inélastique

### 5.1.6 Sections Efficaces Différentielles

Au cours de l'analyse de résonances (paragraphe précédents), nous avons tenté d'ajouter les données expérimentales de Kopecky [13] pour les sections efficaces différentielles, mesurées pour 8 angles différents dans le laboratoire.

Ces informations supplémentaires rendent l'analyse très complexe puisqu'il est dorénavant nécessaire de gérer les effets d'interférence entre les résonances de même  $J^\pi$  avec les mesures de sections intégrées en angle et les interférences entre des résonances associées à nombres quantiques différents avec les mesures de sections différentielles. Un exemple de l'effet provoqué par un changement de  $J^\pi$  pour une résonance est illustré en Figure 5.11.

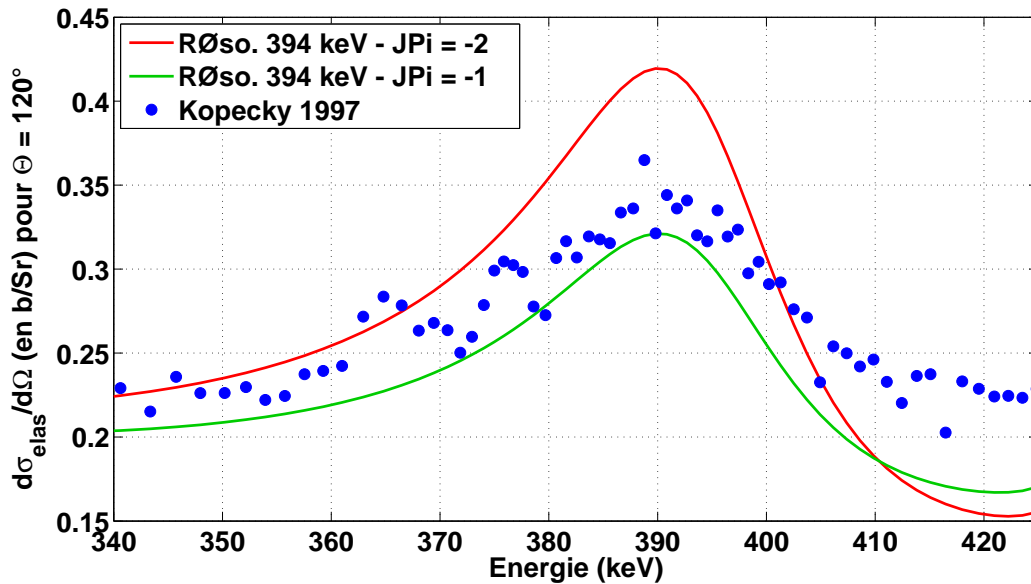


FIGURE 5.11. Impact sur la section efficace différentielle de la modification du nombre quantique  $J^\pi$  d'une résonance

Sur la Figure 5.12, on peut observer nos sections différentielles en fonction de l'angle de sortie pour quelques énergies de neutron incident, que l'on confronte aux données expérimentales existantes. Nos sections efficaces différentielles sont issus des résultats de l'analyse de résonances en utilisant uniquement les mesures de sections intégrées en angle.

On voit, sur cette dernière Figure, que nos valeurs théoriques calculées avec CONRAD sont en accord avec les mesures pour les angles inférieurs à  $90^\circ$ . Par contre, on est presque systématiquement en désaccord avec les angles supérieurs à  $90^\circ$ .

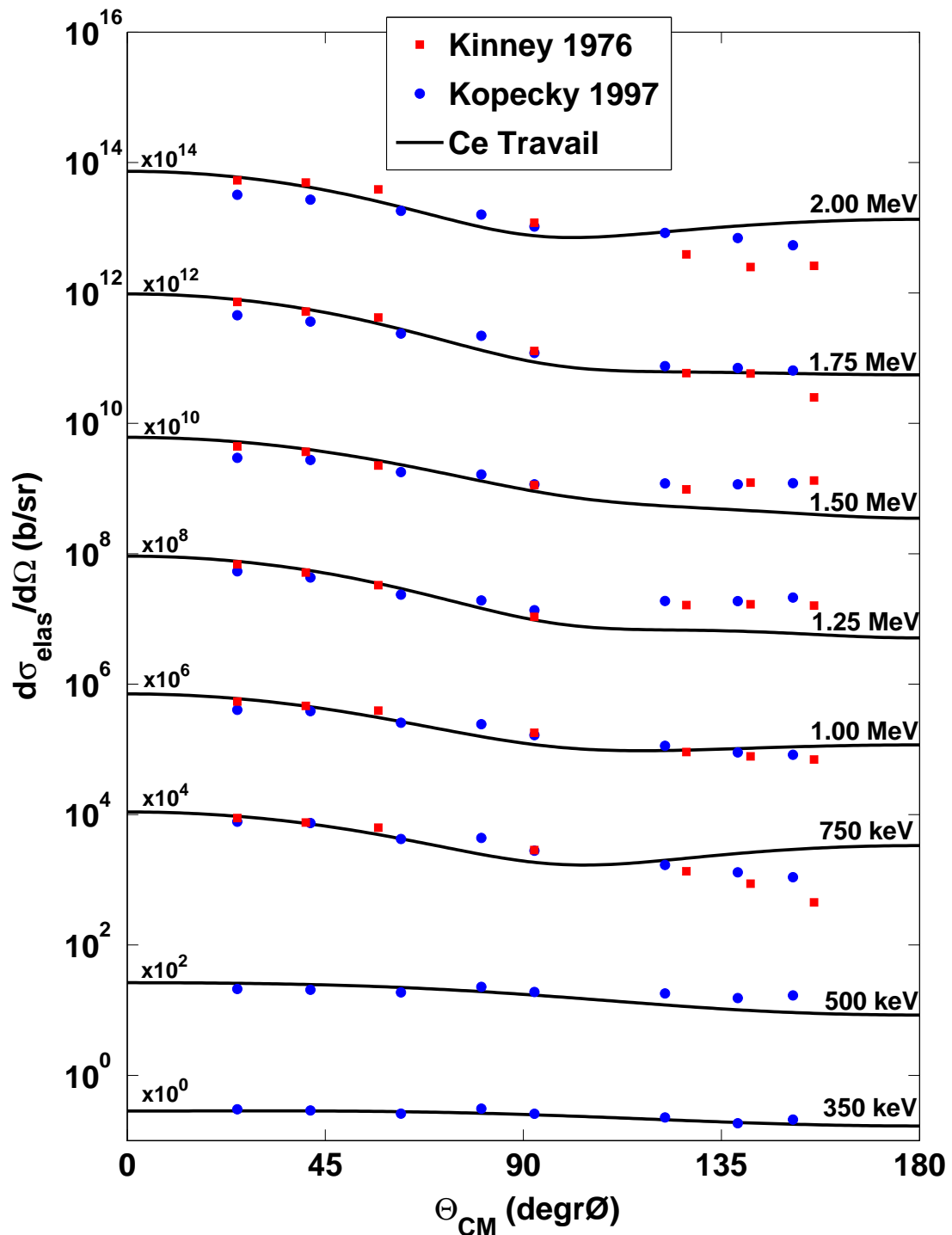


FIGURE 5.12. Sections différentielles élastiques (en b/sr) en fonction de l'angle, calculées pour plusieurs énergies (normalisées par un facteur pour en montrer plusieurs) et comparées aux mesures disponibles dans EXFOR

Ces différences entre nos valeurs théoriques et les données de Kopecky [13] peuvent être dues à :

- des problèmes de normalisation, qui sont fréquents sur ce type de mesure ;
- des problèmes liés à la détection pendant les mesures ;
- une mauvaise assignation des nombres quantiques ( $\ell, J^\pi$ ) pour nos résonances ;
- de la sur-information.

Concernant le dernier point, on rappelle que l'analyse des résonances a été réalisée sur une section totale et une section inélastique (la section de capture étant négligeable dans l'évaluation du sodium). Or, les mesures de distributions angulaires élastiques de Kopecky [13] ajoutent des informations supplémentaires sur la section élastique, et par conséquent presque directement sur la section totale, qui peut donc être en net désaccord avec les mesures de Larson [11].

Ces nombreuses difficultés, qui débute même avant l'ouverture du premier niveau inélastique, nous ont confirmé qu'il n'était pas possible, dans un temps raisonnable pour ces travaux de thèse, d'analyser à la fois les sections efficaces intégrées en angle et les sections différentielles.

Par ailleurs, il faut noter que l'on trouve très peu d'informations dans la littérature concernant l'analyse des distributions angulaires dans le domaine des résonances résolues.

On peut néanmoins citer la thèse de R. Babut [91] qui a rencontré des problèmes similaires (notamment pour l'attribution des spins des résonances) lorsqu'il a traité les sections efficaces différentielles des réactions  $(\alpha, n)$  pour plusieurs isotopes de l'oxygène avec le code SAMMY.

## 5.2 Évaluation dans le Continuum

### 5.2.1 Les Données Expérimentales

Les données de Larson [11] semblent de bonne qualité et continuent bien au-delà de 20 MeV, nous utiliserons donc à nouveau ces mesures pour l'analyse de la section totale avec le modèle optique.

Nous n'avons plus de mesures à haute résolution disponibles pour les sections inélastiques discrètes.

Par contre, on peut remarquer un nombre important de données expérimentales, certaines assez récentes (réalisées après 1990), et disponibles sur la base de données EXFOR pour les réactions :

- $(n, p)$  (seuil à 4.2 MeV) : mesures à haute résolution de Williamson [92] en 1961, de Bass [93] en 1966 et de Weigmann [94] en 1982, qui s'arrêtent à environ 10 MeV. On trouve également quelques données plus éparses après 13 MeV.
- $(n, \alpha)$  (seuil à  $\simeq 5$  MeV) : mesures à haute résolution de Bass [93] en 1966 et de Weigmann [94] en 1982, qui s'arrêtent à environ 10 MeV. Données plus éparses disponibles après 13 MeV.
- $(n, 2n)$  (seuil à  $\simeq 13.5$  MeV) : les mesures de Hanlin [95] en 1992, de Uwamino [96] en 1992, de Xiangzhong [97] en 1995 et de Filatenkov [98] en 1999 sont concordantes entre elles, mais sont nettement en-dessous de données expérimentales plus anciennes. Nous supposons que ces nouvelles mesures sont correctes et nous les utiliserons pour l'ajustement.
- $(n, inel)$  : on peut citer les mesures de F.G. Perey [99] pour les énergies de 5.44, 6.37, 7.60 et 8.52 MeV. On trouve également sur EXFOR les données de D.R. Donati [100] pour les six premiers niveaux inélastiques entre 0.52 et 4.23 MeV, qui montrent, semble-t-il, des problèmes de normalisation. Ces données pour les réactions discrètes inélastiques ne seront pas utilisées, parce qu'il ne nous est pas possible de recouper ces informations avec d'autres sources.

Des mesures très éparses de la section de capture radiative entachées d'incertitudes expérimentales importantes existent et seront employées avec précaution pendant l'analyse. La phase d'ajustement se fera sans correction expérimentale (c'est-à-dire sans les effets Doppler et de la fonction de résolution), puisque les modèles théoriques sont tous statistiques (sections efficaces lisses).

## 5.2.2 Analyse des Mesures et Résultats

### 5.2.2.1 Ajustement des Paramètres du Modèle Optique

Le modèle optique est paramétré par un potentiel (*cf.* Équation (3.49)) dont on modifie la forme et la profondeur de son puits par l'intermédiaire de plusieurs paramètres, évoqués dans le Chapitre 3.

Pour le sodium, nous avons eu le choix entre plusieurs types de modèle optique : soit un modèle sphérique, soit un modèle rotationnel. Ce dernier aurait dû être légitimement employé car le  $^{23}\text{Na}$  est un noyau déformé.

Or, il s'est avéré que le modèle optique rotationnel ne nous permettait pas d'obtenir le meilleur accord avec les données expérimentales de Larson [11] tandis qu'un modèle sphérique classique nous donnait entière satisfaction. On peut lister un certain nombre de raisons pour expliquer cela :

- les modèles optiques sphériques globaux de Koning-Delaroche [48] et de Morillon-Romain [49] donnent une bonne description du potentiel optique pour des isotopes compris entre le  $^{24}_{12}\text{Mg}$  et le  $^{209}_{83}\text{Bi}$ .
- en l'occurrence, le  $^{24}_{12}\text{Mg}$  est un noyau également déformé mais il est très bien traité avec un modèle optique sphérique. Le  $^{23}\text{Na}$  étant très proche en nombre de nucléons du  $^{24}_{12}\text{Mg}$  (un proton de plus), on peut se douter qu'un modèle sphérique donnera également des résultats satisfaisants, moyennant quelques ajustements du potentiel.
- les modèles rotationnels nécessitent non seulement un potentiel mais aussi des paramètres de déformations. Pour le sodium, les déformations ne sont pas connues dans la base de données RIPL-3 [50]. De plus, le modèle rotationnel exige une certaine dextérité pour le couplage des niveaux inélastiques (on couple seulement quelques niveaux) avec le fondamental.

Outre ces raisons, il faut mentionner que les temps de calculs par modèle optique à voies couplées sont nettement plus longs que par modèle optique sphérique, ce qui rend rédhibitoire, à la vue des résultats, l'ajustement et plus particulièrement la marginalisation par Monte-Carlo pour la propagation des incertitudes.

Suite à cela, nous avons opté pour un modèle optique sphérique dispersif, en utilisant la description du potentiel de Morillon et Romain. Pour les paramètres *a priori*, nous sommes partis de ceux employés pour le  $^{24}_{12}\text{Mg}$  que nous avons légèrement ajustés pour que cela convienne au cas du sodium. Les valeurs finales des paramètres du potentiel sont fournies en Annexe D.

### 5.2.2.2 Section Efficace Totale par Modèle Optique

On peut observer, sur la Figure 5.13, la section totale obtenue et comparée aux données expérimentales présentes dans EXFOR. Entre 2 et 8 MeV, où résident des structures résonantes importantes, notre section est en bon accord avec les mesures de Larson. Après 8 MeV, où les mesures se lissent, on obtient une très bonne concordance avec les données expérimentales, même dans le “coude” aux alentours de 10 MeV.

La section totale de JEFF-3.1.1 est donnée à titre indicatif (elle ne correspond à aucune mesure expérimentale) puisque cette dernière est le fruit d'une renormalisation des sections élastique (32%) et inélastique (-31%).

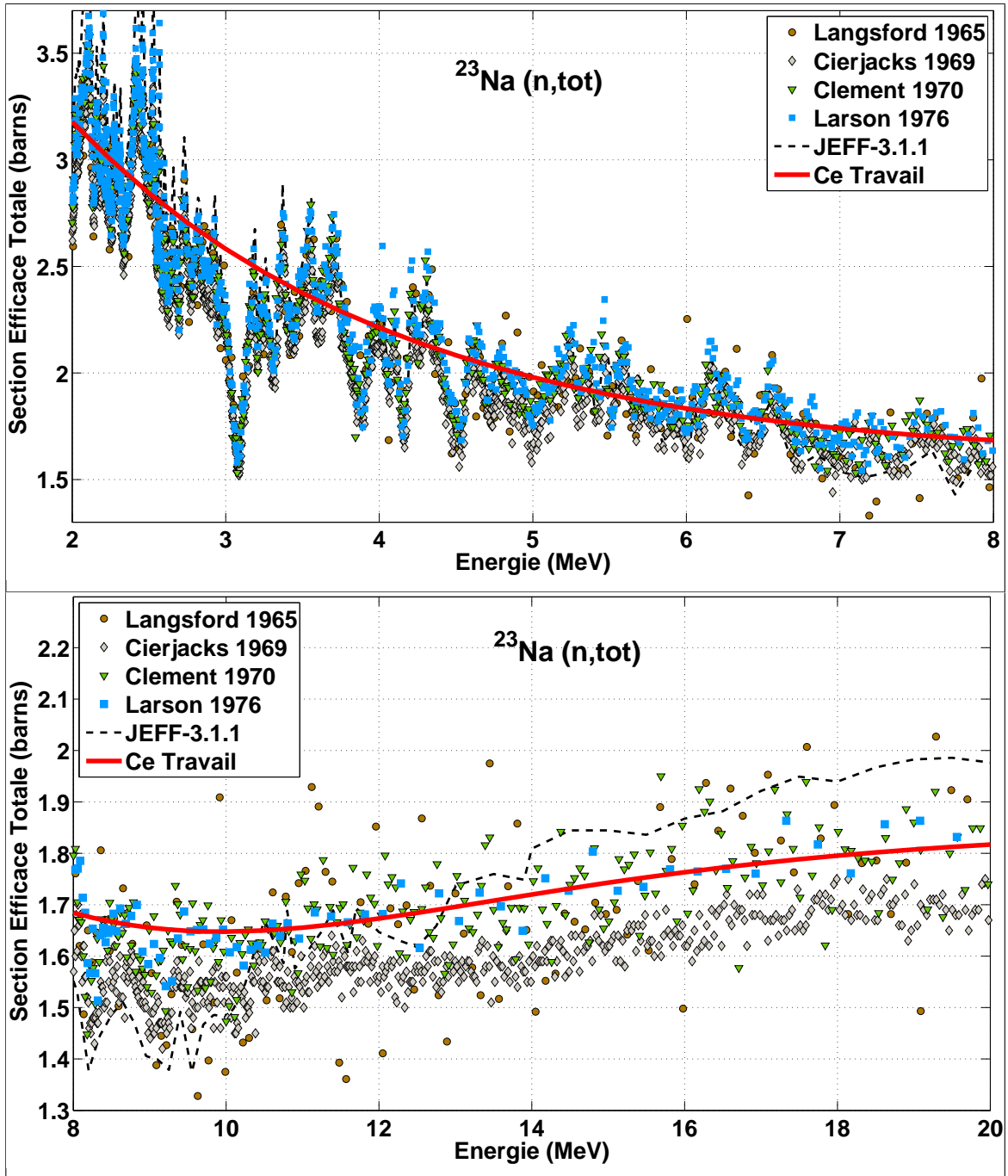


FIGURE 5.13. Section efficace totale ajustée sur les mesures de Larson et comparée aux autres données expérimentales disponibles et à l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1



### 5.2.2.3 Ajustement des Paramètres Statistiques

Une fois que le modèle optique est correctement calibré, *i.e.* qu'il donne les résultats attendus sur la section totale en particulier (on calcule aussi la section de diffusion potentielle ou *shape elastic* et la section de réaction), il faut maintenant traiter les sections partielles. On utilise pour cela l'interface développée entre CONRAD et le code TALYS, dont le rôle est de décomposer la section de réaction en partielles par l'intermédiaire de nombreux modèles statistiques (*cf.* Chapitre 3).

On utilise les paramètres statistiques, donnés par défaut dans TALYS, et nous les ajustons sur les mesures des réactions  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$ ,  $(n, \gamma)$  et  $(n, 2n)$ .

Les paramètres de déformation employés pour les calculs par DWBA (dans notre cas, ce sont les déformations du noyau pair voisin, le  $^{22}_{10}\text{Ne}$ ) ne sont pas ajustés ici puisqu'on ne dispose pas de suffisamment d'informations sur la section inélastique.

Certains paramètres du modèle de densité de niveaux ( $a(S_n)$  et  $T$  essentiellement) pour les isotopes  $^{20}_9\text{F}$ ,  $^{22}_{10}\text{Ne}$ ,  $^{23}_{10}\text{Ne}$ ,  $^{23}_{11}\text{Na}$  et  $^{24}_{11}\text{Na}$  sont ajustés afin d'obtenir un bon accord d'ensemble avec les nombreuses mesures.

On ajuste également les paramètres du  $^{23}_{11}\text{Na}$  et  $^{24}_{11}\text{Na}$  pour le modèle de la *Giant Dipole Resonance* qui contribue à la section de capture.

Enfin, on notera que les paramètres contrôlant les calculs par modèle optique des particules chargées dans TALYS sont ajustées afin d'obtenir de meilleurs compromis avec les réactions  $(n, p)$  et  $(n, \alpha)$ . Le paramètre normalisant la matrice d'excitons du Pré-Équilibre est par ailleurs utilisé, surtout pour améliorer notre section  $(n, 2n)$ .

### 5.2.2.4 Sections Efficaces Partielles

Nous présentons ici les résultats de l'analyse des mesures et de l'ajustement des paramètres de modèles statistiques traduits en termes de sections efficaces.

Tout d'abord, la Figure 5.14 montre la section efficace de réaction  $(n, p)$  du  $^{23}\text{Na}$  comparée aux mesures fines de Williamson [92], Bass [93] et de Weigmann [94], et à un certain nombre d'autres qui sont plus dispersées. L'accord avec les données expérimentales est bon dans l'ensemble si l'on tient compte des incertitudes expérimentales, mise à part dans la zone des 10 MeV.

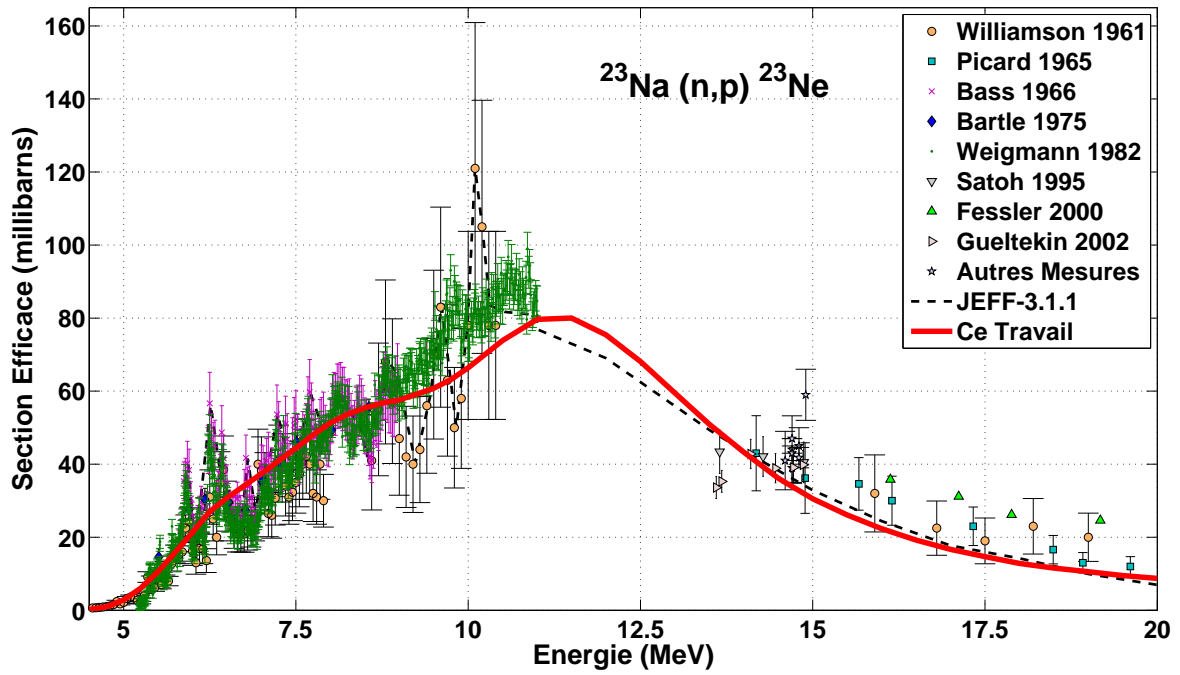


FIGURE 5.14. Section efficace pour la réaction  $(n,p)$  comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans JEFF-3.1.1

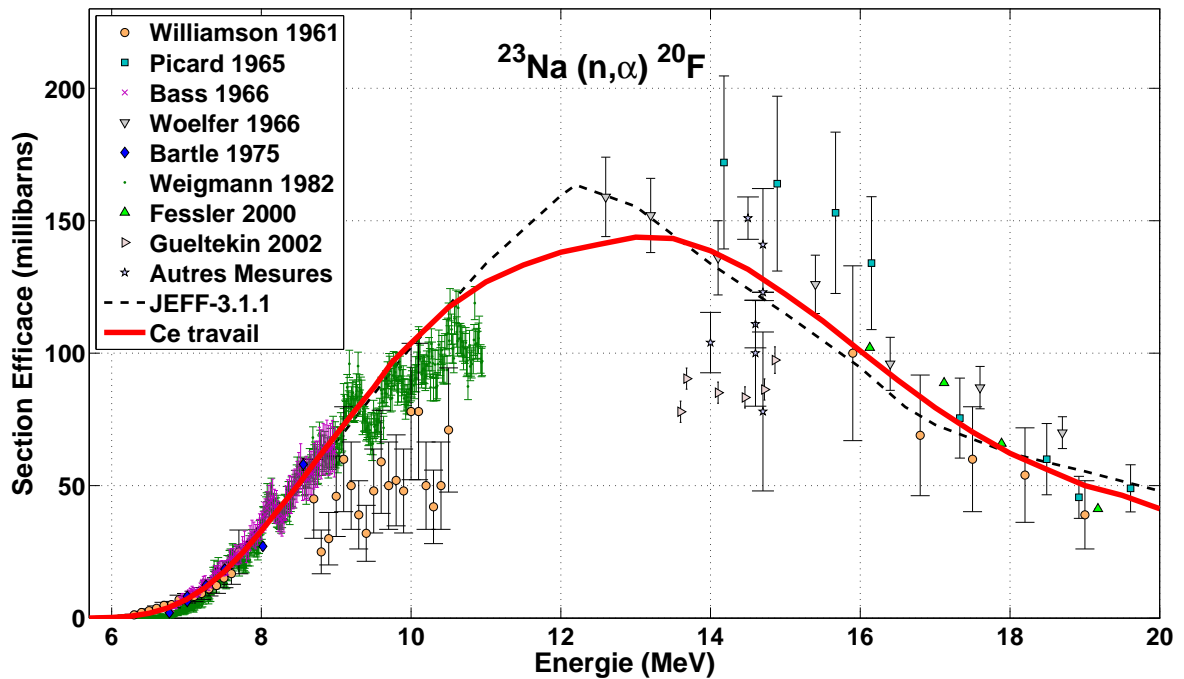


FIGURE 5.15. Section efficace pour la réaction  $(n,\alpha)$  comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans JEFF-3.1.1

Sur la Figure 5.15, on observe notre section efficace de réaction  $(n, \alpha)$  du  $^{23}\text{Na}$  que l'on compare aux données à haute résolution de Bass [93] et de Weigmann [94], et également à un grand nombre d'autres contributeurs. Nous obtenons un très bon accord d'ensemble avec les mesures pour cette réaction.

Dans le cas de la réaction  $(n, 2n)$ , la Figure 5.16 associée montre notre section efficace confrontée aux nombreuses contributions expérimentales. On peut remarquer sur cette Figure que deux tendances très distinctes sur les mesures se détachent, la première tendance étant presque deux fois plus grande que la seconde.

D'après la Référence [101], les mesures les plus grandes seraient sur-estimées d'au moins 15% à cause d'erreurs dans les schémas de niveaux du  $^{22}\text{Na}$ , utilisés à l'époque. Notre section efficace est en bon accord avec les mesures (plus nombreuses et indépendantes) les moins grandes, appartenant à la deuxième tendance.

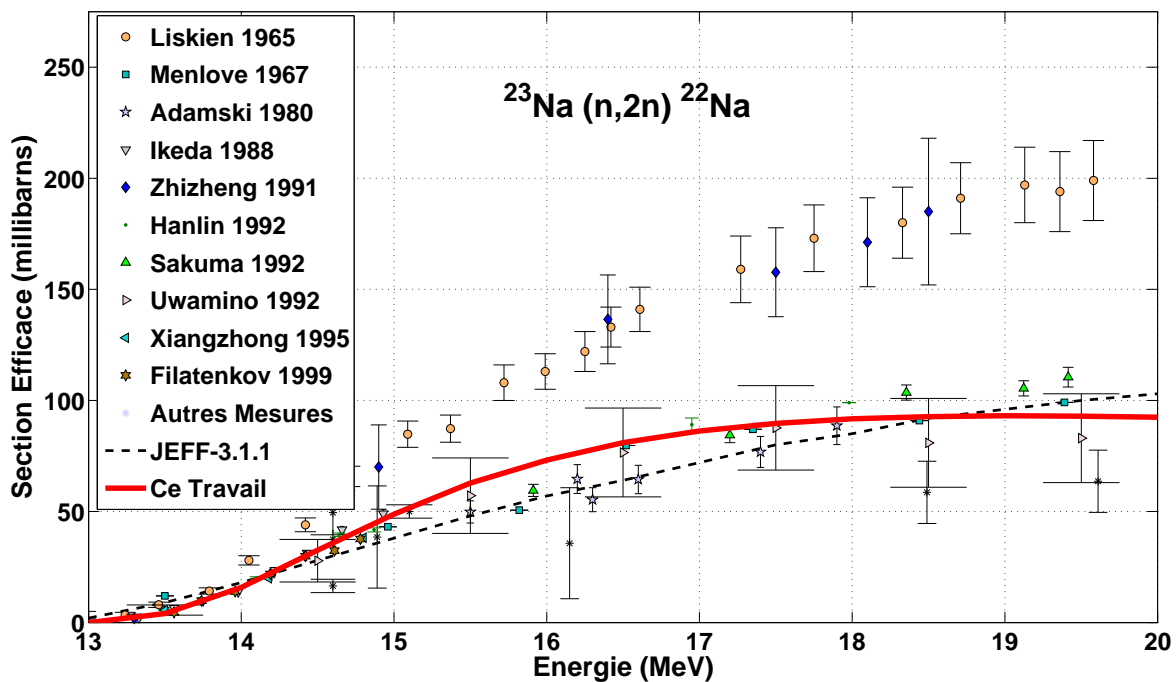


FIGURE 5.16. Section efficace pour la réaction  $(n, 2n)$  comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans JEFF-3.1.1

La section efficace  $(n, \gamma)$  n'a pas beaucoup d'importance dans le cas du  $^{23}\text{Na}$  (moins d'un millibarn) mais nous l'avons tout de même ajustée avec le peu de mesures expérimentales disponibles. Le résultat pour cette réaction est illustré sur la Figure 5.17, où nous avons globalement des valeurs proches des données expérimentales.

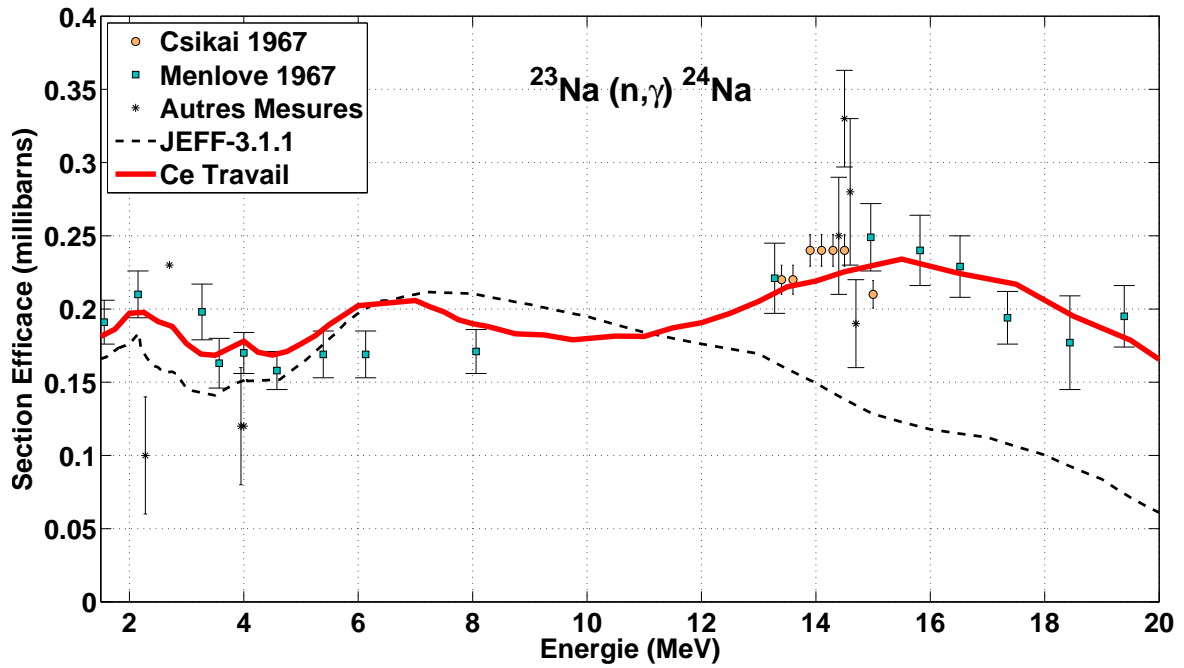


FIGURE 5.17. Section efficace pour la réaction  $(n, \gamma)$  comparée avec les données expérimentales et l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans JEFF-3.1.1

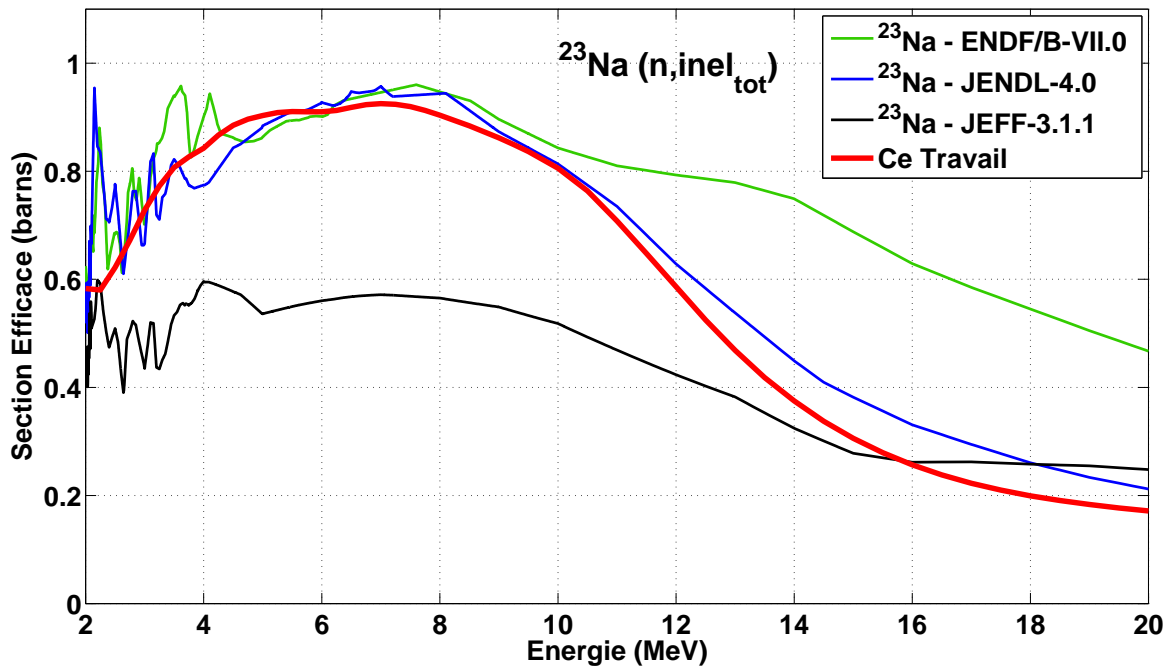


FIGURE 5.18. Section efficace inélastique totale  $(n, inel_{tot})$  (sections discrètes + continuum) comparée avec celles présentes dans les évaluations du  $^{23}\text{Na}$

Malgré le manque de mesures pour les niveaux inélastiques discrets, nous avons souhaité présenter notre section efficace inélastique totale et la confronter avec celles présentes dans les évaluations disponibles du  $^{23}\text{Na}$  (*cf.* Figure 5.18).

La section inélastique ré-évaluée ressemble peu ou prou à celle de JENDL-4.0, mis à part un décrochement après 10 MeV. Dans la zone d'énergie inférieure à 8 MeV, on peut noter que notre section est bien plus grande que celle de JEFF-3.1.1 (voir Chapitre 1 pour les explications concernant le niveau de l'inélastique dans le sodium de JEFF).

### 5.2.3 Covariances sur les Sections Efficaces

Les données présentes dans la base EXFOR proposent très rarement les incertitudes systématiques associées aux valeurs des mesures (le plus souvent, on ne sait pas si l'incertitude est statistique ou/et systématique...). Par conséquent, nous avons décidé d'attribuer arbitrairement des incertitudes pour les principales réactions.

Pour la propagation des incertitudes sur les paramètres de modèles (marginalisation), nous avons opté pour les incertitudes systématiques suivantes (retranscrites en incertitudes sur la normalisation) :

- section totale à 5% : on continue de suivre les indications de Larson dans la référence [11] ;
- section inélastique totale à  $\simeq 15\%$  : aucune mesure de disponible ;
- section de capture à  $\simeq 50\%$  : très peu de mesures et ces dernières sont très dispersées ;
- section  $(n, p)$  à  $\simeq 30\%$  : pour prendre en compte la dispersion des mesures après 10 MeV) ;
- section  $(n, \alpha)$  à  $\simeq 30\%$  : pour prendre en compte la dispersion des mesures (surtout après 10 MeV) ;
- section  $(n, 2n)$  à  $\simeq 40\%$  : dispersion des points + deux tendances très différentes dans les mesures.

Avec ces incertitudes de normalisation, nous avons employé une nouvelle fois la marginalisation par Monte-Carlo de CONRAD pour propager les incertitudes sur tous les paramètres :

- du modèle optique (10)
- de densité de niveaux (15)
- de déformation (2 paramètres pour le calcul par DWBA)
- de la *Giant Dipole Resonance* (11)
- des modèles optiques des particules chargées et du Pré-Équilibre dans TALYS (8)

### 5.2.3.1 Incertitudes et Corrélations Multigroupes

Comme pour le domaine des résonances résolues (RRR), on utilise CONRAD pour mettre en groupe les sections efficaces, incertitudes et corrélations suite à la marginalisation sur les sections totale et partielles décrite précédemment.

Notre domaine du continuüm commençant à partir de 2 MeV, nous avons préféré employer un découpage à 172 groupes pour la mise en groupe plutôt que le découpage à 33 groupes<sup>3</sup>. Ainsi, entre 2 et 20 MeV, on trouve une quinzaine de groupes qui permettent de décrire avec suffisamment de détail les nombreuses sections efficaces.

En premier lieu, la Figure 5.19 nous montre les sections efficaces multigroupes et les incertitudes associées aux réactions principales du  $^{23}\text{Na}$ . Les valeurs de ces sections efficaces accompagnées des incertitudes sont disponibles dans l'Annexe D.

Sur la Figure 5.20 sont proposées les matrices de corrélations pour les sections efficaces totale, élastique et inélastique. De plus, une des matrices de cross-corrélations (entre la réaction élastique et inélastique) est présentée, dans laquelle on note des corrélations négatives (anti-corrélations)<sup>4</sup>.

En Annexe D, le lecteur pourra trouver les matrices de corrélations complètes pour les réactions principales ("complètes" signifie que l'on a concaténé les matrices de covariances du domaine des résonances résolues et du continuüm).

---

3. Il y a seulement 4 groupes après 2 MeV dans ce découpage multigroupe.

4. Les réactions élastiques et inélastiques sont souvent vues comme une compétition pour la diffusion. Ainsi, elles doivent être anti-corrélées de telle sorte que lorsque l'une d'entre elles augmente, l'autre diminue.

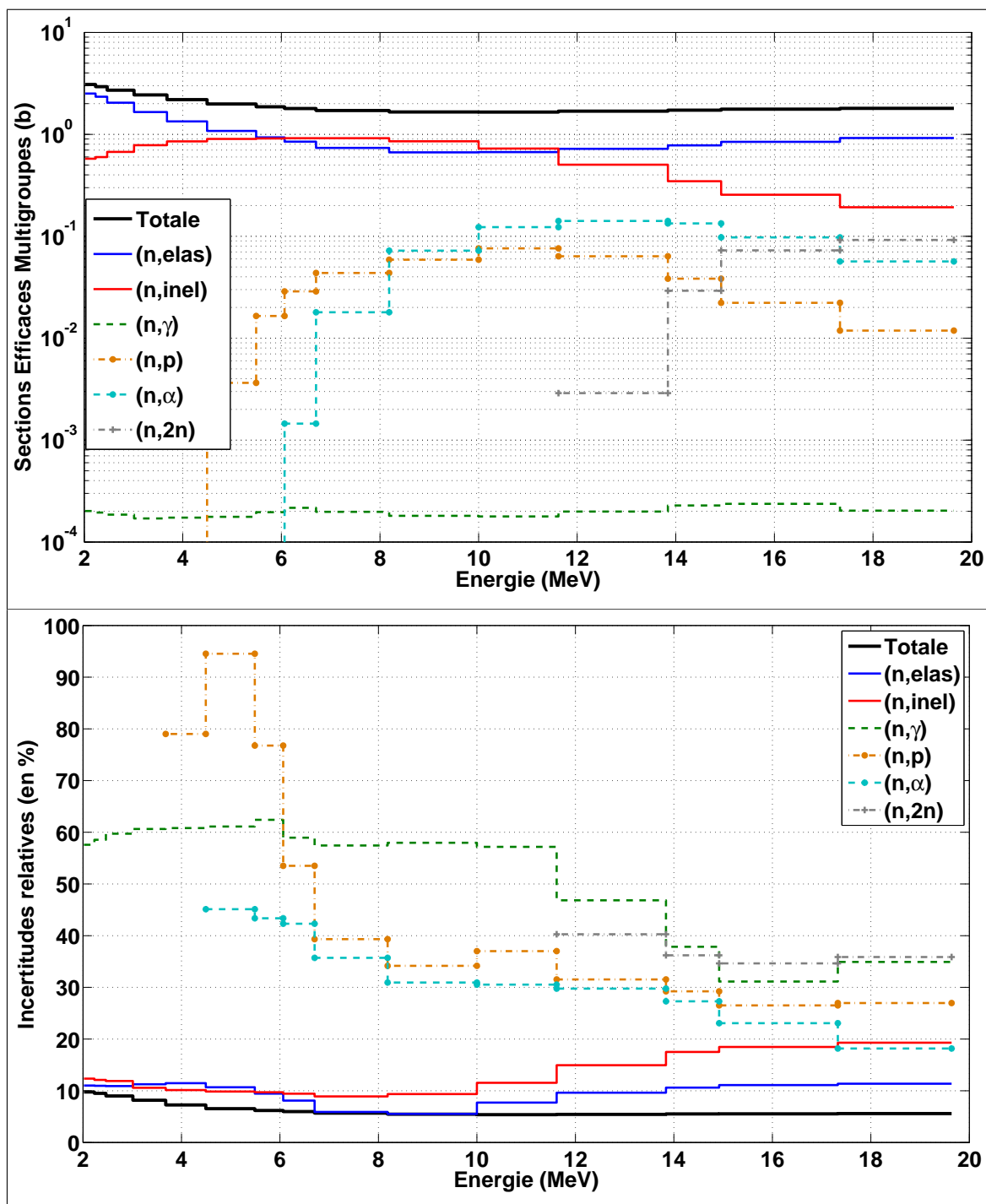


FIGURE 5.19. Sections efficaces multigroupes (à 172 groupes) et incertitudes relatives (en %) du domaine du continuum (après 2 MeV) pour notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$

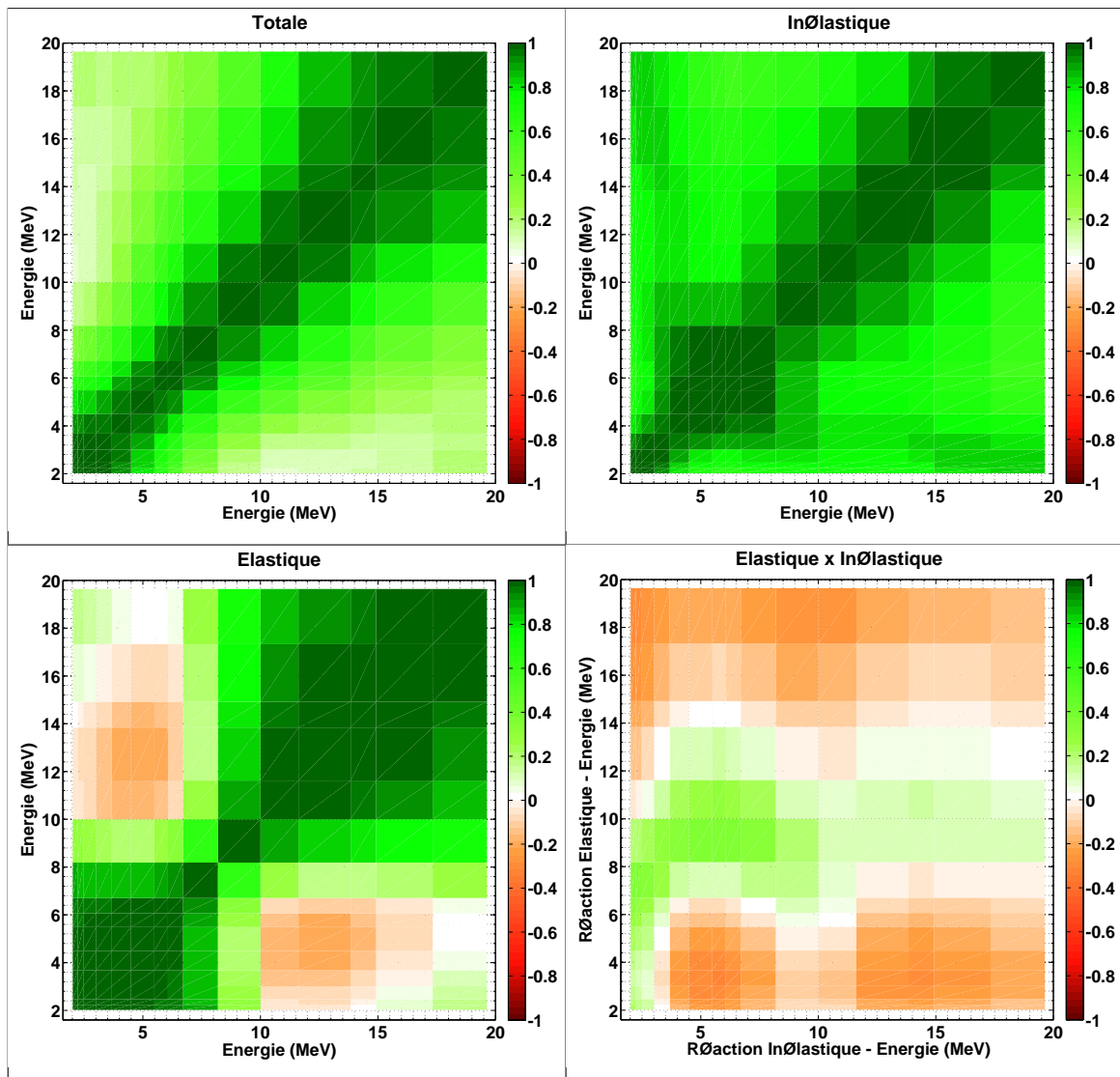


FIGURE 5.20. Matrices de corrélations et cross-corrélations dans le domaine du continuüm du  $^{23}\text{Na}$  (après 2 MeV) pour les sections efficaces totale, élastique et inélastique



### 5.3 Conclusion sur l'Évaluation avec les Données Microscopiques

Les sections efficaces du sodium ont été entièrement ré-évaluées à partir des données microscopiques disponibles dans la base EXFOR.

Le domaine des Résonances Résolues (RRR) a été étendu jusqu'à 2 MeV. Cette extension avait pour but de prendre en compte les mesures à haute résolution de Kopecky [13] pour la section efficace inélastique, puisque cette dernière présente des structures résonantes très importantes.

Au-delà de 2 MeV, nous avons fait débiter le continuum, faute de mesures précises pour les niveaux discrets inélastiques (le domaine des résonances aurait encore été élargi dans ce cas). Nous nous sommes appuyés par défaut sur des mesures moins précises pour les réactions  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$  et  $(n, 2n)$  essentiellement.

Dans la majorité des cas, l'ajustement de nos sections efficaces avec CONRAD nous a permis d'obtenir de bons accords avec les mesures microscopiques disponibles.

Pour les deux domaines, nous avons employé la technique de marginalisation par Monte-Carlo présente dans CONRAD pour propager les incertitudes systématiques des données expérimentales aux paramètres de modèles (paramètres de résonance et paramètres de modèles statistiques).

Après la marginalisation, nous avons produit les matrices de covariances en format multigroupe sur les sections efficaces par l'intermédiaire de CONRAD.

Les distributions angulaires que l'on utilisera dans cette évaluation proviendront des calculs effectués avec CONRAD/TALYS uniquement car nous avons éprouvé des difficultés lors de l'analyse simultanée des mesures de sections intégrées et des sections différentielles dans le RRR. Une analyse plus approfondie (mais beaucoup trop longue pour ces travaux de thèse...) de ces données serait intéressante puisque à ce jour, aucune évaluation n'est proposée, qui tienne compte à la fois des sections intégrées et des distributions angulaires lors de l'analyse de résonances.

Un autre point important à noter est lié aux manques de mesures pour les sections des niveaux inélastiques discrets. C. Rouki et A. Plompen [102], de l'IRMM de Geel, ont très récemment mesuré, avec une très bonne résolution, les six premiers niveaux inélastiques du sodium pour des énergies comprises entre 0.45 MeV et 3.8 MeV, confirmant au passage les mesures effectuées par Kopecky. Leurs mesures sont malheureusement arrivées trop tard

pour être prise en compte lors de notre analyse des données. On pourrait cependant envisager d'utiliser simultanément leurs données et celles de Larson [11] pour étendre une nouvelle fois le domaine résolu jusqu'à environ 3.8 MeV, puisque l'on observe des résonances très marquées jusqu'à au moins 6 MeV sur les mesures de section totale.

Malgré ces points, notre évaluation n'est pas terminée puisqu'il nous faut maintenant y intégrer l'information provenant des données intégrales. Ainsi, l'application des méthodes d'assimilation des données intégrales pour le  $^{23}\text{Na}$ , décrites au Chapitre 4, fait l'objet du prochain Chapitre.



# Évaluation avec les Données Intégrales

---

## Sommaire

<b>6.1</b>	<b>Application de l'Évaluation pour la Neutronique . . . . .</b>	<b>152</b>
6.1.1	Préparation de l'Évaluation . . . . .	152
6.1.2	Confrontation aux Calculs de Neutronique des RNR . . . . .	153
<b>6.2</b>	<b>Assimilation des Données Intégrales pour l'Évaluation . . . . .</b>	<b>158</b>
6.2.1	Choix de la Méthode . . . . .	159
6.2.2	Application de la Méthode et Interprétation . . . . .	160
6.2.3	Estimation des Incertitudes par Méthode Rétroactive avec IDA . . . . .	166
<b>6.3</b>	<b>Calculs d'Incertitudes sur les RNR . . . . .</b>	<b>170</b>
6.3.1	Présentation des Réacteurs . . . . .	170
6.3.2	Incertitudes sur le $k_{\text{eff}}$ . . . . .	170
6.3.3	Incertitudes sur la Vidange du Sodium . . . . .	171
6.3.4	Conclusions en Termes d'Incertitudes . . . . .	172
<b>6.4</b>	<b>Conclusion sur l'Évaluation avec les Données Intégrales . . . . .</b>	<b>173</b>

---

Dans ce Chapitre, nous allons voir comment se comporte notre l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  préparée à partir des expériences microscopiques (voir Chapitre précédent), sur les grandeurs neutroniques des RNR. Si cela est nécessaire, nous souhaitons ajouter à cette évaluation les informations provenant des expériences de type intégral, par le biais des méthodes d'Assimilation des Données Intégrales (ou IDA, *cf.* page 109).

## 6.1 Application de l'Évaluation pour la Neutronique

### 6.1.1 Préparation de l'Évaluation

Dans un premier temps, nous devons voir si l'évaluation du sodium, confectionnée uniquement avec des données microscopiques, donne des résultats acceptables pour les calculs de neutronique en RNR.

Pour cela, il nous est nécessaire de créer une bibliothèque applicative de cette évaluation qui servira à alimenter le code de neutronique utilisé. Cette bibliothèque est le fruit de la transformation du fichier évalué (fourni en ASCII dans le format ENDF-6) par l'intermédiaire de codes dits de *processing*. Concrètement, chaque code de neutronique nécessite un ensemble de codes de *processing* et plus précisément :

- TRIPOLI (Monte-Carlo) :
  - NJOY [77] : pour transformer l'évaluation en PENDF<sup>1</sup> à la température souhaitée ;
  - CALENDF [103] : pour générer les tables de probabilités dans le domaine non-résolu de l'évaluation (il n'existe pas pour le  $^{23}\text{Na}$ ), qui permet de calculer l'autoprotection dans TRIPOLI.
- ERANOS (Déterministe) :
  - NJOY [77] : pour transformer l'évaluation en GENDF<sup>2</sup> à la température souhaitée ;
  - CALENDF [103] : pour générer les tables de probabilités (TP) dans le domaine résolu et non-résolu de l'évaluation, essentielles pour les calculs d'autoprotection dans ERANOS pour la phase cellule avec ECCO ;
  - MERGE [104] : pour fusionner le GENDF produit par NJOY et les TP de CALENDF dans un même fichier ;
  - GECCO [105] : pour mettre le fichier produit par MERGE dans un format accepté par ERANOS (les sections partielles sont mises dans des "macro"-sections du type ELASTIC, INELASTIC, N,XN, etc...) dans un format de type binaire.

Quel que soit le code de neutronique employé, cela nécessite un fichier évalué complet au format ENDF-6 en amont. À la fin du Chapitre 5, nous avons déjà préparé une partie de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$ , en particulier la MF2 pour les paramètres de résonances et la MF3 pour les sections ponctuelles. Pour que cette dernière soit pleinement utilisable, il manque les distributions angulaires (MF4) et énergétiques (MF5) (ou angulo-énergétiques placées en MF6).

---

1. PENDF = *Pointwise Evaluated Nuclear Data File* où l'évaluation est reconstruite dans un format ponctuel.

2. GENDF = *Groupwise Evaluated Nuclear Data File* où l'évaluation est reconstruite dans un format multigroupe.

Lors du précédent Chapitre, on a rencontré des difficultés avec les distributions angulaires dans le domaine des résonances résolues, en particulier pour les renvois à des angles supérieurs à  $90^\circ$  (rétro-diffusion). Suite à cela, nous avons décidé de prendre uniquement les distributions angulaires calculées à partir de notre jeu de paramètres de modèles statistiques via l'interface CONRAD/TALYS. Cette décision est justifiée, car une large majorité des isotopes ayant une évaluation dans JEFF-3.1.1 ou ENDF/B-VII.0 présente des distributions angulaires (et énergétiques) calculées à partir de modèles optiques et modèles statistiques (que l'on trouve dans les codes TALYS et EMPIRE).

Nos distributions angulaires pour la réaction élastique sont calculées à partir de 50 keV<sup>3</sup> et s'étendent jusqu'à 20 MeV. De même, les renvois angulaires pour les autres réactions (inélastiques discrètes) sont automatiquement calculées par TALYS par l'intermédiaire de CONRAD.

Tout comme les distributions angulaires, nos renvois énergétiques (pour le continuum inélastique notamment) sont produits par TALYS, via l'interface avec CONRAD et notre jeu de paramètres ajustés.

Le montage final de notre évaluation est effectué avec le code TEFAL [106], qui nous a aimablement été donné par A.J. Koning de NRG. TEFAL permet de transformer les (très nombreux) fichiers de sortie de TALYS dans le format ENDF-6 utilisé pour les évaluations. À partir d'une évaluation semi-complète comme la nôtre (MF2 et MF3), il ajoute les *Files* manquantes, en l'occurrence la MF4, MF5 et MF6 pour notre évaluation.

L'évaluation est maintenant complète et doit subir un *processing* pour être mise sous forme de bibliothèque applicative, qui sera ingérée par un code d'application neutronique.

### 6.1.2 Confrontation aux Calculs de Neutronique des RNR

Pour savoir si notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  se comporte correctement du point de vue intégral, nous avons repassé les calculs de réactivité et de vidanges du sodium, effectués dans le Chapitre 2, en substituant l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1 par notre nouvelle évaluation.

Seuls les calculs déterministes (ERANOS+PARIS) ont été traités car nous avons remarqué que le calcul avec TRIPOLI ne permettait pas d'estimer très précisément l'impact des données nucléaires à cause de l'incertitude statistique de calcul trop forte, en particulier pour les vidanges.

---

3. Les renvois dans le centre de masse sont considérées isotropes avant cette énergie, ce qui est semble être le cas dans la réalité.

Pour mettre en relief nos résultats, nous les avons associés aux calculs effectués avec l'évaluation du sodium de JEFF-3.1.1 et celle d'ENDF/B-VII.0<sup>4</sup> (les résultats de ces calculs sont tirés des Tables du Chapitre 2). Dans les Tables qui vont suivre, on indiquera par le sigle *JEFF-3.2 $\beta$* <sup>5</sup> les résultats obtenus avec notre nouvelle évaluation.

### 6.1.2.1 Résultats sur la Réactivité

La Table 6.1 présente les résultats obtenus sur la réactivité avec notre évaluation. On observe une baisse assez importante de la réactivité par rapport à celle calculée avec l'évaluation dans JEFF-3.1.1 mais on constate une hausse vis-à-vis de celle d'ENDF/B-VII.0.

$\rho$ (pcm)	JEFF-3.2 $\beta$	JEFF-3.1.1	ENDF/B-VII.0
PRE-RACINE I	<b>+205</b>	+443	+104
PRE-RACINE IIA	<b>+71</b>	+334	-40
PRE-RACINE IIB	<b>-225</b>	+38	-330
ZPPR-10A	<b>+51</b>	+333	+3
RACINE-1A	<b>-135</b>	+160	-219
RACINE-1D Na Fol.	<b>+425</b>	+719	+338
RACINE-1D B <sub>4</sub> C Rod	<b>+221</b>	+497	+132
CIRANO ZONA2A	<b>-107</b>	+260	-274
CIRANO ZONA2B	<b>-1366</b>	-1071	-1496

TABLE 6.1. Résultats avec notre nouvelle évaluation pour la réactivité sur les cœurs *MA-SURCA* et *ZPPR*

### 6.1.2.2 Résultats sur la Vidange du Sodium

On trouve dans la Table 6.2 les résultats obtenus pour les vidanges du sodium dans les cœurs PRE-RACINE IIA et PRE-RACINE IIB (on rappelle que la couleur bleue dans les différentes Tables signifie que la vidange a lieu uniquement dans du combustible tandis que la couleur orange désigne une vidange qui comprend des éléments fertiles ou de structure).

4. On substitue seulement l'évaluation du <sup>23</sup>Na par une autre de la bibliothèque JEFF-3.1.1. Autrement dit, toutes les évaluations proviennent de JEFF-3.1.1 sauf celle du sodium.

5. Cette évaluation, quand celle-ci sera entièrement validée, sera proposée à la communauté JEFF pour la sortie de la bibliothèque JEFF-3.2.

Les vidanges effectuées dans le cœur PRE-RACINE I ne sont pas mentionnées ici car on avait noté dans le Chapitre 2 qu'elles n'étaient pas très sensibles aux données nucléaires du sodium. Les résultats sont donnés sous forme de  $(C - E)$  en pcm.

Pour ces cœurs PRE-RACINE, nos données nucléaires du sodium fournissent des valeurs pour les vidanges globalement dégradées par rapport à JEFF-3.1.1, mais en moyenne assez proches de celles d'ENDF/B-VII.0.

$(C - E)$ sur $\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	JEFF-3.2 $\beta$	JEFF-3.1.1	ENDF/B-VII.0
PR2A SVRE 01	$\pm 4$	<b>1.5</b>	-0.3	1.0
PR2A SVRE 02	$\pm 3$	<b>5.1</b>	-0.2	3.7
PR2A SVRE 03	$\pm 3$	<b>10.3</b>	1.6	8.6
PR2A SVRE 04	$\pm 3$	<b>16.0</b>	3.9	14.9
PR2A SVRE 05	$\pm 3$	<b>17.7</b>	2.0	18.3
PR2A SVRE 06	$\pm 4$	<b>17.7</b>	-0.3	20.3
PR2A SVRE 07	$\pm 4$	<b>2.4</b>	0.5	3.9
PR2A SVRE 08	$\pm 4$	<b>7.2</b>	0.6	9.2
PR2A SVRE 09	$\pm 5$	<b>6.7</b>	-2.1	10.6
PR2A SVRE 10	$\pm 10$	<b>26.3</b>	-0.9	27.7
PR2A SVRE 11	$\pm 10$	<b>41.4</b>	-0.6	44.2
PR2A SVRE 12	$\pm 7$	<b>50.8</b>	-36.4	60.5
PR2A SVRE 13	$\pm 12$	<b>38.4</b>	-20.4	45.5
PR2A SVRE 14	$\pm 12$	<b>17.5</b>	-22.7	22.5
PR2B SVRE 1	$\pm 3$	<b>1.0</b>	-0.7	0.3
PR2B SVRE 2	$\pm 3$	<b>9.5</b>	1.0	7.1
PR2B SVRE 3	$\pm 3$	<b>19.5</b>	4.1	19.1
PR2B SVRE 4	$\pm 8$	<b>29.8</b>	-11.4	30.0
PR2B SVRE 5	$\pm 8$	<b>52.7</b>	-33.4	57.2

TABLE 6.2. Résultats  $\Delta\rho_{Na}$  avec notre nouvelle évaluation dans les cœurs PRE-RACINE-IIA et PRE-RACINE-IIB

Les résultats sur les vidanges issues du cœur ZPPR-10A sont illustrés dans la Table 6.3. Une nouvelle fois, nos valeurs de  $(C - E)$  obtenues sont très proches de celles de l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  dans ENDF/B-VII.0 et sur-estiment en moyenne les vidanges dans ce cœur. Par contre, nous produisons de meilleures tendances qu'avec les données de JEFF-3.1.1.



$(C - E)$ (pcm) sur $\Delta\rho_{Na}$	$\sigma$ exp. (pcm)	JEFF-3.2 $\beta$	JEFF-3.1.1	ENDF/B-VII.0
SVRE 01	$\pm 0.5$	<b>2.6</b>	0.6	2.5
SVRE 02	$\pm 0.9$	<b>4.6</b>	-1.9	4.2
SVRE 03	$\pm 1.7$	<b>7.3</b>	-5.1	6.6
SVRE 04	$\pm 1.7$	<b>10.0</b>	-4.0	9.5
SVRE 05	$\pm 1.9$	<b>10.6</b>	-7.0	10.2
SVRE 06	$\pm 2.2$	<b>9.0</b>	-13.2	9.0
SVRE 07	$\pm 2.1$	<b>7.3</b>	-15.5	7.6
SVRE 08	$\pm 2.0$	<b>7.6</b>	-16.4	8.5
SVRE 09	$\pm 1.9$	<b>5.9</b>	-19.8	7.4
SVRE 10	$\pm 1.8$	<b>7.8</b>	-18.1	9.5
SVRE 11	$\pm 1.6$	<b>12.7</b>	-13.9	14.9
SVRE 12	$\pm 1.4$	<b>18.4</b>	-9.1	21.1

TABLE 6.3: Résultats  $\Delta\rho_{Na}$  avec notre nouvelle évaluation dans le cœur ZPPR-10A

$(C - E)$ (pcm) sur $\Delta\rho_{Na}$	$\sigma$ exp. (pcm)	JEFF-3.2 $\beta$	JEFF-3.1.1	ENDF/B-VII.0
R1A SVRE 01	$\pm 3$	<b>6.3</b>	1.0	6.7
R1A SVRE 02	$\pm 6$	<b>18.4</b>	-3.3	18.6
R1A SVRE 03	$\pm 12$	<b>14.8</b>	-5.9	12.4
R1A SVRE 04	$\pm 9$	<b>41.4</b>	7.3	41.7
R1A SVRE 05	$\pm 4$	<b>8.9</b>	-3.6	11.1
R1A SVRE 06	$\pm 5$	<b>16.3</b>	0.1	16.2
R1A SVRE 07	$\pm 7$	<b>32.4</b>	4.2	32.4
R1A SVRE 08	$\pm 6$	<b>20.2</b>	9.1	20.3
R1A SVRE 09	$\pm 9$	<b>50.8</b>	31.4	54.1
R1A SVRE 10	$\pm 8$	<b>28.2</b>	-5.6	28.5
R1A SVRE 11	$\pm 7$	<b>9.4</b>	-0.3	9.4
R1A SVRE 12	$\pm 6$	<b>-10.2</b>	-14.9	-8.7
R1A SVRE 13	$\pm 4$	<b>11.1</b>	6.5	11.9
R1A SVRE 14	$\pm 4$	<b>13.5</b>	-2.3	13.8
R1D-NaF SVRE 1	$\pm 5$	<b>1.8</b>	-4.8	4.3
R1D-NaF SVRE 2	$\pm 5$	<b>50.4</b>	14.8	50.3
R1D-B <sub>4</sub> C SVRE 2	$\pm 5$	<b>2.7</b>	-17.4	3.2

TABLE 6.4. Résultats  $\Delta\rho_{Na}$  avec notre nouvelle évaluation dans les cœurs RACINE-IA, RACINE-ID (Na Follower et B<sub>4</sub>C Rod)

Dans la Table 6.4, on trouve les résultats des SVRE sur les cœurs RACINE-IA et RACINE-ID (Na Follower et B<sub>4</sub>C Rod) pour notre évaluation. Cette dernière fournit des calculs de vidange très proches d'ENDF/B-VII.0 dans RACINE-IA et par conséquent, les accords avec les mesures expérimentales sont dégradés en comparaison avec le sodium de JEFF-3.1.1.

On peut cependant noter que pour le cœur RACINE-ID B<sub>4</sub>C Rod, notre évaluation donne un résultat en très bon accord avec l'expérience et meilleur qu'avec JEFF-3.1.1.

Enfin, la Table 6.5 présente les résultats pour le cœur CIRANO ZONA2A avec notre <sup>23</sup>Na. On rappelle que les problèmes de méthodes dans le cœur ZONA2B entachaient énormément les calculs de vidange du sodium et nous les avons retirés de la Table.

Les valeurs obtenues sont moins bonnes qu'avec JEFF-3.1.1 et sont mêmes légèrement supérieures à celles d'ENDF/B-VII.0. Le spectre dans ce cœur est nettement plus dur et touche ici un domaine d'énergie où les différences sur les données nucléaires ont un impact important.

$(C - E)$ sur $\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	JEFF-3.2 $\beta$	JEFF-3.1.1	ENDF/B-VII.0
SVRE 1	$\pm 2.7$	<b>2.0</b>	-2.5	-0.7
SVRE 2	$\pm 2.7$	<b>8.5</b>	-1.1	5.1
SVRE 3	$\pm 3.5$	<b>12.6</b>	-3.7	11.8
SVRE 4	$\pm 3.0$	<b>8.4</b>	2.2	10.5

TABLE 6.5. Résultats  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  avec notre nouvelle évaluation dans le cœur CIRANO ZONA2A

### 6.1.2.3 Conclusions sur les Calculs de Neutronique

Les calculs présentés dans les Tables précédentes avec notre évaluation montrent des résultats qui semblent moins bons que JEFF-3.1.1 dans l'ensemble. Nous rappelons cependant que les sections partielles du <sup>23</sup>Na dans JEFF-3.1.1 ont été fortement modifiées afin d'obtenir de bons résultats sur les vidanges dans MASURCA par le biais d'un ajustement multigroupe. De plus, il faut garder à l'esprit qu'une erreur a été commise entre 450 keV et 2 MeV sur la section élastique (et la totale) de cette évaluation.

Les vidanges du sodium calculées sont globalement du même ordre de grandeur entre notre évaluation et celle d'ENDF/B-VII.0, ce qui est parfaitement logique puisque nous avons basé notre section efficace totale sur les mesures de Larson, que l'on retrouve en intégralité

dans ENDF/B-VII.0. Les sections élastique et inélastique dans JEFF-3.1.1 après 2 MeV sont très différentes et celles-ci semblent être la cause des résultats globalement bons calculés avec cette évaluation.

On observe en général une dégradation systématique des résultats sur les expériences réalisées dans MASURCA avec les évaluations autres que JEFF-3.1.1 et cela laisse penser qu'il existerait un biais imputable aux mesures réalisées sur cette maquette. En outre, les résultats des vidanges sur ZPPR-10A sont assez bons avec notre évaluation mais nous avons également des problèmes sur cette configuration à cause de la valeur du  $\beta_{\text{eff}}$  qui diffère grandement de celle calculée à l'époque et qui re-normalise toutes nos valeurs de vidange du sodium pour ce cœur. Il pourrait s'agir d'un effet spectral puisque les calculs réalisés sur MASURCA sont généralement faits avec des combustibles plus enrichis que ZPPR-10A, ce qui conduit à des spectres plus durs pour les expériences de vidange mesurées dans la maquette de Cadarache.

On voit donc qu'il est nécessaire, (1) d'investiguer davantage pour déterminer si cet éventuel biais sur MASURCA existe, (2) d'interpréter d'autres expériences de vidange du sodium effectuées sur des maquettes critiques différentes de MASURCA (ZPPR, BFS, SNEAK, etc...) afin de découvrir si des systématiques apparaissent.

Quoi qu'il en soit, les valeurs de  $(C - E)$  obtenues avec notre évaluation du sodium nous montrent qu'un retour des informations intégrales sur les paramètres de modèles serait intéressant pour tenter d'améliorer les tendances intégrales, sur les vidanges sodium en particulier.

## 6.2 Assimilation des Données Intégrales pour l'Évaluation

Nous allons tenter maintenant d'ajuster les paramètres de modèles de notre évaluation en utilisant certaines expériences de vidange du sodium, par l'intermédiaire des méthodes d'Assimilation des Données Intégrales développées au sein de CONRAD. Dans notre cas, nous travaillons directement sur les paramètres de modèles (et non pas sur les sections efficaces multigroupes comme cela fut fait par le passé avec la bibliothèque ajustée ERALIB-1) afin de produire, au final, une évaluation pour la communauté JEFF (qui puisse être utilisée par tous les codes d'application). De plus, le passage par les paramètres de modèles permet par exemple de prendre en compte les effets provoqués par les distributions angulaires, chose qui n'est pas réalisable avec les ajustements des sections efficaces multigroupes.

Cet exercice permettrait, en premier lieu d'obtenir de meilleurs accords avec les expériences intégrales (à travers la modifications des valeurs moyennes des paramètres), en se-

cond lieu une réduction non-négligeable des incertitudes sur les sections efficaces et, *in fine*, une réduction des incertitudes pour les grandeurs intégrales. Cependant, nous sommes bien conscients que les expériences de vidange du sodium ne sont pas les plus “meilleures” pour améliorer les données nucléaires du sodium et qu’il faudrait employer des mesures plus dédiés au  $^{23}\text{Na}$  comme ce qui est fait par exemple dans le réacteur MINERVE ou encore avec des mesures de propagation dans du sodium (JANUS-8 [19], etc. . .). C’est pourquoi l’assimilation des données intégrales que nous allons présenter maintenant demeure avant tout un exercice.

### 6.2.1 Choix de la Méthode

Les données intégrales (les mesures de vidange sodium dans notre cas) doivent permettre d’apporter des informations, qui sont manquantes aux mesures microscopiques. Pendant l’évaluation du  $^{23}\text{Na}$  avec les données microscopiques dans le Chapitre 5, nous avons remarqué qu’il manquait un certain nombre de mesures dans le domaine du continuum (notamment pour les réactions inélastiques discrètes) entre 2 et 20 MeV. Par conséquent, nous allons ajuster les paramètres de modèles statistiques (modèle optique + densité de niveaux + etc. . .), au nombre de 46 dans notre évaluation, sur les expériences de vidange réalisées dans MASURCA et ZPPR.

Nous avons proposé, dans le Chapitre 4, trois méthodes pour l’Assimilation des Données Intégrales (IDA), chacune ayant ses avantages et inconvénients : “low fidelity”, “brute force” et “coupled”. Le nombre de paramètres que l’on souhaite ajuster est trop grand pour employer la méthode “brute force” puisque le temps de calcul est proportionnel à ce nombre de paramètres. La méthode “low fidelity” est un peu trop approximative par rapport à la méthode “coupled”. Cette dernière semble être la plus approprié puisque le nombre de paramètres à ajuster n’est pas vraiment déterminant en termes de temps de calcul (temps passé pour le *processing* principalement).

Le dernier point délicat que nous devons aborder pour utiliser les techniques d’IDA concerne les biais sur les valeurs calculées. En effet, il ne faut, en aucun cas, ajuster des paramètres de modèles sur des valeurs calculées entachées de biais. Pour la création de la bibliothèque ajustée ERALIB1 [8], ce problème avait été partiellement évité puisque ERALIB ne pouvait être utilisée qu’avec ERANOS et avec des schémas de calcul globalement proches de celui utilisé pour modéliser les expériences pour ERALIB1. De cette manière, l’ajustement “corrige” à la fois les erreurs des données nucléaires mais également les biais introduits par le schéma de calcul employé. En revanche, cela implique que ce même schéma de calcul doit être employé si l’on compte utiliser cette bibliothèque ajustée, or dans notre cas, nous souhaitons que notre évaluation puisse être utilisée avec tous les codes d’application (évaluation pour la

communauté JEFF). Par conséquent, il faut trouver une solution afin de minimiser, voire de supprimer complètement, les biais du schéma de calcul pour pouvoir appliquer les méthodes par IDA.

Un moyen simple d'éviter d'introduire des biais dans l'ajustement est d'utiliser les méthodes d'IDA de manière hybride : les valeurs intégrales sont calculées à l'aide d'un code Monte-Carlo en maximisant la convergence des scores estimés et la matrice de dérivées est produite avec un code déterministe. Ainsi, seuls des biais (faibles) subsistent sur le calcul des dérivées, que l'on peut considérer comme du second ordre. Dans le cas où l'incertitude statistique du Monte-Carlo reste prépondérante, on peut faire l'hypothèse suivante :

$$M'_E = M_E + M_{MD} \quad (6.1)$$

où  $M'_E$  est la matrice de covariances expérimentale, contenant toute l'incertitude expérimentale, introduite pour l'ajustement dans l'Équation (4.7) (cf. page 100),  $M_E$  est la vraie matrice de covariances expérimentale et  $M_{MD}$  est la matrice de covariances provenant des défauts du modèle employé, matrice aussi appelée *model defects*. Cette dernière est nommée ainsi car elle permet de rendre compte de la méconnaissance qu'introduit la modélisation dans la phase d'ajustement. D'ailleurs, si les biais dans le schéma déterministe, dans notre cas, étaient vraiment quantifiables, ils seraient introduits dans la matrice  $M_{MD}$ . Dans le cas où  $M_{MD}$  a une origine stochastique, on suppose alors qu'elle est diagonale, avec son  $i^e$  terme qui s'écrit :  $M_{MD}(i, i) = (\sigma_i^{stat})^2$  avec  $\sigma_i^{stat}$ , l'incertitude statistique du  $i^e$  calcul par Monte-Carlo.

### 6.2.2 Application de la Méthode et Interprétation

L'utilisation d'une méthode hybride (Monte-Carlo + Déterministe) ne nous permet pas de calculer toutes les valeurs intégrales de vidange qui ont été interprétées et exposées au cours du Chapitre 2. Nous avons choisi les vidanges du sodium qui nous paraissaient les plus représentatives et les plus sensibles aux données nucléaires du sodium :

- PRE-RACINE-IIA : SVRE8 et SVRE10 ;
- PRE-RACINE-IIB : SVRE5 ;
- ZPPR-10A : SVRE4 à SVRE9 ;
- RACINE-IA : SVRE4 et SVRE10 ;
- RACINE-ID Na Fol. : SVRE2.

Les calculs de dérivées sont effectués à travers la plateforme PARIS [23], qui offre des informations sur les matrices de transfert et donc sur l'anisotropie, ce que ne permet pas le code ERANOS. Pour les configurations étudiées, on utilise le solveur de transport Sn SNATCH,

en 3D cartésien, pour une meilleure précision dans l'estimation de ces dérivées. Les valeurs des vidanges sont calculées avec le code stochastique TRIPOLI-4.7 [26] et on s'attache à obtenir des incertitudes de calcul les plus faibles possibles.

La Table 6.6 liste les valeurs  $(C - E)$  obtenues avec TRIPOLI pour les vidanges qui sont utilisées pour l'application de la méthode IDA. On peut comparer ces résultats avec ceux calculés par la voie déterministe (ECCO+PARIS) et voir que les biais peuvent être très grands, tout particulièrement dans les cœurs PRE-RACINE-IIB et ZPPR-10A. Ces différences entre Monte-Carlo et déterministe justifient amplement le choix de notre méthode hybride.

$(C - E)$ sur $\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	TRIPOLI 3D - XYZ	ECCO-PARIS 3D - XYZ
PRE-RACINE-IIA SVRE 8	$\pm 4.0$	21.4 $\pm$ 8.3	7.2
PRE-RACINE-IIA SVRE 10	$\pm 10.0$	30.8 $\pm$ 8.3	26.3
PRE-RACINE-IIB SVRE 5	$\pm 8.0$	110.3 $\pm$ 8.3	52.7
ZPPR-10A SVRE 4	$\pm 1.7$	18.4 $\pm$ 7.5	10.0
ZPPR-10A SVRE 5	$\pm 1.9$	23.1 $\pm$ 7.5	10.6
ZPPR-10A SVRE 6	$\pm 2.2$	28.4 $\pm$ 7.5	9.0
ZPPR-10A SVRE 7	$\pm 2.1$	29.1 $\pm$ 7.5	7.3
ZPPR-10A SVRE 8	$\pm 2.0$	33.0 $\pm$ 7.5	7.6
ZPPR-10A SVRE 9	$\pm 1.9$	30.2 $\pm$ 7.5	5.9
RACINE-IA SVRE 4	$\pm 9.0$	45.4 $\pm$ 7.7	41.4
RACINE-IA SVRE 8	$\pm 8.0$	20.9 $\pm$ 7.7	28.2
RACINE-ID Na Fol. SVRE 2	$\pm 5.0$	38.3 $\pm$ 7.7	50.4

TABLE 6.6: Valeurs obtenues avec TRIPOLI utilisées comme *a priori* dans la méthode IDA

Avec ces résultats en main, on applique la première itération de la méthode IDA “coupled” sur les paramètres associés au domaine du continuum de notre évaluation. Après l'ajustement (certains paramètres ont beaucoup évolué), on produit une nouvelle évaluation avec les paramètres *a posteriori* pour constater l'apport des données intégrales.

Sur la Figure 6.1, on montre les sections efficaces totale et inélastique, avant et après l'application de la méthode IDA. Les sections après l'ajustement ont nettement été abaissées, elles ne sont donc plus en accord avec aucune mesure microscopique existante (également présente sur la Figure 6.1) et elles ressemblent énormément à celles du sodium dans JEFF-3.1.1, en particulier la section inélastique.

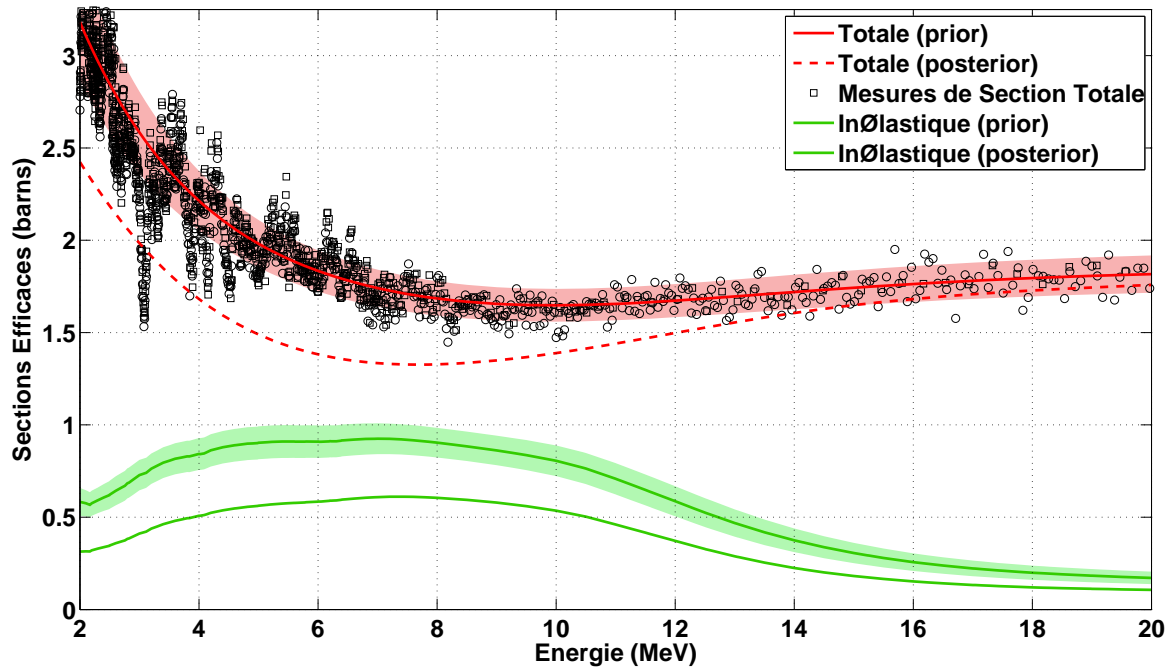


FIGURE 6.1. Sections efficaces totale et inélastique, avant (prior) et après (posterior) l’ajustement par la méthode IDA. Les bandes colorées disposées avec les sections efficaces représentent les incertitudes avant cet ajustement. Quelques mesures de section efficace totale sont également présentées.

Par contre, l’ajustement a aussi des effets bénéfiques puisque l’on améliore de manière significative toutes les valeurs ( $C - E$ ) qui sont listées dans la Table 6.7. Une autre preuve du bon fonctionnement de la méthode est la réduction du  $\chi^2$ , ce dernier valant 213.6 avec les données *a priori* et 40.7 après la méthode IDA (*a posteriori*).

Au vue des sections efficaces obtenues dans cet exercice, on peut conclure qu’il n’est pas possible d’obtenir un bon compromis à la fois avec les mesures microscopiques et intégrales pour notre cas avec le  $^{23}\text{Na}$  puisque le travail d’évaluation avec les données microscopiques, réalisé lors du Chapitre 5, se trouve très dégradé par l’assimilation de données intégrales.

Cette tentative d’ajustement nous montre une nouvelle fois qu’il faut être très prudent lors de l’utilisation de l’IDA et que le choix des expériences employées sont très important. Une des principales raisons du “mauvais” fonctionnement des techniques par IDA dans cette étude peut s’expliquer simplement si l’on fait mention du fait que l’isotope du sodium n’est pas celui auquel les effets en réactivité de vidange dans les RNR-Na sont les plus sensibles.

$(C - E)$ sur $\Delta\rho_{\text{Na}}$ (pcm)	<i>Prior</i>	<i>Posterior</i>
PRE-RACINE-IIA SVRE 8	21.4	17.0
PRE-RACINE-IIA SVRE 10	30.8	2.3
PRE-RACINE-IIB SVRE 5	110.3	16.7
ZPPR-10A SVRE 4	18.4	5.5
ZPPR-10A SVRE 5	23.1	6.8
ZPPR-10A SVRE 6	28.4	8.1
ZPPR-10A SVRE 7	29.1	8.4
ZPPR-10A SVRE 8	33.0	11.1
ZPPR-10A SVRE 9	30.2	7.0
RACINE-IA SVRE 4	45.4	8.6
RACINE-IA SVRE 8	20.9	-17.2
RACINE-ID Na Fol. SVRE 2	38.3	1.0

TABLE 6.7: Valeurs  $(C - E)$  obtenues avant et après l'assimilation de données intégrales

En effet, cette grandeur intégrale est extrêmement dépendante des données nucléaires d'une grande majorité des actinides (les Uraniums et les Plutoniums dans un réacteur avec du combustible neuf). Les vidanges sont également sensibles aux éléments de structure majoritaires comme le  $^{16}\text{O}$ <sup>6</sup> et le  $^{56}\text{Fe}$ .

Les Figures 6.2 et 6.3 permettent d'illustrer qualitativement les sensibilités relatives (en %/%) d'une vidange typique d'un cœur SFR, étudié au CEA, aux sections efficaces dans ERANOS de quelques isotopes majeurs. On peut voir que les sensibilités aux réactions de CAPTURE et de FISSION sont bien grandes que les sensibilités à la diffusion.

D'après les Figures 6.2 et 6.3, si l'on veut améliorer les effets en réactivité de vidange en utilisant les méthodes d'IDA, il faut non seulement ajuster les paramètres de modèles du  $^{23}\text{Na}$  mais aussi ceux de l' $^{16}\text{O}$ , des  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$  et  $^{241}\text{Pu}$  (d'autres isotopes peuvent être ajoutés mais ont une contribution moindre à la vidange). Cela demanderait un travail très important de préparation à l'évaluation d'un grand nombre d'isotopes majeurs et dépasse de loin le cadre de cette thèse.

Malgré tout, le LEPh, laboratoire dans lesquels sont conduits ces travaux, compte s'investir dans les prochaines années dans un tel projet où les techniques par IDA seraient de plus en plus mises à contribution pour les nouvelles évaluations.

---

6. Les cœurs RNR-Na étudiés au CEA possèdent le plus souvent des combustibles de type oxyde. D'autres études sont réalisées sur des combustibles métalliques ou sous forme carbure.



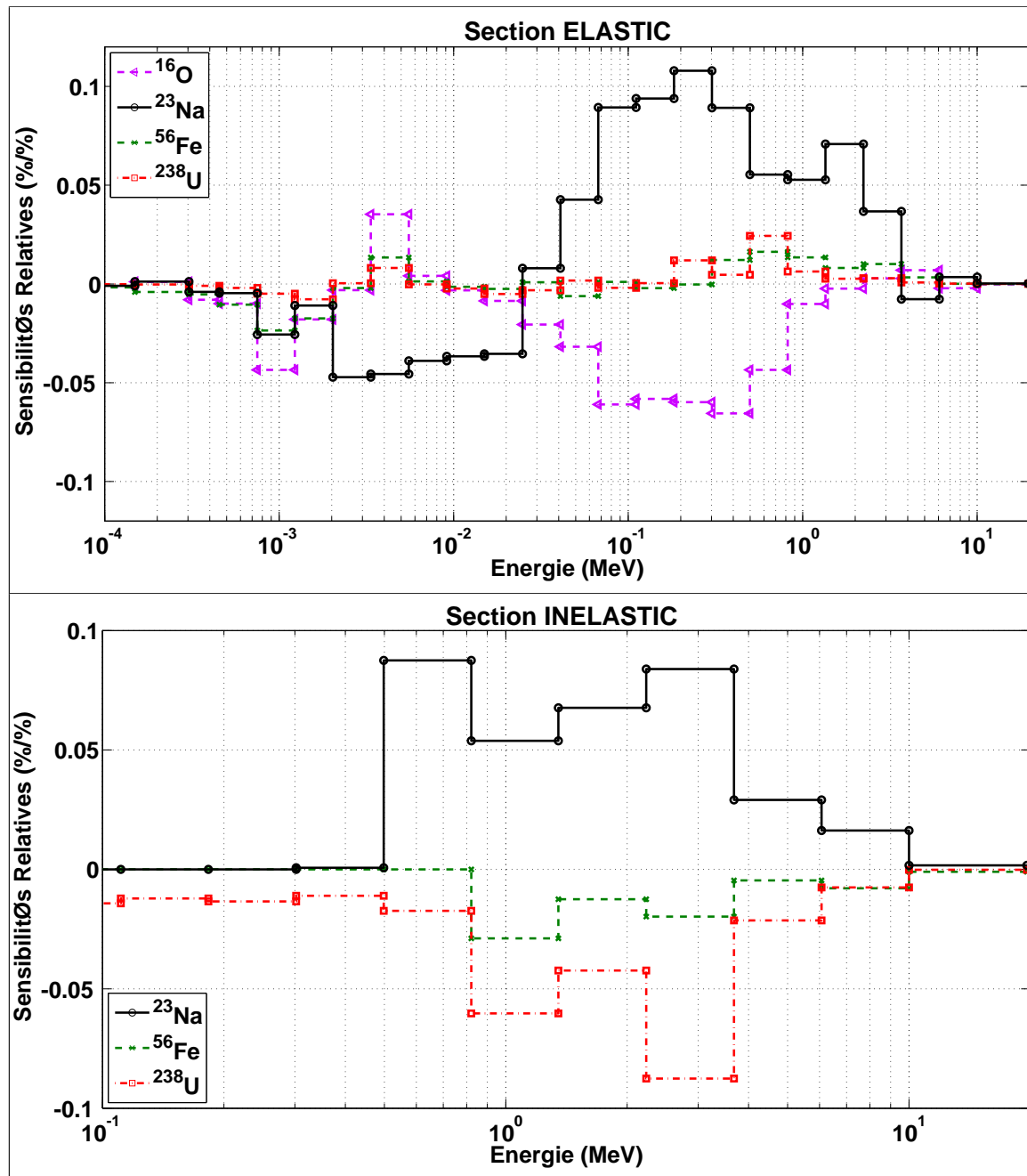


FIGURE 6.2. Sensibilités relatives (en %/%) d'une vidange aux réactions ELASTIC et INELASTIC pour quelques isotopes contribuant le plus à l'incertitude sur cette grandeur

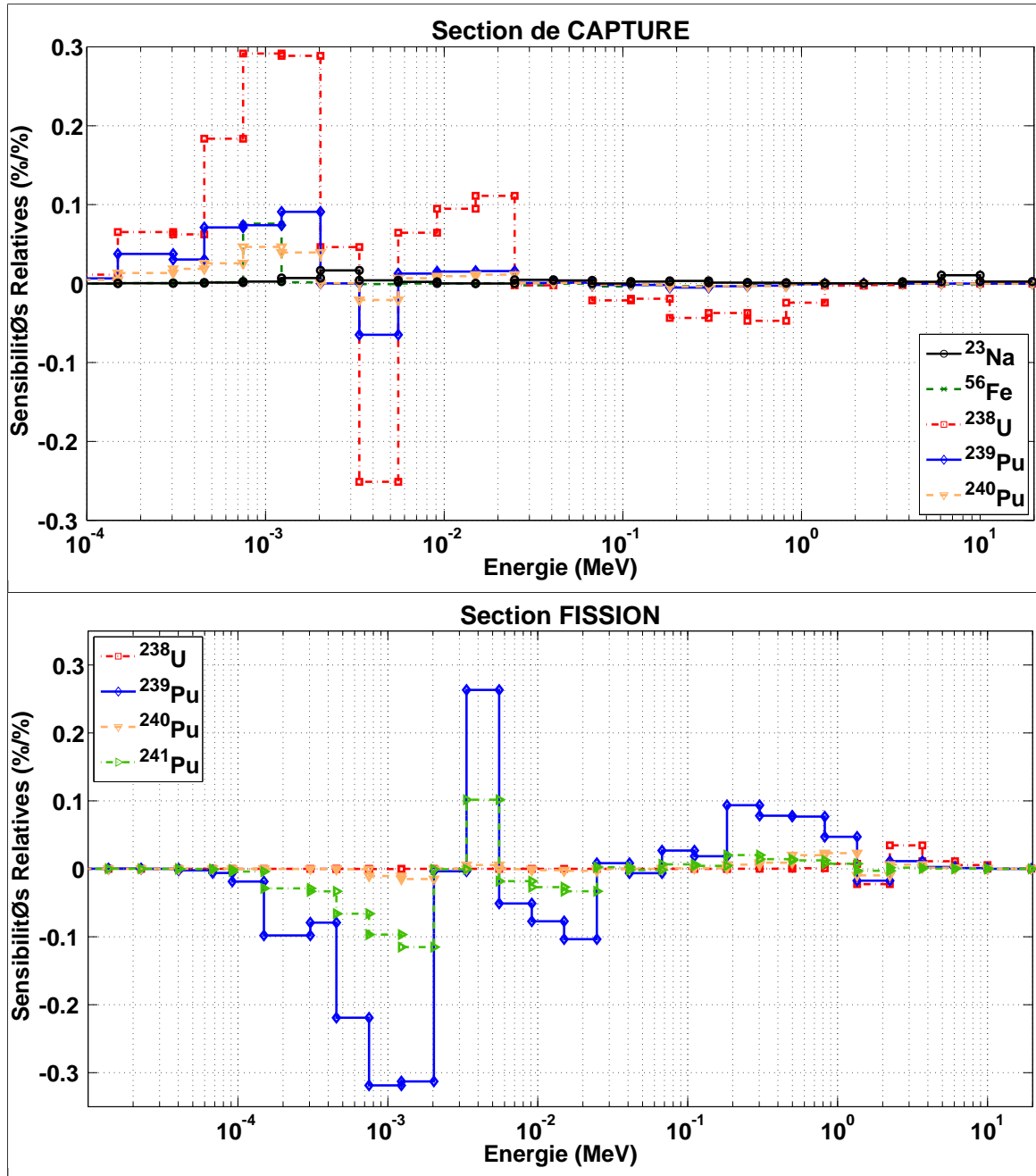


FIGURE 6.3. Sensibilités relatives (en %/%) d'une vidange aux réactions de CAPTURE et de FISSION pour quelques isotopes (actines en particulier) contribuant le plus à l'incertitude sur cette grandeur

En outre, dans le cadre du Sous-Groupe 33 (SG33 [29]) de la NEA, les résultats préliminaires [107] d'un exercice similaire (les paramètres ajustés sont les sections multigroupes des isotopes), réalisé sur plusieurs grandeurs intégrales (dont des vidanges du sodium), montrent que les sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$  après ajustement ne sont pas beaucoup modifiées (moins de 1%). On peut donc espérer que notre travail d'évaluation sur les données microscopiques pour cet isotope soit suffisant sans l'apport des données intégrales.

### 6.2.3 Estimation des Incertitudes par Méthode Rétroactive avec IDA

Comme nous l'avons évoqué précédemment, les données intégrales permettent non seulement d'obtenir de meilleurs accords entre calculs et expériences (en modifiant la valeurs moyenne des paramètres comme nous avons pu le remarquer avec l'ajustement) mais aussi de réduire, parfois considérablement, les incertitudes sur les paramètres de modèles.

On a vu que l'exercice avec l'ajustement par IDA devra être effectué une nouvelles fois, lorsque les paramètres des isotopes majeurs à la vidange du sodium seront à notre disposition. Cependant, il est possible d'avoir, dès à présent, une première estimation de la réduction de l'incertitude sur les paramètres dans le cas où on aurait effectué cet ajustement.

Pour cela, on peut employer une technique, appelée méthode Rétroactive, qui consiste à modifier uniquement la matrice de covariances sur les paramètres (la valeur moyenne des paramètres reste inchangée), et qui est très courante dans le domaine de l'évaluation avec des mesures microscopiques. Cette méthode est déjà implementée dans CONRAD et a donc été utilisée un grand nombre de fois, en particulier dans la thèse de B. Habert [75].

Dans le cadre de cette méthode, seule l'Équation (4.7) du Chapitre 4 est appliquée, *i.e.* seule la matrice de covariances sur les paramètres est modifiée. Les données intégrales couvrent un large spectre énergétique, contrairement aux données microscopiques, ce qui rend légitime d'appliquer cette méthode sur tous nos paramètres de modèles (domaine des résonances résolues + continuum). Ainsi, notre matrice de covariance sur les paramètres *a priori* s'écrit :

$$M_x^{prior} = \begin{pmatrix} M_{x,RRR}^{prior} & 0 \\ 0 & M_{x,cont}^{prior} \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

L'application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales conduit ainsi à réduire l'incertitude sur nos paramètres et permet également de corrélérer les paramètres de résonances avec ceux du continuum, chose qui n'est pas réalisable avec les données microscopiques.

Après la méthode Rétroactive, la matrice de covariances sur les paramètres devient en effet :

$$M_x^{post} = \begin{pmatrix} M_{x,RRR}^{post} & M_{x,RRR/cont}^{post} \\ \left(M_{x,RRR/cont}^{post}\right)^T & M_{x,cont}^{post} \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

où  $M_{x,RRR/cont}^{post}$  est la matrice de covariances entre les paramètres du domaine résolu et du continuum, produite par application de la méthode Rétroactive avec les expériences intégrales.

Le cadre d'application de la méthode Rétroactive suppose que l'ensemble des valeurs ( $C - E$ ) sont nulles (les valeurs moyennes des paramètres *a priori* sont correctes et permettent de fournir déjà les bons résultats), ce qui n'est pas notre cas. De plus, comme lors de l'ajustement dans la précédente section, il serait nécessaire de prendre en compte tous les isotopes contribuant aux sensibilités sur les vidanges. Ici, seules les covariances sur les paramètres du  $^{23}\text{Na}$  sont modifiées.

On voit donc que toutes les conditions ne sont pas forcément respectées, mais malgré cela, nous tenons à estimer les covariances par la méthode Rétroactive à titre d'exercice, afin d'en tirer quelques informations, notamment pour la propagation d'incertitudes sur les grandeurs intégrales de RNR-Na de type industriel, qui sera développée dans la Section 6.3.

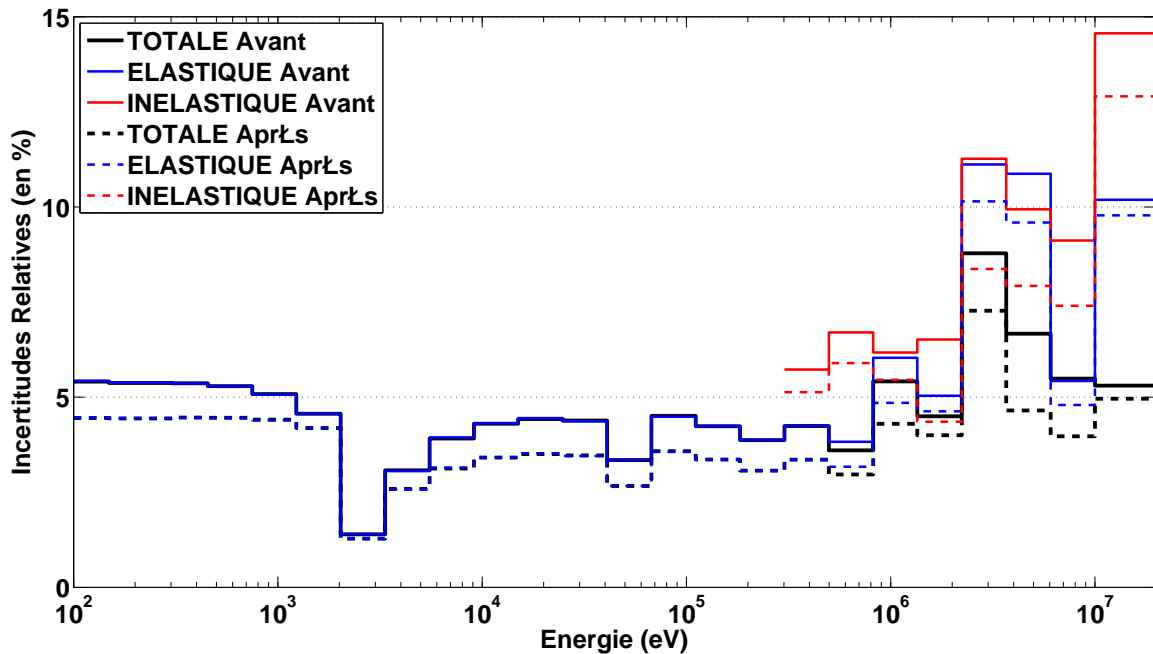


FIGURE 6.4. Incertitudes relatives en % (à 33 groupes en énergie) sur les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$  avant (en trait plein) et après (en trait pointillé) la méthode Rétroactive

La Figure 6.4 présente les incertitudes pour les principales sections efficaces du sodium, avant et après l'application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales. On remarque que l'incertitude a globalement bien diminué pour toutes les sections et en particulier la section inélastique après 1 MeV (incertitudes supérieures à 10% avant et inférieures à 8% après). L'information intégrale semble avoir comblé le manque de mesures microscopiques dans ce domaine en énergie.

Sur la Figure 6.5, on compare quelques matrices de corrélations, sur les principales sections efficace du  $^{23}\text{Na}$ , obtenues avant et après l'application de la méthode Rétroactive. On voit apparaître des corrélations et des anti-corrélations dans certaines zones énergétiques, corrélations qui étaient nulles avant l'application de la méthode Rétroactive.

Ces termes sont apparus parce que la matrice sur les paramètres  $M_{x,RRR/cont}^{post}$  n'est plus nulle dorénavant, comme cela était le cas dans le cadre de l'évaluation avec uniquement des expériences microscopiques. D'autres matrices de corrélations (avec, en particulier, des corrélations entre différentes réactions) sont fournies en Annexe D et le lecteur peut s'y rendre s'il souhaite en découvrir davantage.

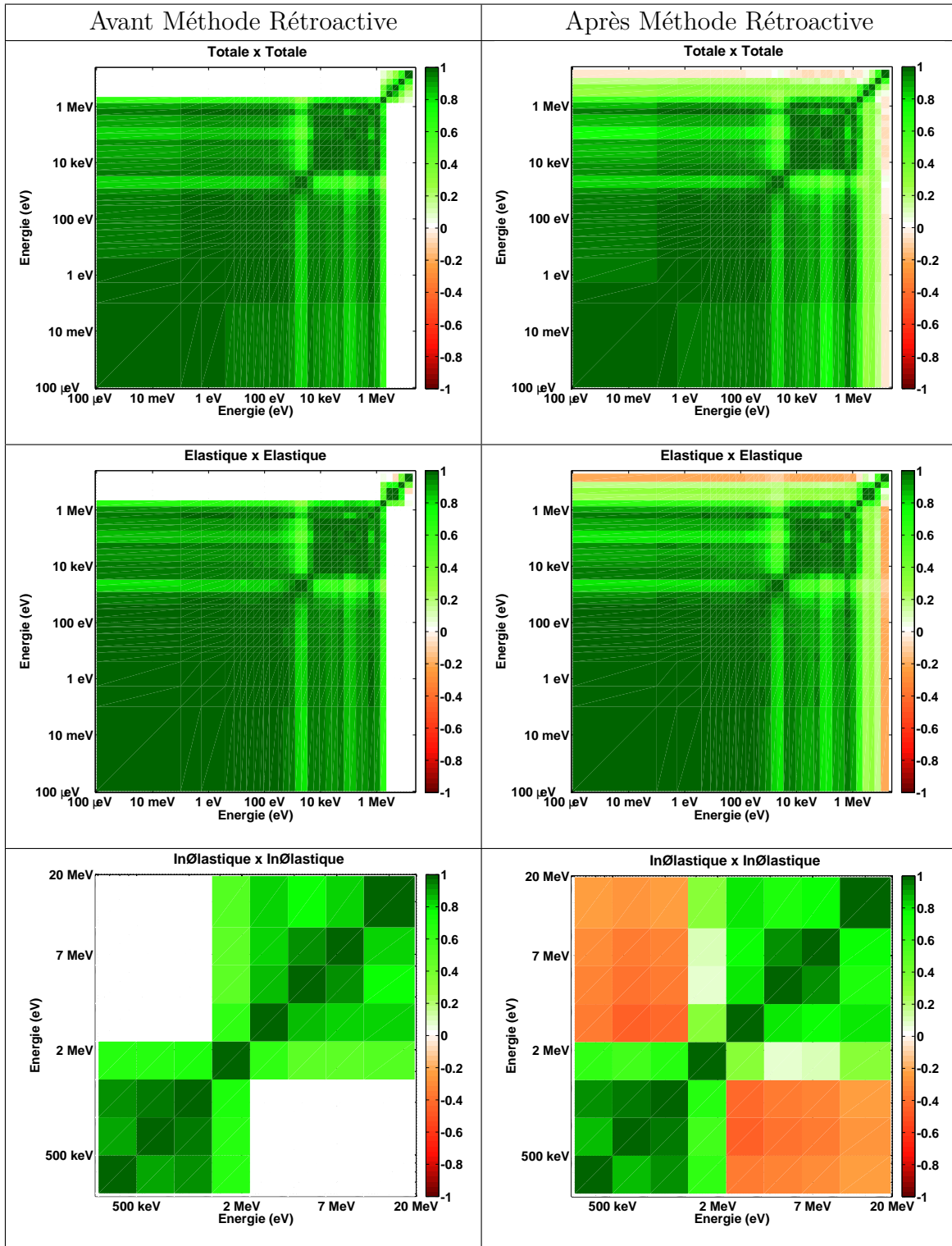


FIGURE 6.5. Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues avant et après la méthode Rétroactive, pour les sections efficaces totale, élastique et inélastique

### 6.3 Calculs d'Incertitudes sur les RNR

Une prédiction améliorée des grandeurs intégrales pour les réacteurs de Génération IV étant un des objectifs de cette thèse, nous allons maintenant présenter les résultats de nos calculs d'incertitudes sur les paramètres neutroniques d'intérêt des RNR-Na de type industriel.

Nous avons calculé l'incertitude avec plusieurs jeux de covariances sur les sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ . Le premier jeu, appelé  $M_m$ , provient des covariances créées et exposées à la fin du Chapitre 5 (celles que l'on avait avant l'application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales), basées uniquement sur les mesures microscopiques. Le second jeu (qui n'est qu'une estimation, on le rappelle), que l'on nommera  $M_{m+i}$  est celui obtenu après la méthode Rétroactive, qui tient compte à la fois des données microscopiques et intégrales. Le dernier jeu,  $M_b$ , correspond aux covariances BOLNA [2], qui sont encore aujourd'hui, très utilisées pour les calculs d'incertitudes.

#### 6.3.1 Présentation des Réacteurs

Pour cette étude sur les incertitudes, nous nous sommes concentrées sur les cœurs suivants :

- SuperPhénix [108] : prototype industriel de RNR-Na d'une puissance de 1 240 MWe, divergé en 1985 et arrêté en 1997 ;
- SFR-V2b [109] : concept de RNR-Na étudié au CEA, d'une puissance de 3600 MWth, comportant de nombreuses innovations, avec notamment une réduction de la réactivité de vidange du sodium par rapport à un EFR<sup>7</sup> classique.
- Cœur à Faible Vidange ou CFV [110] : concept de réacteur très innovant développé au CEA, pressenti pour devenir le prototype ASTRID, dont une des particularités est de présenter une réactivité de vidange du sodium négative (vidange du caloporteur dans le combustible et du plénum).

#### 6.3.2 Incertitudes sur le $k_{\text{eff}}$

Les incertitudes (en pcm) provenant du  $^{23}\text{Na}$  pour les réacteurs présentés précédemment sont données dans la Table 6.8. Nous avons décomposé les incertitudes par réaction (CAPTURE, ELASTIC, INELASTIC ; la contribution de la N,xN est négligeable ici) afin de mon-

---

7. EFR = *European Fast Reactor*, projet de réacteur européen faisant suite à SuperPhénix et au projet SuperPhénix2.

trer la différence sur l'incertitude totale avec et sans les cross-corrélations entre les diverses réactions.

On peut observer que la majorité de l'incertitude provient de la réaction ELASTIC quel que soit le jeu de covariances employé. C'est d'ailleurs pour cette réaction que nos matrices  $M_m$  et  $M_{m+i}$  proposent des réductions significatives de l'incertitude par rapport aux données de BOLNA. En outre, on remarque que les cross-corrélations entre les réactions, apportées par les données intégrales dans  $M_{m+i}$ , permettent de diminuer considérablement l'écart-type total (par rapport à l'écart-type total sans les cross-corrélations).

Enfin, on remarque que l'ajout de l'information intégrale a diminué de près d'un facteur 2 les incertitudes pour les deux premiers réacteurs étudiés, en comparaison avec la matrice de covariances initiale  $M_m$ .

La réduction des incertitudes sur le  $k_{\text{eff}}$  avec nos covariances n'est pas si flagrante avec le CFV. On constate que pour ce cœur, la principale source d'incertitude est la réaction ELASTIC et donc, de manière sous-jacente, l'incertitude sur la section totale<sup>8</sup>. En outre, on voit que la réduction est faible entre  $M_m$  et  $M_{m+i}$  ce qui montre que les données intégrales n'ont pas couvert totalement l'espace des phases.

Incertitudes $k_{\text{eff}}$ (en pcm)	SuperPhénix			SFR-V2b			CFV		
	$M_m$	$M_{m+i}$	$M_b$	$M_m$	$M_{m+i}$	$M_b$	$M_m$	$M_{m+i}$	$M_b$
CAPTURE	13.9	13.6	14.5	11.9	11.7	12.2	13.1	12.8	13.2
ELASTIC	22.5	19.3	24.9	14.8	13.4	16.4	76.1	65.3	43.1
INELASTIC	39.1	23.7	114.1	38.5	23.1	105.9	30.6	19.3	99.3
<b>TOTAL</b>	<b>46.2</b>	<b>25.4</b>	<b>117.7</b>	<b>41.6</b>	<b>20.4</b>	<b>107.9</b>	<b>82.7</b>	<b>68.7</b>	<b>109.0</b>
TOTAL (sans cross)	47.2	33.5	117.2	42.9	29.1	107.9	83.1	69.3	109.0

TABLE 6.8: Incertitudes (en pcm) sur le  $k_{\text{eff}}$  dûes aux données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$

### 6.3.3 Incertitudes sur la Vidange du Sodium

Les incertitudes sur les effets en réactivité de vidange du sodium (en début de vie des réacteurs) ont également été étudiées pour les trois RNR-Na. Généralement, l'effet de vidange est exprimé en \$ (valeur du  $\beta_{\text{eff}}$ ) et varie considérablement suivant les cœurs :

- Vidange SuperPhénix : 4.1\$
- Vidange SFR-V2b : 3.8\$
- Vidange CFV : -5.9\$

8. On observe un pic de sensibilité situé vers le seuil inélastique, une zone énergétique où la section élastique du  $^{23}\text{Na}$  contribue majoritairement à la section totale.



Dans la Table 6.9, on trouve les incertitudes sur les vidanges du sodium, exprimées en  $\epsilon$  (0.01\$), dues aux section efficaces du  $^{23}\text{Na}$ . Comme pour le  $k_{\text{eff}}$ , l'incertitude globale sur cet effet provient essentiellement de la réaction INELASTIC, qui est très importante avec les matrices BOLNA encore une fois. On remarque également que l'incertitude totale est bien réduite ( $\simeq 50\%$ ) avec le jeu  $M_{m+i}$  quand celle-ci est comparée aux covariances  $M_m$ . Les cross-corrélations entre les réactions permettent de réduire d'environ 30% les incertitudes totales avec  $M_{m+i}$ .

Le cœur CFV a de nouveau un comportement à part dans ces calculs d'incertitudes. Bien que nos matrices  $M_m$  et  $M_{m+i}$  produisent des écarts-types plus faibles que BOLNA, la réaction ELASTIC demeure la plus grande contributrice de ces incertitudes. En fait, les vidanges du sodium employées dans la méthode Rétroactive pour fabriquer  $M_{m+i}$  ont été réalisées dans des cœurs assez "classiques", pour le support des réacteurs Phénix et SuperPhénix. Par ailleurs, nous avons pas du tout de vidanges dans des configurations comportant un plénum (une des particularités du CFV).

Des nouveaux programmes dans MASURCA, en support aux nombreuses innovations d'ASTRID, sont prévus à cet effet, qui pourraient amener l'information intégrales manquantes dans  $M_{m+i}$  afin de réduire les incertitudes sur la réaction ELASTIC.

Incertitudes $\Delta\rho_{\text{Na}}$ (en $\epsilon$ )	SuperPhénix			SFR-V2b			CFV		
	$M_m$	$M_{m+i}$	$M_b$	$M_m$	$M_{m+i}$	$M_b$	$M_m$	$M_{m+i}$	$M_b$
CAPTURE	2.81	2.75	2.98	2.14	2.09	2.47	2.58	2.53	2.70
ELASTIC	6.67	5.72	5.77	6.38	5.60	5.02	13.49	11.58	7.95
INELASTIC	8.14	4.89	22.69	7.97	4.75	20.54	6.21	3.88	19.82
<b>TOTAL</b>	<b>10.66</b>	<b>6.44</b>	<b>23.60</b>	<b>10.15</b>	<b>6.21</b>	<b>21.28</b>	<b>14.94</b>	<b>12.26</b>	<b>21.53</b>
TOTAL (sans cross)	10.90	8.01	23.60	10.43	7.64	21.28	15.08	12.47	21.53

TABLE 6.9. Incertitudes (en  $\epsilon = 0.01\$ = 0.01\beta_{\text{eff}}$ ) sur la vidange sodium dûes aux données nucléaires du  $^{23}\text{Na}$

### 6.3.4 Conclusions en Termes d'Incertitudes

L'incertitude sur les paramètres neutroniques des RNR-Na industriels trouve majoritairement origine dans la réaction INELASTIC dans le cas du sodium. En particulier, les écarts-types calculés avec la matrice BOLNA ( $M_b$ ) sont bien plus importants que ceux proposées avec nos nouveaux jeux de covariances ( $M_m$  et  $M_{m+i}$ ).

On a observé une réduction significative des incertitudes si l'on utilisait la méthode Rétroactive avec les données intégrales (passage de l'utilisation des matrices  $M_m$  aux matrices

$M_{m+i}$ ). Néanmoins, même sans les informations des expériences intégrales, les incertitudes sur les  $k_{\text{eff}}$  et les vidanges du sodium avec le jeu  $M_m$  ne semblent pas sur-estimées (par rapport à BOLNA qui nous sert de référence ici) et cela nous laisse penser que les covariances sur les sections efficaces, préparées à partir des incertitudes expérimentales (*cf.* Chapitre 5), pourraient être proposées dans l'état pour la future évaluation du  $^{23}\text{Na}$  de JEFF-3.2.

On a vu que les incertitudes dans le CFV provenaient de la réaction ELASTIC, et elles étaient très peu réduites entre  $M_m$  et  $M_{m+i}$ . Cela montre l'intérêt pour de nouveaux programmes dans MASURCA où les innovations majeures (présence d'un plénum supérieur en particulier) seraient prises en compte.

## 6.4 Conclusion sur l'Évaluation avec les Données Intégrales

Dans ce Chapitre, l'évaluation du sodium, préparée avec les données microscopiques dans le Chapitre 5, a été testée sur les grandeurs intégrales des réacteurs maquettes MASURCA et ZPPR. En résumé, cette évaluation semble donner des résultats moins bons en termes de vidanges du sodium que celle du  $^{23}\text{Na}$  dans la bibliothèque JEFF-3.1.1, sur les mesures dans MASURCA en particulier.

La dégradation des résultats en moyenne par rapport à JEFF-3.1.1 nous fait penser qu'il pourrait exister un éventuel biais de type systématique sur les mesures réalisées sur MASURCA et qu'il est donc nécessaire d'investiguer davantage pour confirmer son existence. De plus, on doit garder à l'esprit que le problème du  $\beta_{\text{eff}}$  sur ZPPR-10A peut remettre en question les résultats, assez bons avec notre évaluation, des vidanges sur cette configuration.

À l'avenir, il sera impératif d'interpréter d'autres expériences de vidange du sodium effectuées sur plusieurs maquettes critiques (MASURCA, ZPPR, BFS, SNEAK, etc...) afin de découvrir si des systématiques apparaissent.

Suite aux résultats obtenus avec notre évaluation, nous avons tenté de réaliser un ajustement par la méthode d'Assimilation des Données Intégrales (IDA), ce qui a conduit à une amélioration des accords ( $C - E$ ) sur les vidanges mais également à des sections efficaces très éloignées des données microscopiques. La raison principale du "mauvais" fonctionnement de l'ajustement vient du fait que les vidanges du sodium sont très sensibles aux données nucléaires d'un grand nombre d'isotopes et plus particulièrement les actinides. On peut également supposer que les résultats détériorés des calculs de valeurs intégrales peuvent en partie être dus aux données nucléaires de ces isotopes et pas forcément à celles du  $^{23}\text{Na}$ .

Quoi qu'il en soit, l'ajustement avec une méthode IDA devra être tenté une nouvelle fois, en tenant compte des paramètres de tous les isotopes participant à la sensibilité sur le calcul des vidanges. Les résultats de cet exercice devront être comparés avec ceux produits pour le Sous-Groupe 33 [29] du WPEC.

Suite à la tentative d'ajustement par IDA, nous avons montré que les incertitudes sur nos paramètres de modèles seraient réduites en utilisant une méthode Rétroactive avec les données intégrales. *In fine*, l'application de la méthode a produit des corrélations entre les paramètres du domaine des résonances résolues et ceux du continuum, ce qui a conduit à des matrices de covariances pleines de  $10^{-5}$  eV à 20 MeV.

Pour finir, nous avons réalisé des calculs d'incertitudes sur des cœurs représentatifs de RNR-Na industriels. Les résultats nous ont permis de conclure que l'apport des données intégrales pourrait permettre, (1) de réduire considérablement les incertitudes, (2) d'obtenir une meilleure prédiction sur les grandeurs neutroniques cibles. On a cependant constaté que dans le cas d'un réacteur innovant comme le CFV, de nouveaux programmes expérimentaux étaient nécessaires car les anciennes expériences, dans MASURCA notamment, n'étaient pas représentatifs de telles innovations.

# Conclusions Générales & Perspectives

## Conclusions

Les travaux réalisés dans cette thèse avaient pour objectif l'amélioration des données nucléaires du sodium afin de mieux calculer les paramètres neutroniques d'intérêt des RNR-Na.

Le travail bibliographique a mis en évidence des écarts parfois très importants sur les données nucléaires entre les différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$  existant dans les grandes bibliothèques internationales (JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0, JENDL-4.0). Plus particulièrement, on a observé des disparités non-négligeables ( $>10\%$ ) sur les sections efficaces totale et inélastique à partir de 100 keV. Des erreurs ont été commises pendant la création du  $^{23}\text{Na}$  de JEFF-3.1.1, ce qui a conduit à une surestimation de la section totale en désaccord complet avec les données expérimentales entre 450 keV et 2 MeV. En outre, les distributions angulaires élastiques diffèrent grandement entre l'évaluation dans JEFF-3.1.1 et ENDF/B-VII.0. Enfin, on a pu remarquer qu'il manquait, presque systématiquement, les données de covariances sur les sections efficaces dans ces évaluations (excepté dans JENDL-4.0).

Nous avons par la suite évalué l'impact de ces nombreuses différences sur deux grandeurs neutroniques d'intérêt des RNR-Na : la masse critique (réactivité) et la réactivité de vidange du sodium (SVRE). L'utilisation des différentes évaluations du  $^{23}\text{Na}$  disponibles a induit une variation moyenne d'environ 300 pcm sur la réactivité. Cette grandeur, suivant la taille de la configuration étudiée (et donc les fuites des neutrons), est influencée par les écarts constatés sur les renvois angulaires élastiques. Concernant les SVRE, l'évaluation dans JEFF-3.1.1 a produit généralement les meilleurs écarts calcul-expérience ( $C - E$ ). Par ailleurs, les valeurs calculées avec les autres évaluations du sodium ont dégradé, parfois de plusieurs  $\sigma$  expérimentaux, ces accords ( $C - E$ ). Or, les données évaluées du  $^{23}\text{Na}$  dans ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0 sont assez proches des mesures microscopiques, quand en contre-partie, celles de JEFF-3.1.1 en sont très éloignées dans le domaine énergétique étudié. Nous en avons conclu qu'il était nécessaire de ré-évaluer les données nucléaires du sodium. Cette ré-évaluation doit permettre d'obtenir un accord avec les données microscopiques et les expériences intégrales de vidanges.

Dans cette logique de ré-évaluation, nous avons détaillé les modèles de réactions nucléaires employés, ainsi que les paramètres nécessaires pour chaque modélisation. Ces modèles ont été par la suite soit directement implémentés au sein du code d'évaluation CONRAD, soit utilisés par le biais d'interfaces entre CONRAD et les codes ECIS/TALYS. Pour le domaine des résonances résolues, nous avons souhaité utiliser un formalisme de Reich-Moore dans lequel nous avons introduit les voies inélastiques, puisque nous avons à notre disposition des mesures de sections inélastiques à haute résolution qui présentaient des structures résonnantes. L'évaluation des données nucléaires dans le domaine du continuum nécessitait des modèles statistiques, en particulier le modèle optique et des modèles de densité de niveaux. On retrouve ces derniers dans le code TALYS qui a donc été interfacé avec CONRAD pour traiter les sections efficaces aux hautes énergies.

Des développements ont donc été effectués (et validés) dans le code CONRAD pour calculer les sections inélastiques discrètes dans le domaine résolu, permettre l'ajustement des paramètres des modèles statistiques et créer les différentes interfaces nécessaires. Par ailleurs, nous avons développé des techniques au sein de CONRAD afin de prendre en compte les expériences intégrales sur les paramètres de modèles. En conséquence, nous proposons trois méthodes pour l'Assimilation des Données Intégrales (IDA), chacune ayant ses avantages et inconvénients (rapidité d'application, approximations faites, etc...). Nous mettons néanmoins en garde quant à l'utilisation de ces méthodes : il est souhaitable de contraindre les paramètres *a priori* à l'aide des expériences microscopiques, puis d'employer par la suite les méthodes d'IDA pour l'analyse des données intégrales, car le poids des expériences intégrales (quelques points) serait négligeable vis-à-vis des mesures microscopiques (des milliers de points) dans l'ajustement.

À l'aide de CONRAD, nous avons entièrement ré-évalué les sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$  à partir des données microscopiques disponibles dans la base EXFOR. Le domaine des Résonances Résolues (RRR) a été étendu jusqu'à 2 MeV, pour prendre en compte simultanément les mesures à haute résolution de Larson [11] (section efficace totale) et de Kopecky [13] (section efficace inélastique). Pour cette évaluation dans le domaine résolu, nous avons utilisé un rayon effectif  $R'$  qui dépend de l'énergie, dépendance qui a été calculée par modèle optique. L'extension du domaine à 2 MeV nous a permis d'augmenter le nombre de paramètres de résonance connus à 86 (au lieu de 20 dans l'évaluation du  $^{23}\text{Na}$  de JEFF-3.1.1).

Au-delà de 2 MeV, le manque de mesures précises pour les niveaux discrets inélastiques nous a obligé à démarrer le domaine du continuum. Nous nous sommes alors appuyés sur des mesures moins précises pour les réactions  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$  et  $(n, 2n)$ . L'ajustement de nos sections efficaces avec CONRAD nous a permis d'obtenir globalement de bons accords avec les mesures microscopiques disponibles. Pour les deux domaines d'énergie, la technique de marginalisa-

tion par Monte-Carlo présente dans CONRAD a été employée avec succès, pour propager les incertitudes systématiques des données expérimentales aux paramètres de modèles. Suite à cela, des matrices de covariances sur les sections efficaces multigroupes (33 groupes d'énergie) ont été produites pour de futurs calculs d'incertitudes.

L'évaluation du sodium, préparée avec les données microscopiques, a été testée sur les grandeurs intégrales et donne des résultats assez proches des évaluations proposées dans ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0. Nous avons ensuite tenté d'appliquer l'ajustement par la méthode d'Assimilation des Données Intégrales (IDA), ce qui a conduit à une amélioration des accords ( $C - E$ ) sur les vidanges, mais également à une sérieuse détérioration de l'accord des sections efficaces avec les données microscopiques. Par conséquent, nous avons préféré conserver l'évaluation basée sur les données microscopiques ; cependant nous avons montré que les incertitudes sur nos paramètres de modèles seraient réduites en utilisant une méthode Rétroactive avec les données intégrales via CONRAD. L'estimation des incertitudes obtenues sur les sections efficaces, en particulier pour la réaction inélastique entre 500 keV et 2 MeV, coïncideraient avec les recommandations du Sous-Groupe 26 [2] de la NEA. Enfin, nous avons réalisé des calculs d'incertitudes sur des cœurs représentatifs de RNR-Na industriels, où nous avons observé une réduction significative des variances sur les paramètres neutroniques d'intérêt.

## Perspectives

Les données nucléaires du sodium que nous proposons à la fin de cette thèse ne constituent qu'une étape intermédiaire pour l'évaluation finale qui sera proposée à la communauté JEFF.

En effet, vers la fin de ces travaux de thèse, des mesures avec une bonne résolution des six premiers niveaux inélastiques du  $^{23}\text{Na}$  ont été réalisées à l'IRMM de Geel par C. Rouki et A. Plompen [102]. Ces nouvelles données couvrent une plage énergétique plus importante (450 keV à 3.8 MeV) et permettraient d'étendre le domaine des résonances résolues jusqu'à près de 4 MeV, ce qui serait intéressant puisque les mesures effectuées par Larson [11] sur la section totale montrent des structures résonantes non négligeables jusqu'à environ 6 MeV.

Pendant l'analyse des résonances, nous avons rencontré des difficultés pour traiter les mesures de distributions angulaires élastiques de Kopecky [13] dans l'ajustement. La prise en compte de ce genre de données dans une évaluation est assez rare et ajouterait donc une plus-value importante. En contre-partie, cela nécessiterait un travail d'analyse bien plus fouillé (et donc beaucoup plus de temps) que l'analyse de sections efficaces intégrées, ce qui ne nous était pas possible dans le temps imparti pour la thèse.

---

Un dernier point à approfondir porterait sur l'ajustement par l'assimilation de données intégrales (IDA). Un exercice à grande échelle consisterait à tenter l'ajustement par IDA en prenant en compte non-seulement les paramètres de modèles du sodium mais également ceux de l' $^{16}\text{O}$ , du  $^{56}\text{Fe}$ , de l' $^{238}\text{U}$ , du  $^{239}\text{Pu}$  et du  $^{241}\text{Pu}$ , qui sont les plus gros contributeurs à l'incertitude sur un calcul de vidange. Les résultats de cet exercice pourraient confirmer que les paramètres du  $^{23}\text{Na}$  changent peu par rapport à ce qui a été établi avec les mesures microscopiques et que les écarts ( $C - E$ ) sur les vidanges proviennent majoritairement des actinides. Actuellement, les membres du Sous-Groupe 33 de la NEA travaillent sur un exercice quelque peu similaire (ajustement sur les sections efficaces multigroupes), dont les résultats préliminaires [107] semblent indiquer qu'il n'est pas nécessaire de modifier les sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ .

# Description des Configurations Utilisées pour la Qualification

---

Dans cette Annexe, nous allons décrire les configurations qui ont été interprétées et utilisées tout le long de cette thèse, en particulier dans le Chapitre 2. La première section est dédiée aux programmes élaborés dans la maquette MASURCA. Dans la deuxième section, on présente l'unique cœur interprété dans ZPPR (il en existe bien d'autres...), c'est-à-dire ZPPR-10A.

## A.1 MASURCA

Avant de commencer la présentation des configurations étudiées dans MASURCA, il est nécessaire de faire un rappel sur les types d'assemblage que l'on trouve dans les cœurs de cette maquette.

### A.1.1 Assemblages Étudiés dans MASURCA

La Figure A.1 présente les cellules combustibles de MASURCA qui ont été étudiées pendant ces travaux de thèse. On voit que des numérotations sont associées au type (R, Z ou ZONA) et permettent ainsi de différencier l'enrichissement de l'assemblage et donc la dureté de son spectre. Ces assemblages sont censés représenter approximativement les combustibles employés dans les réacteurs Phénix (PX) et SuperPhénix (SPX). Ainsi, on a respectivement du spectre le plus modéré au plus dur, les assemblages ZONA3 représentatifs du combustible interne dans SPX, ZONA1 proches des assemblages externes de SPX et internes à PX et ZONA2 semblables aux assemblages externes de PX.

Les séries R et Z contiennent une certaine proportion de ferrite ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) afin d'apporter la quantité de  $\text{O}_2$  qui n'est pas présente dans les réglettes combustibles et fertiles (les réglettes sont métalliques).



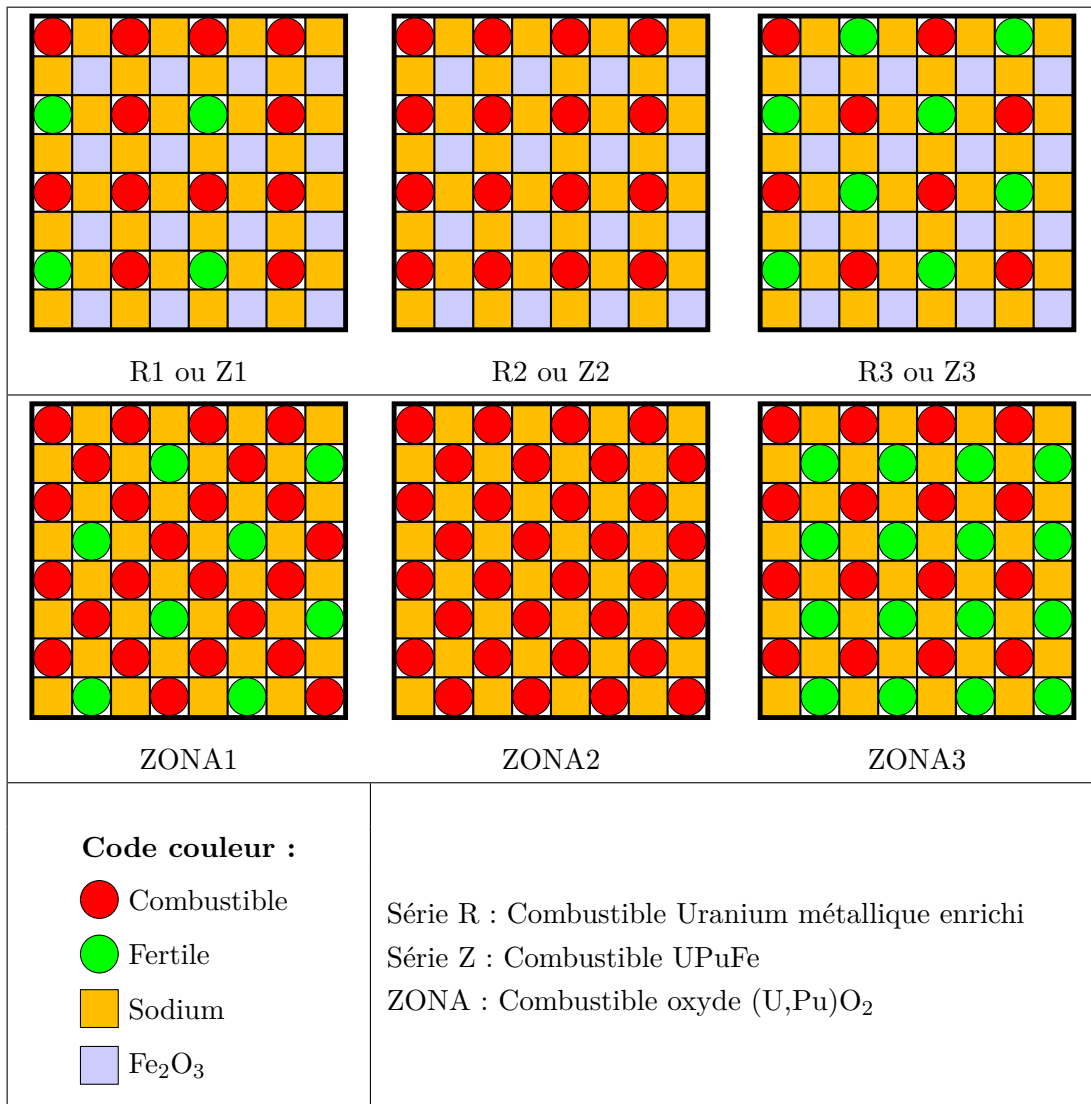


FIGURE A.1: Cellules combustibles utilisées dans MASURCA

Enfin, on peut noter que les assemblages combustibles ZONA sont nommées différemment suivant le vecteur Pu employé, qui peut être plus ou moins dégradé. Dans notre cas, on pourra distinguer trois types de vecteur Pu :

- ZONA-POA : contient environ 8% de <sup>240</sup>Pu/Pu et moins de 1% de (<sup>241</sup>Pu+<sup>241</sup>Am)/Pu ;
- ZONA-PIT : contient environ 18% de <sup>240</sup>Pu/Pu et environ 4% de (<sup>241</sup>Pu+<sup>241</sup>Am)/Pu ;
- ZONA-P2A : contient environ 18% de <sup>240</sup>Pu/Pu et environ 8% de (<sup>241</sup>Pu+<sup>241</sup>Am)/Pu ;

Les assemblages fertiles dans MASURCA sont également assez variés. En résumé, on trouve des assemblages contenant soit des réglettes (cylindriques et carrées) en UO<sub>2</sub> appauvri, soit des réglettes carrés métalliques en Uranium appauvri (environ 0.4% de <sup>235</sup>U).

Parfois, la moitié des réglettes constituant l'assemblage est composée de sodium, ces dernières pouvant être amenées à être remplacées par des réglettes vides pour simuler des vidanges dans les couvertures fertiles.

En toute théorie, les extrémités de chaque réglette (combustible, fertile) sont fermés par des bouchons<sup>1</sup>. Cependant, les hauteurs de ces réglettes sont très différentes de l'une à l'autre (de 4" à 24"), elles ne sont généralement pas référencées dans les rapports d'expérience et ne permettent donc pas de distinguer de manière précise où elles sont placées dans le cœur. Ainsi, nous avons homogénéisés dans les compositions des réglettes ces bouchons pour simplifier les modélisations de ces cœurs.

Suivant l'axe, on trouve un diffuseur, élément très fin (0.8 cm) composé d'acier qui permet la circulation de l'air<sup>2</sup> entre les éléments combustibles et les éléments fertiles. Sa modélisation dans les études est prise en compte dans les calculs ERANOS-PARIS et TRIPOLI.

### A.1.2 Configurations Radiales et Axiales de Vidange

Dans MASURCA, les vidanges du sodium sont simulées en remplaçant des réglettes de sodium par des réglettes vides. On voit donc que des motifs de vidanges radiaux sont faciles à mettre en œuvre, où les réglettes de sodium des assemblages (ou tubes) combustibles et/ou fertiles peuvent être en totalité ou partiellement remplacées. En "cylindrisant" les géométries, les zones radiales vidangées sont comprises entre deux valeurs de rayon. Par exemple, supposons que 4 assemblages au centre du cœur soient vidangées, alors la zone vidangée correspondante est  $0 < R_{eq} < 11.96$  cm car un tube dans MASURCA mesure 10.6 cm x 10.6 cm soit 112.36 cm<sup>2</sup>. Ainsi, 4 tubes vidangées représentent  $4 \times 112.36 = 449.44 \simeq \pi \times 11.96^2$  dans sa version cylindrisée.

On peut également composer des motifs vidangés suivant l'axe du cœur. En effet, un tube, suivant la hauteur de combustible (24" ou 36"), est composé de réglettes de tailles très variables (de 4" à 24") que l'on empile les unes sur les autres. La Figure A.2 montre les motifs de vidanges axiales utilisés pour réaliser les diverses expériences de vidange du sodium.

---

1. Les bouchons sont présents uniquement pour les réglettes contenant de l'oxyde. Les réglettes en Uranium métallique sont recouvertes d'un dépôt très fin de nickel.

2. MASURCA, malgré sa puissance d'environ 5 kW, a besoin d'être refroidi, grâce à un système de circulation d'air. Par conséquent, ce diffuseur est employé afin de connecter des canaux de ventilation qui ne sont pas forcément en regard, et de mélanger les filets d'air.

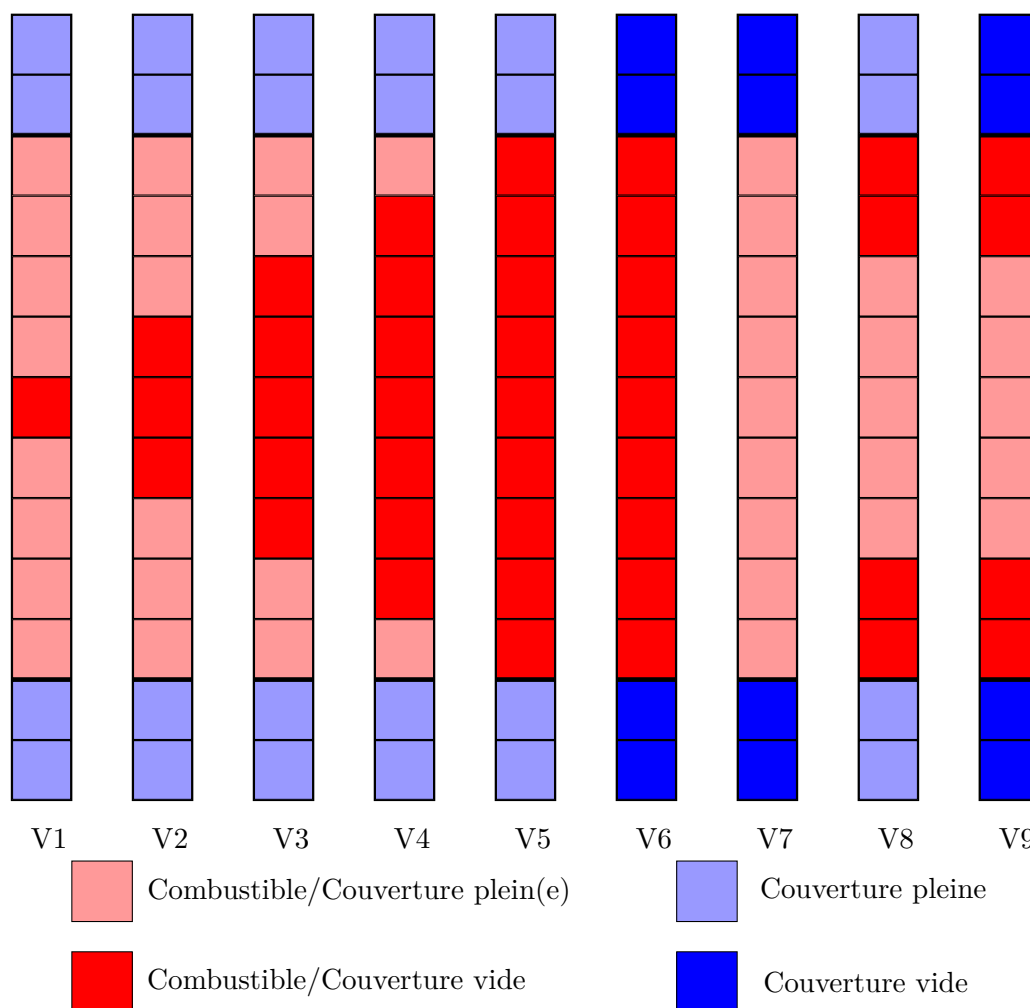


FIGURE A.2. Configurations axiales de vidange partielle dans les cœurs MASURCA de 36'' de hauteur

### A.1.3 Programme PRE-RACINE

#### A.1.3.1 Description Succinte

Le programme PRE-RACINE [111, 112] s'est déroulé d'août 1976 à mars 1979 et se décompose en quatre phases. L'objectif était l'étude du concept cœur hétérogène, c'est-à-dire que le cœur comporte non seulement des zones fertiles en périphérie (les couvertures sont autour du cœur) mais aussi des éléments fertiles internes (sous forme d'un îlot ou d'un pavé central ou encore sous forme de couronnes composées d'assemblages fertiles).

L'hétérogénéité du cœur est radiale dans ce programme (un autre programme de MASURCA, non étudié ici, est dédié aux cœurs axialement hétérogènes).

Le combustible des configurations PRE-RACINE est constitué d'une partie centrale de type ZONA1 entourée d'une zone en uranium métallique enrichi (R1). Les quatre configurations sont les suivantes :

- PRE-RACINE I : cœur contenant un îlot fertile central et des assemblages (ou tubes) combustibles de type ZONA1-POA ;
- PRE-RACINE IIA : cœur sans îlot fertile contenant une majorité de tubes combustibles ZONA1-POA mais aussi quelques tubes ZONA1-P2A ;
- PRE-RACINE IIB : cœur sans îlot fertile contenant une majorité de tubes combustibles ZONA1-PIT et quelques tubes ZONA1-P2A ;
- PRE-RACINE IV : cœur contenant un îlot fertile central et une majorité de combustibles ZONA1-PIT avec quelques tubes ZONA1-P2A ;

Pour le cœur PRE-RACINE IV, aucun plan de chargement XY n'a pu être retrouvé, par conséquent son étude ne sera pas présentée dans cette thèse.

#### A.1.3.2 PRE-RACINE I

La Figure A.3 montre une coupe dans le plan XY et une représentation RZ du cœur PRE-RACINE I. Le diffuseur se trouve entre 45.72 cm et 46.52 cm suivant l'axe Z.

Dans cette configuration, les zones vidangées sont toutes situées dans l'îlot fertile central, comme cela est exposé sur la Figure A.4. La Table A.1 liste les différentes expériences de vidange du sodium simulées dans PRE-RACINE I.

La couleur orange dans la Table signifie que le motif (radial+axial) inclut des vidanges dans des zones fertiles (la couleur bleue, qui n'est pas présente pour ce cœur mais que l'on trouvera plus loin, implique que la vidange n'a lieu dans des zones contenant uniquement du combustible).

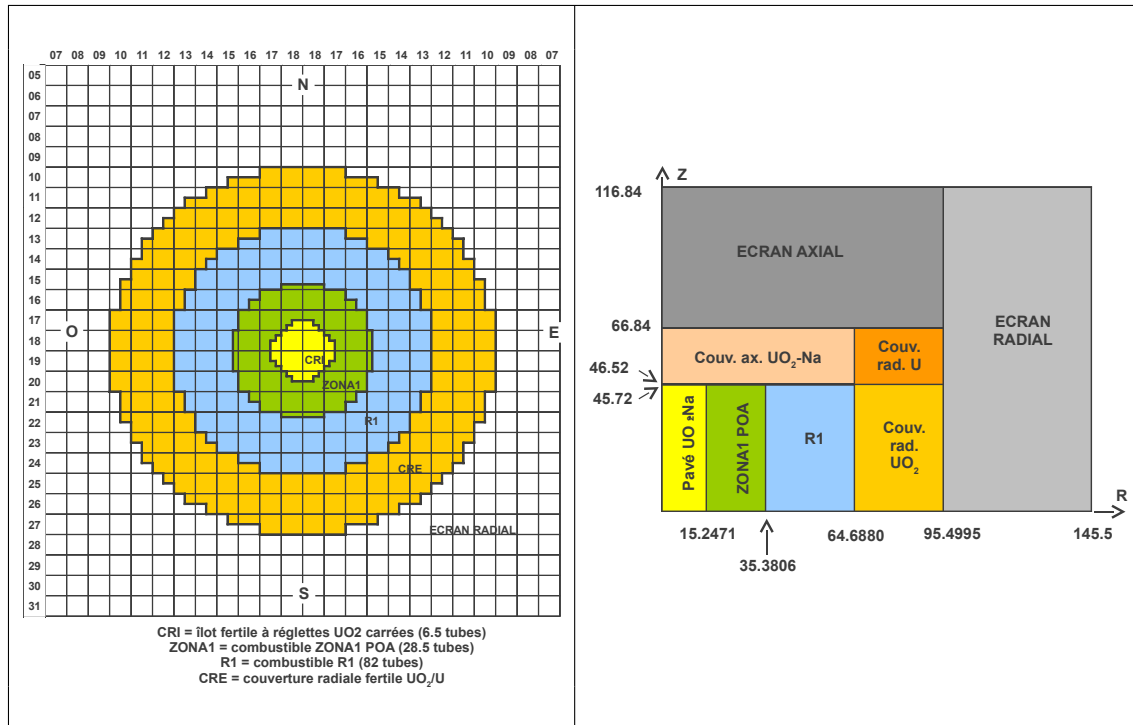


FIGURE A.3: Coupe XY et représentation RZ du cœur PRE-RACINE I

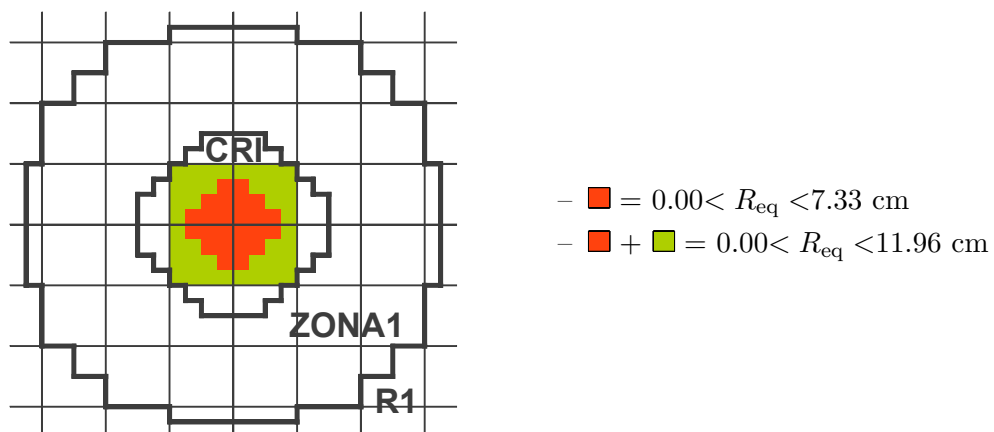


FIGURE A.4: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur PRE-RACINE I

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 1	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V1
SVRE 2	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V2
SVRE 3	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V3
SVRE 4	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V5
SVRE 5	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V6
SVRE 6	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V7
SVRE 7	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V8
SVRE 8	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V9
SVRE 9	$0.00 < R_{eq} < 7.33$	V5

TABLE A.1: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur PRE-RACINE I

A.1.3.3 PRE-RACINE IIA

On peut observer sur la Figure A.5 un plan en coupe XY et la représentation RZ du cœur PRE-RACINE IIA.

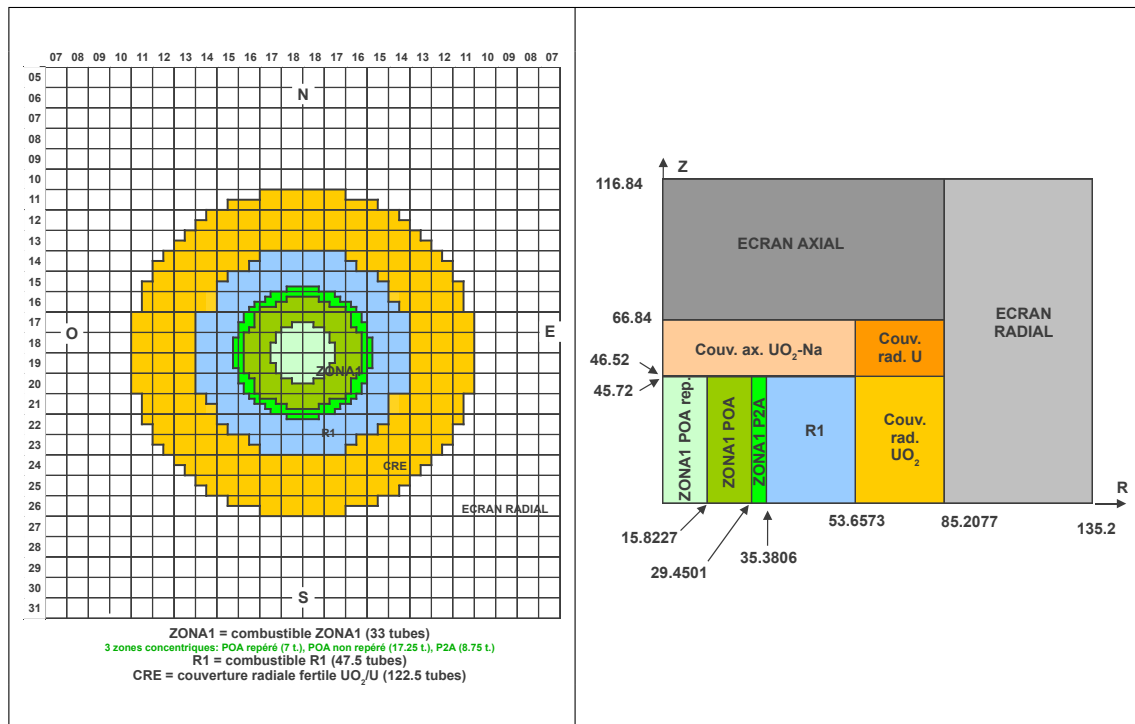


FIGURE A.5: Coupe XY et représentation RZ du cœur PRE-RACINE IIA

Les motifs radiaux de vidange, effectués dans la configuration PRE-RACINE 2A, sont présentés sur la Figure A.6. On y voit notamment que les  $\Delta\rho_{Na}$  ont lieu seulement dans la zone combustible ZONA1. La Table A.2 détaille les différentes expériences de vidanges du sodium simulées dans PRE-RACINE IIA.

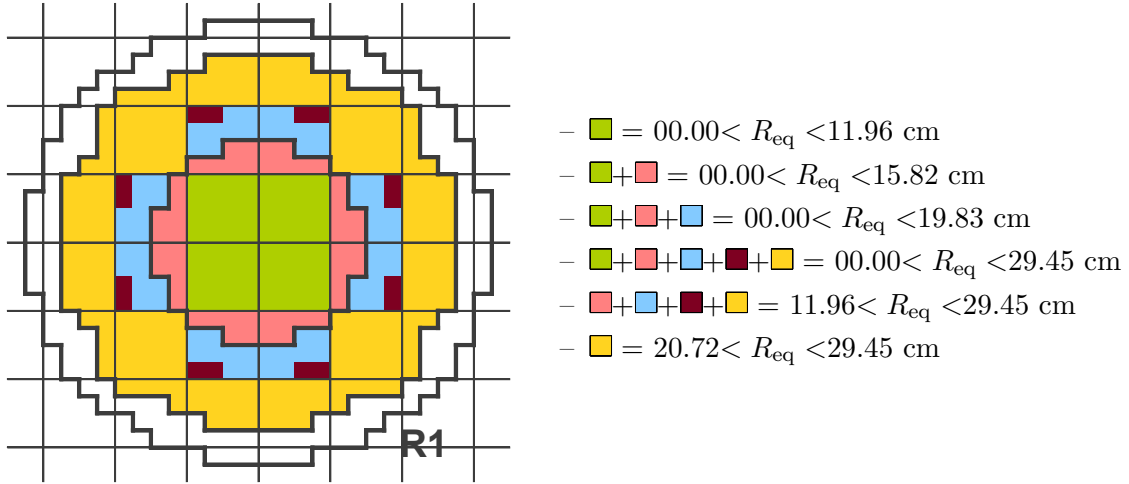


FIGURE A.6: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur PRE-RACINE IIA

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 01	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V1
SVRE 02	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V2
SVRE 03	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V3
SVRE 04	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V4
SVRE 05	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V5
SVRE 06	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V6
SVRE 07	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V7
SVRE 08	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V8
SVRE 09	$00.00 < R_{eq} < 11.96$	V9
SVRE 10	$00.00 < R_{eq} < 15.82$	V5
SVRE 11	$00.00 < R_{eq} < 19.83$	V5
SVRE 12	$00.00 < R_{eq} < 29.45$	V5
SVRE 13	$11.96 < R_{eq} < 29.45$	V5
SVRE 14	$20.72 < R_{eq} < 29.45$	V5

TABLE A.2: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur PRE-RACINE IIA

## A.1.3.4 PRE-RACINE IIB

La Figure A.5 permet d'observer une coupe XY et la représentation cylindrique RZ du cœur PRE-RACINE IIB.

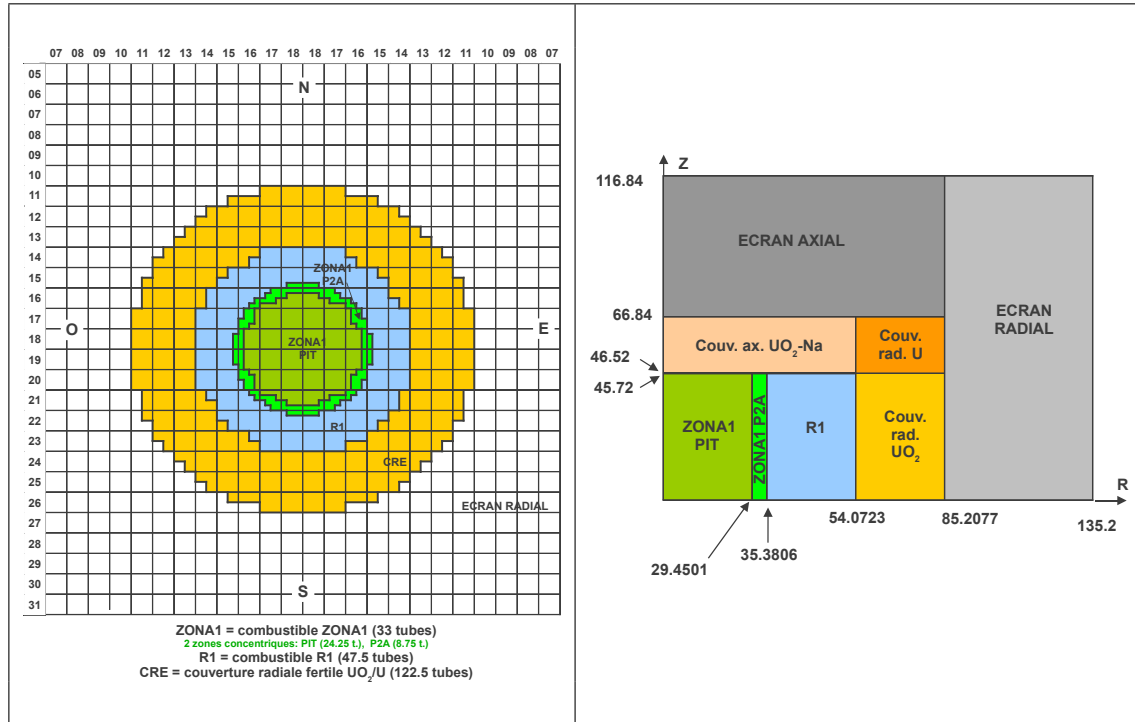


FIGURE A.7: Coupe XY et représentation RZ du cœur PRE-RACINE IIB

La Figure A.8 présente les motifs radiaux de vidange, effectués dans la configuration PRE-RACINE 2B et la Table A.3 fournit les expériences de vidanges du sodium simulées dans ce cœur.

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 01	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V1
SVRE 02	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V3
SVRE 03	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V5
SVRE 04	$0.00 < R_{eq} < 19.83$	V5
SVRE 05	$0.00 < R_{eq} < 29.45$	V5

TABLE A.3: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur PRE-RACINE IIB



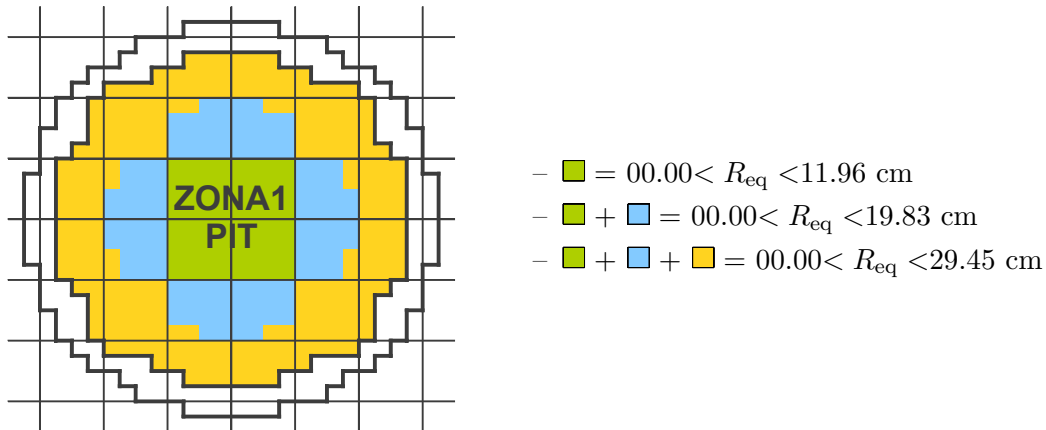


FIGURE A.8: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur PRE-RACINE IIB

## A.1.4 Programme RACINE

### A.1.4.1 Description Succinte

Le programme RACINE [111, 112], successeur du programme PRE-RACINE, s'est déroulé de mars 1979 à octobre 1984 et se décompose en plusieurs phases. Ce programme avait pour objectif l'étude du concept de cœur hétérogène (*i.e.* cœur avec des zones fertiles sous forme d'îlot et de couronnes d'assemblages). Tout comme PRE-RACINE, seul le concept hétérogène radial a été étudié. Les concepts hétérogènes avaient été étudiés à l'époque dans l'optique d'optimiser le gain de régénération ainsi que la réactivité de vidange.

Le combustible des configurations RACINE est constitué d'une partie centrale au plutonium de type ZONA1 entourée, pour des raisons d'inventaire, d'une zone à l'uranium enrichi de réactivité similaire (dite R1). Des combustibles de type plaquette provenant de la maquette SNEAK appelés Z1K (plutonium) et R1K (uranium) furent également utilisés. Les configurations, où des expériences de vidange du sodium ont été réalisées, sont :

- RACINE-IA : cœur contenant un îlot fertile central entouré de plusieurs zones fissiles et d'une zone fertile concentriques ;
- RACINE-ID Na Follower : cœur similaire à RACINE IA mais où l'îlot fertile central a été remplacé par un suiveur composé de réglettes de sodium. La zone fertile concentrique est également plus épaisse tout comme la zone combustible externe composée de réglettes en uranium enrichi R1 ;
- RACINE-ID B<sub>4</sub>C Rod : cœur assez similaire à RACINE-ID Na Follower, où le suiveur est substitué par une colonne formée de réglettes de B<sub>4</sub>C et de sodium. Pour pallier à la perte de réactivité due à l'absorption du bore, on utilise dans cette configuration des plaquettes en uranium R1K qui sont situées dans la zone externe radiale.

A.1.4.2 RACINE-IA

Sur la Figure A.9, on peut observer une coupe médiane en XY ainsi qu'une description cylindrique RZ du cœur RACINE-IA.

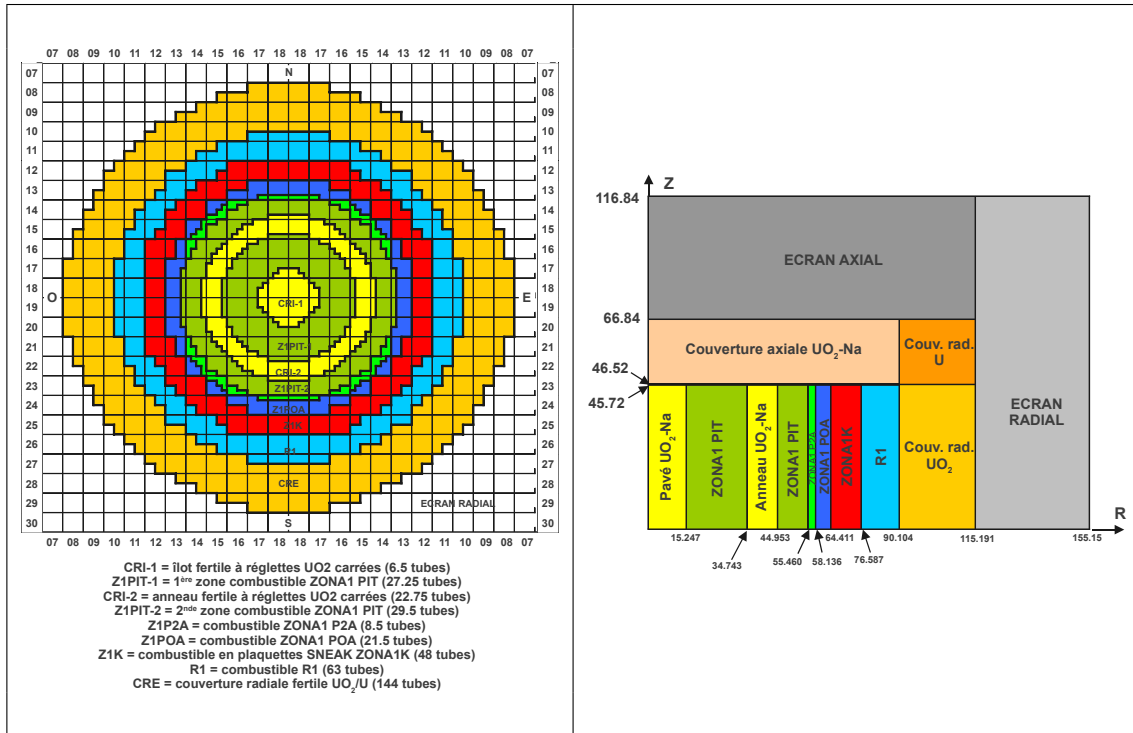


FIGURE A.9: Coupe XY et représentation RZ du cœur RACINE-IA

On peut trouver sur la Figure A.10 les très nombreux motifs radiaux de vidange, effectués dans la configuration RACINE-IA. La Table A.4 donne la correspondance entre le numéro des expériences de vidanges du sodium simulées dans ce cœur et les motifs radiaux et axiaux. On remarque que les quatre dernières vidanges (SVRE 11 à 14) ne sont pas cylindrisables, ce cœur doit être ainsi modélisé dans sa géométrie exacte, *i.e.* en 3D cartésien.

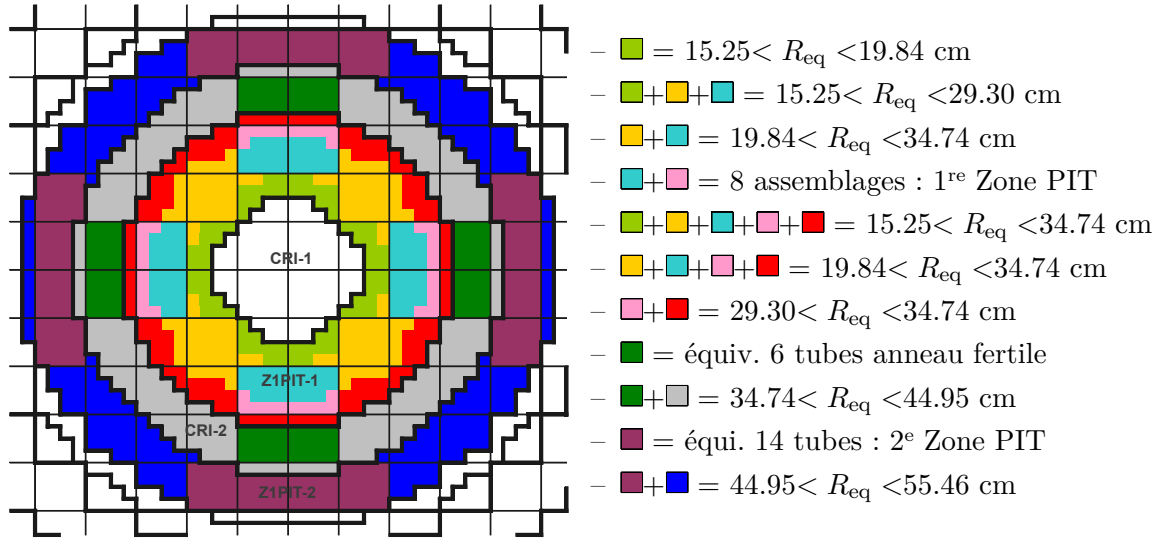


FIGURE A.10: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur RACINE-IA

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 01	$15.25 < R_{eq} < 19.84$	V5
SVRE 02	$15.25 < R_{eq} < 29.30$	V5
SVRE 03	$15.25 < R_{eq} < 34.74$	V3
SVRE 04	$15.25 < R_{eq} < 34.74$	V5
SVRE 05	$15.25 < R_{eq} < 34.74$	V8
SVRE 06	$19.84 < R_{eq} < 29.30$	V5
SVRE 07	$19.84 < R_{eq} < 34.74$	V5
SVRE 08	$29.30 < R_{eq} < 34.74$	V5
SVRE 09	$34.74 < R_{eq} < 44.95$	V5
SVRE 10	$44.95 < R_{eq} < 55.46$	V5
SVRE 11	8 Tubes - 1 <sup>re</sup> Zone PIT	V5
SVRE 12	8 Tubes - 1 <sup>re</sup> Zone PIT	V9
SVRE 13	6 Tubes - Zone Fertile	V5
SVRE 14	14 Tubes - 2 <sup>e</sup> Zone PIT	V5

TABLE A.4: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur RACINE-IA

A.1.4.3 RACINE-ID Na Follower

La Figure A.11 présente une vue en coupe du plan médian XY accompagnée d'une description RZ de la configuration RACINE-ID Na Follower.

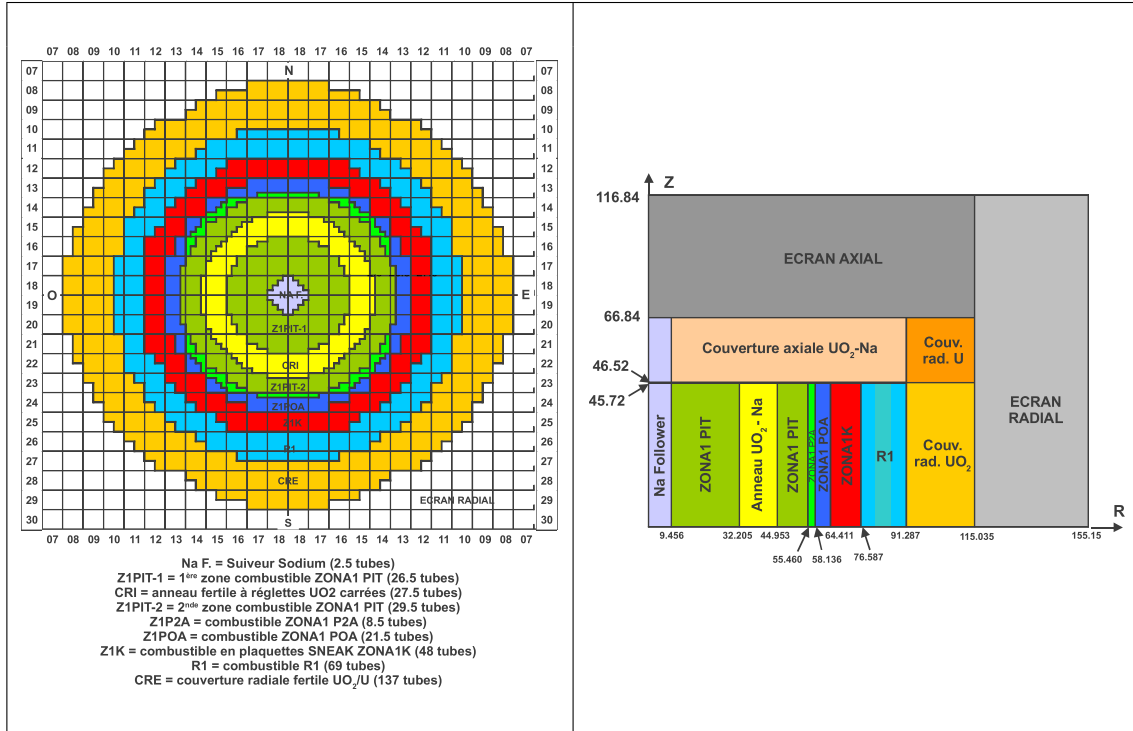


FIGURE A.11: Coupe XY et représentation RZ du cœur RACINE-ID Na Follower

Les deux motifs radiaux de vidange disponibles dans cette configuration sont illustrés par la Figure A.12. On trouve dans la Table A.5 les correspondances entre les SVRE et les quantités radiales et axiales vidangées.

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 1	$0.00 < R_{eq} < 9.46$	V6
SVRE 2	$9.46 < R_{eq} < 32.21$	V5

TABLE A.5: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur RACINE-ID Na Follower

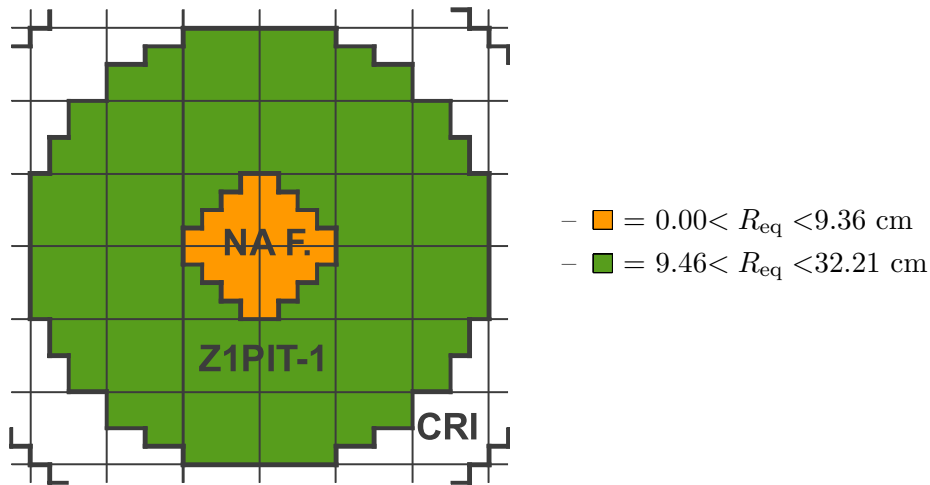


FIGURE A.12: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur RACINE-ID Na Follower

#### A.1.4.4 RACINE-ID Na B<sub>4</sub>C Rod

On peut observer sur la Figure A.13 une coupe médiane du plan XY ainsi que la géométrie cylindrisée de la configuration RACINE-ID B<sub>4</sub>C Rod.

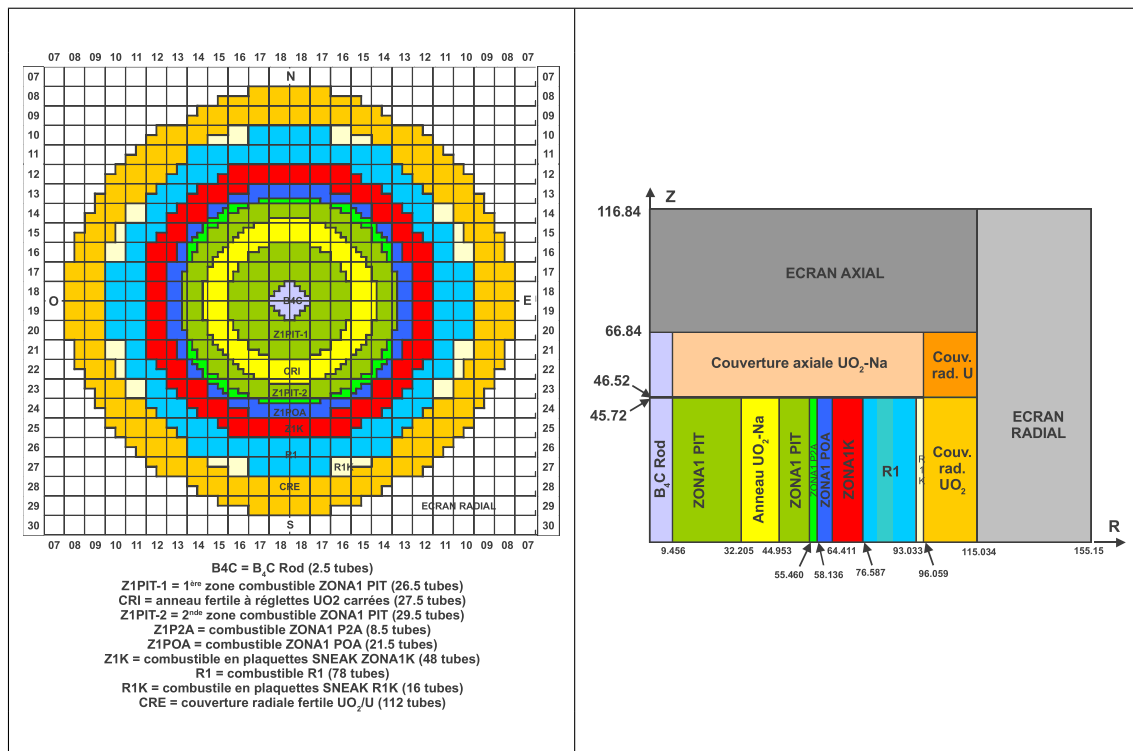


FIGURE A.13: Coupe XY et représentation RZ du cœur RACINE-ID B<sub>4</sub>C Rod

L'unique motif radial de vidange du sodium est fournit sur la Figure A.14. La Table A.6 décrit cette expérience de vidange, selon les configurations radiale et axiale.

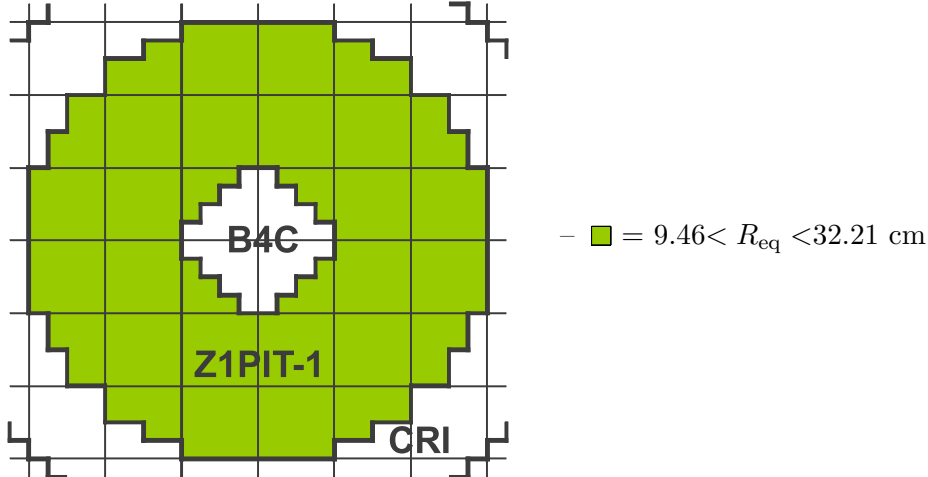


FIGURE A.14: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur RACINE-ID  $B_4C$  Rod

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 1	$9.46 < R_{eq} < 32.21$	V5

TABLE A.6: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur RACINE-ID  $B_4C$  Rod

## A.1.5 Programme CIRANO

### A.1.5.1 Description Succinte

Le programme CIRANO [113] fut réalisé de 1994 à 1997 dans MASURCA. L'objectif principal était d'obtenir des données expérimentales sur des configurations de réacteurs incinérateurs de plutonium. Ces configurations expérimentales sont caractérisées par :

- l'absence (pour certaines configurations) de couvertures fertiles, remplacées par des réflecteurs composés d'acier et de sodium ;
- un combustible avec une forte teneur en Pu/(U+Pu), de type ZONA2 (assemblage avec combustible oxyde le plus enrichi) ;
- des hauteurs combustibles nettement réduites par rapport aux précédents programmes.

On passe ainsi d'une hauteur combustible de 36" à 24", ce qui modifie significativement les possibilités de vidange axiale utilisées jusqu'à présent (les vidanges axiales sur 36" sont illustrées sur la Figure A.2). Par conséquent, on trouve les motifs axiaux de vidange pour des combustibles de 24" de hauteur sur la Figure A.15.

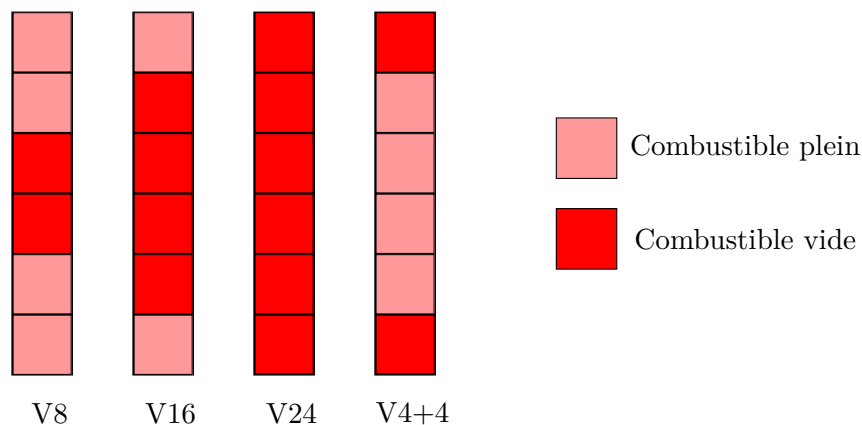


FIGURE A.15. *Configurations axiales de vidange partielle dans les cœurs MASURCA de 24" de hauteur*

Les configurations étudiées dans cette thèse sont les suivantes :

- CIRANO ZONA2A : cœur contenant un combustible majoritairement composé de ZONA2-PIT, entouré radialement et axialement par des couvertures fertiles en  $\text{UO}_2$  appauvri ;
- CIRANO ZONA2B : cœur similaire à ZONA2A, où les couvertures sont remplacées par des assemblages réflecteurs en acier/sodium.

#### A.1.5.2 CIRANO ZONA2A

On voit sur la Figure A.16 une coupe du plan XY ainsi que la géométrie cylindrisée de la configuration CIRANO ZONA2A.

Dans cette configuration, les 4 tubes centraux sont vidangés comme le montre la Figure A.17. On trouve la correspondance entre les numéros des expériences de vidange suivant les configurations radiales et axiales dans la Table A.7.

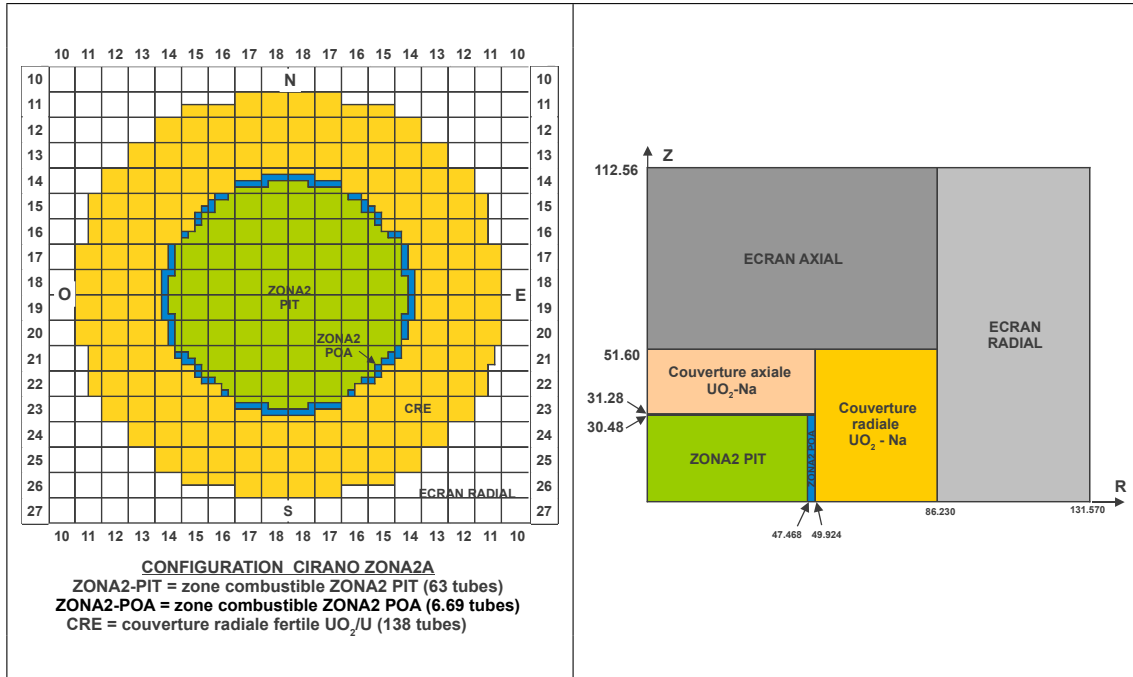


FIGURE A.16: Coupe XY et représentation RZ du cœur CIRANO ZONA2A

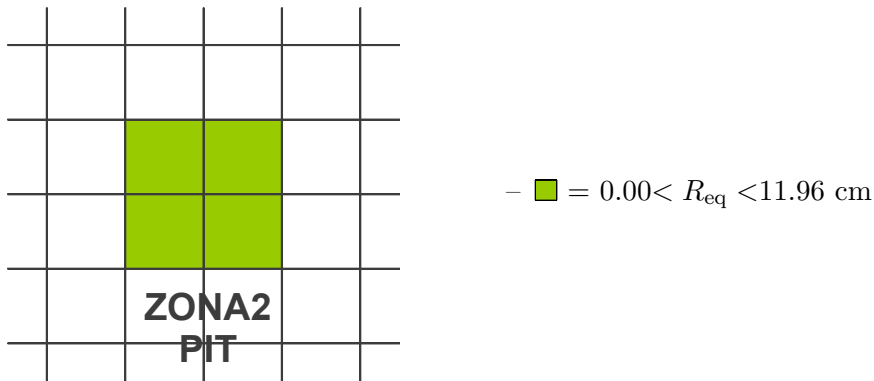


FIGURE A.17: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur CIRANO ZONA2A

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 1	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V8
SVRE 2	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V16
SVRE 3	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V24
SVRE 4	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V4+4

TABLE A.7: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur CIRANO ZONA2A



A.1.5.3 CIRANO ZONA2B

La Figure A.18 fournit le plan de coupe médian en XY et également une description RZ de la configuration CIRANO ZONA2B.

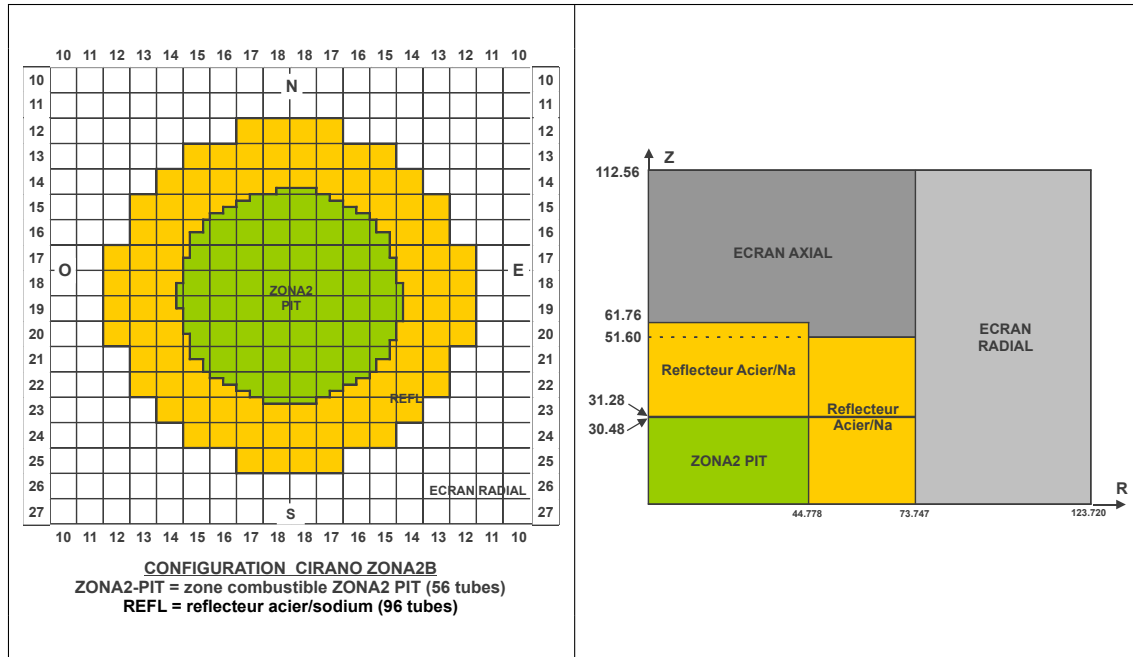


FIGURE A.18: Coupe XY et représentation RZ du cœur CIRANO ZONA2B

Sur la Figure A.19, on trouve deux types de motif radial, le premier où les 4 tubes centraux sont vidangés, le second où l'on vidange un total de 12 tubes. On voit que pour ce dernier motif, les effets de cylindrization vont être plus marqués que pour les autres cas de vidange étudiés. La Table A.8 liste les différentes expériences de vidanges du sodium simulées dans CIRANO ZONA2B

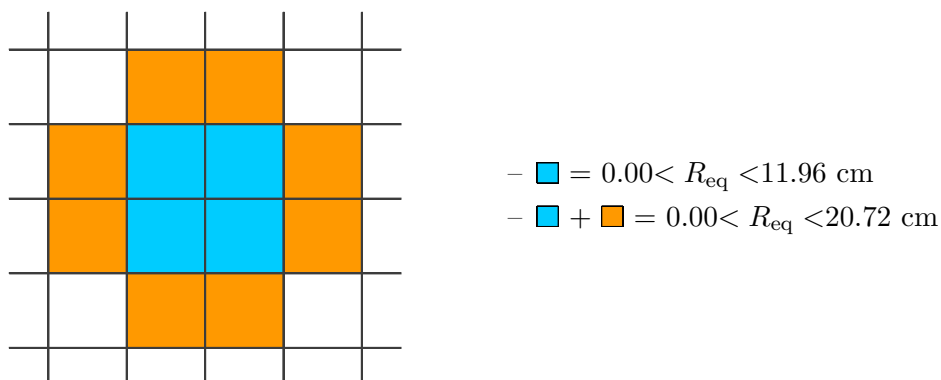


FIGURE A.19: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur CIRANO ZONA2B

$\Delta\rho_{Na}$	Configurations	
	Radiale	Axiale
SVRE 1	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V8
SVRE 2	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V16
SVRE 3	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V24
SVRE 4	$0.00 < R_{eq} < 11.96$	V4+4
SVRE 5	$0.00 < R_{eq} < 20.72$	V8
SVRE 6	$0.00 < R_{eq} < 20.72$	V16
SVRE 7	$0.00 < R_{eq} < 20.72$	V24
SVRE 8	$0.00 < R_{eq} < 20.72$	V4+4

TABLE A.8: Liste des  $\Delta\rho_{Na}$  réalisées dans le cœur CIRANO ZONA2B

## A.2 ZPPR-10A

Les informations présentées pour cette installation sont entièrement tirées de la base de données internationale de benchmarks IHRPhE-2009 [20]. Nous ne donnons ici qu'une présentation résumée de cette expérience, qui a été étudiée pour ces travaux de thèse et le lecteur intéressé pourra trouver les informations qui lui sont manquantes dans cette Référence [20].

Le cœur ZPPR-10A est une des expériences du programme JUPITER-I et avait pour but d'étudier les caractéristiques neutroniques de grands coeurs de type réacteur rapide sur-générateur (*Large Fast Breeder Reactor Core* ou *FBR*). L'expérience simule un FBR de type 600 MWe avec deux régions combustibles homogènes et 19 suiveurs (*Control Rod Positions* ou *CRP*) pour représenter une configuration d'un réacteur de puissance.

La divergence a eu lieu le 20 Novembre 1978. La partie fissile représente 4.596 m<sup>3</sup> pour une hauteur de 40 pouces (101.6 cm) et est entourée de couvertures radiales et axiales.

### A.2.1 Assemblages Utilisés dans ZPPR-10A

On y distingue 4 types différents d'assemblages (tiroirs) combustibles, présentés avec davantage de détails sur la Figure A.20 :

- SCF : Single Column Fuel - Pu/(U+Pu)=11.1%.
- DCF : Double Column Fuel - Pu/(U+Pu)=23.4%.
- LLT : Light Light Type - Pu/(U+Pu)=15.0%.
- HLT : Heavy Light Type - Pu/(U+Pu)= idem SCF.

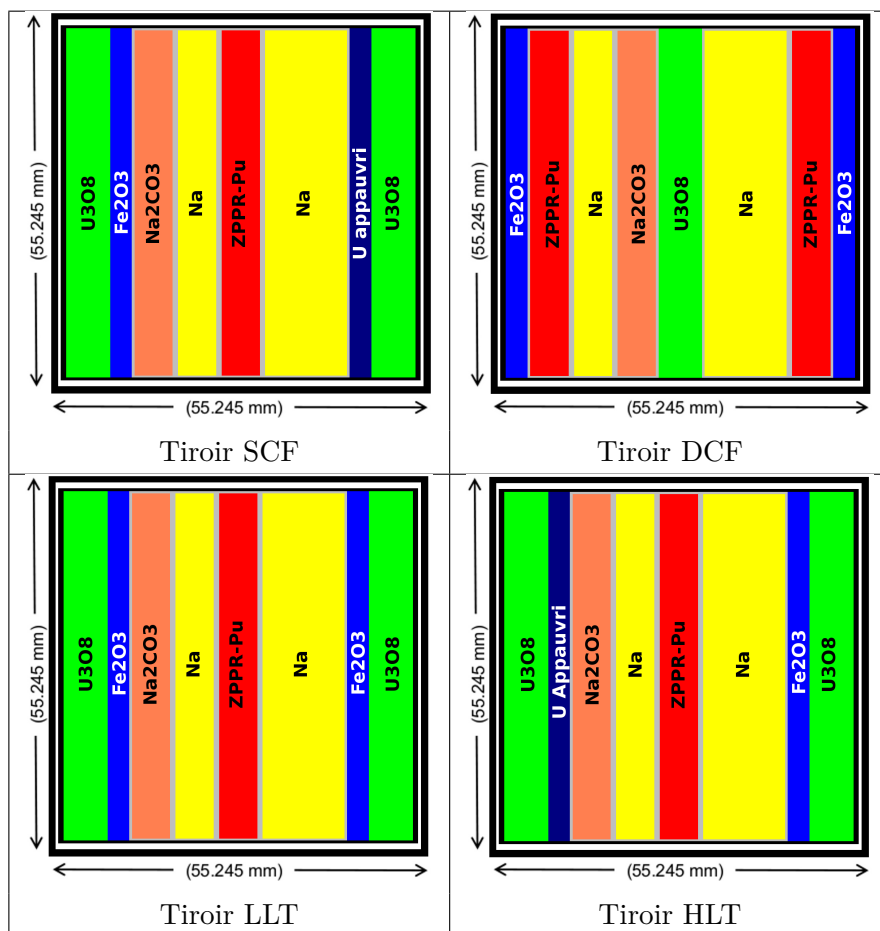


FIGURE A.20: Cellules combustibles utilisées dans l'expérience ZPPR-10A

Le plutonium employé dans ces tiroirs (dans les plaques “ZPPR-Pu” sur la Figure A.20) est de bonne qualité puisqu'il contient environ 87% de  $^{239}\text{Pu}$  et 11% de  $^{240}\text{Pu}$ .

En termes de dureté de spectre, les tiroirs HLT, SCF et LLT sont placés en deçà des assemblages ZONA3 (assemblages MASURCA les moins enrichis). Par contre, les tiroirs de type DCF sont compris entre des assemblages ZONA1 et ZONA2 d'un point de vue dureté de spectre.

## A.2.2 Plan de Chargement de l'Expérience ZPPR-10A

Deux type de géométrie sont à disposition : l'une décrite en XY (Figure A.21) avec les différents tiroirs décrits de manière hétérogène et l'autre, en RZ (Figure A.22) dans une version avec des coeurs interne et externe où les tiroirs ont été homogénéisés. Les *Control Rod Positions* sont des tiroirs entièrement remplis de sodium.

Pour la géométrie RZ, on pourra noter que le coeur interne est composé (par table) de 736 SCF, 60 DCF, 12 LLT et 4 HLT ce qui donne une teneur moyenne Pu/(U+Pu) de 12%. Le coeur externe, quant à lui, est composé de 334 SCF et 334 DCF pour une teneur Pu/(U+Pu) de 17%.

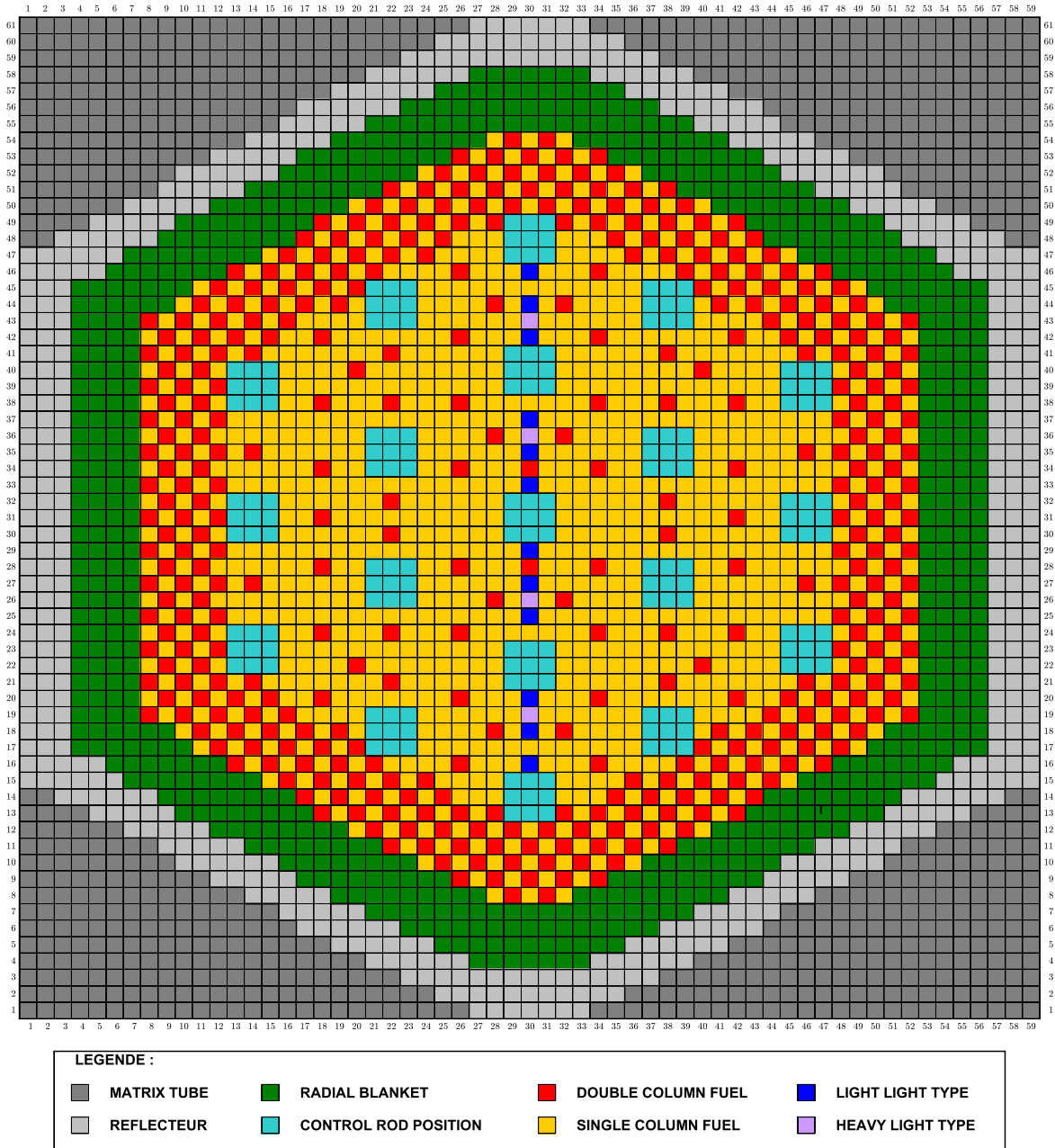


FIGURE A.21: Coupe XY du coeur ZPPR-10A

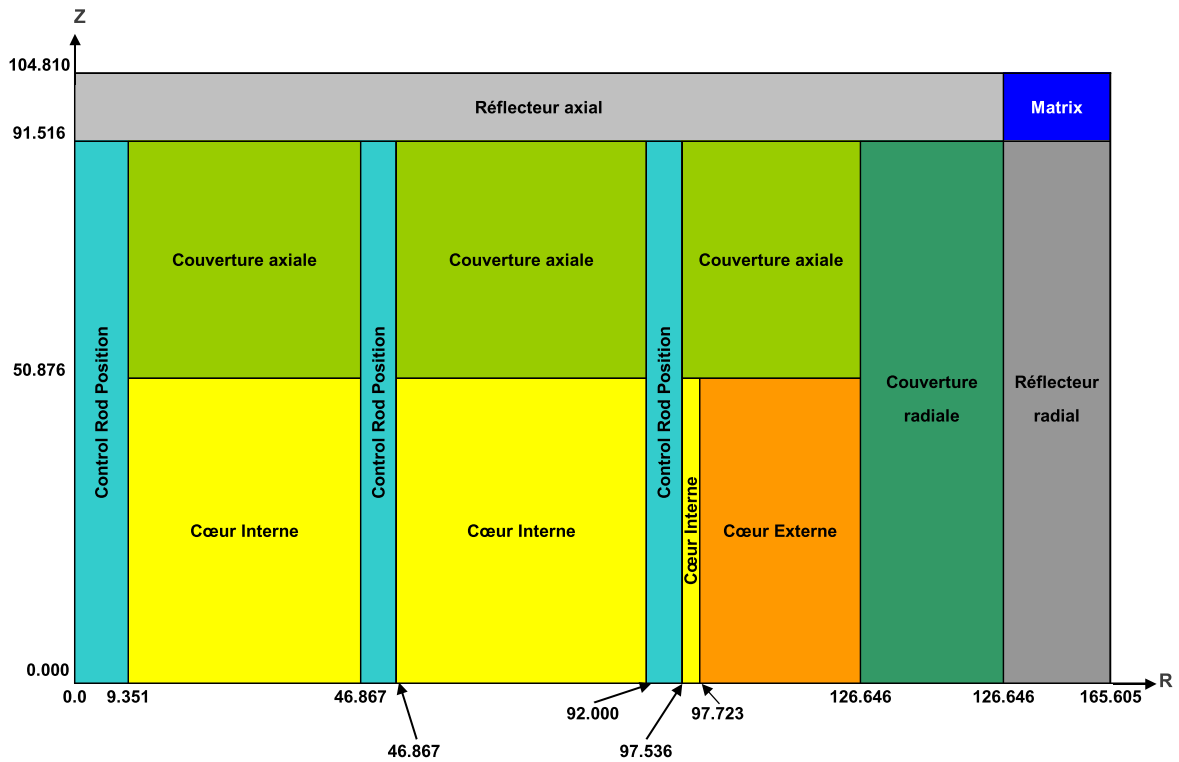


FIGURE A.22: Description RZ du cœur ZPPR-10A

### A.2.3 Effets en Réactivité de Vidange

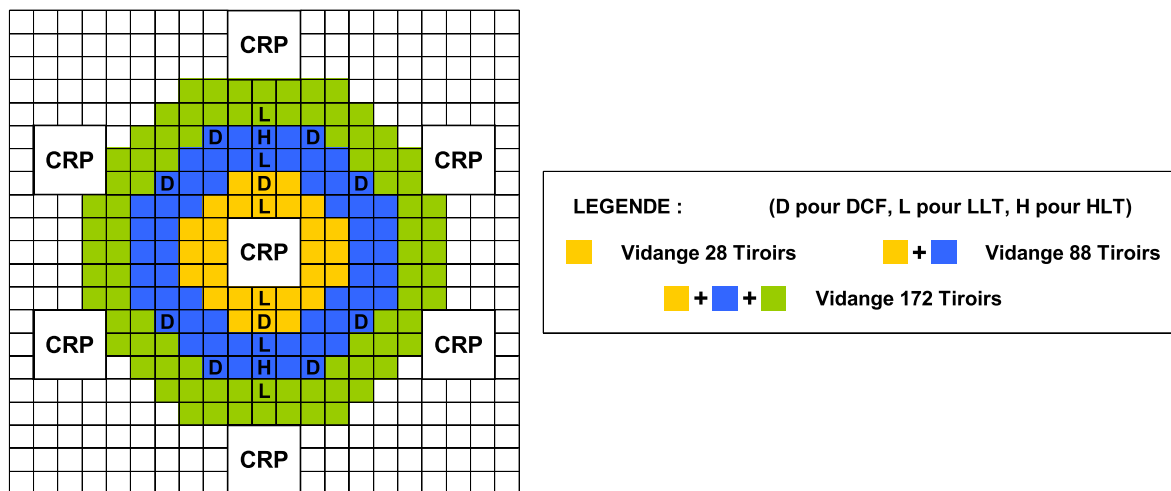


FIGURE A.23: Motifs radiaux de vidange sodium dans le cœur ZPPR-10A

Plusieurs configurations de vidange (radiales et axiales) ont été réalisées pour cette expérience comme le montre la Figure A.23. Les valeurs mesurées sont regroupées dans la Table A.9.

À noter que seules les plaques en sodium sont remplacées par des plaques vides pour simuler les vidanges (les plaques en  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  ne sont pas substituées, par conséquent la fraction de  $^{23}\text{Na}$  vidangée est d'environ 75% et non pas 100% comme cela est le cas dans les configurations MASURCA).

Enfin, une partie (environ la moitié) des couvertures fertiles axiales est vidangée dans les trois dernières configurations (SVRE 10 à 12).

$\Delta\rho_{\text{Na}}$	Configurations		$\rho_{\text{exp}}$ (en $\epsilon$ )
	Radiale	Axiale	
SVRE 01	$9.35 < R_{\text{eq}} < 18.96$ (28 tiroirs)	20.32 cm	$6.49 \pm 0.13$
SVRE 02	$9.35 < R_{\text{eq}} < 30.70$ (88 tiroirs)	20.32 cm	$22.26 \pm 0.26$
SVRE 03	$9.35 < R_{\text{eq}} < 41.93$ (172 tiroirs)	20.32 cm	$42.64 \pm 0.46$
SVRE 04	$9.35 < R_{\text{eq}} < 18.96$ (28 tiroirs)	40.64 cm	$43.91 \pm 0.47$
SVRE 05	$9.35 < R_{\text{eq}} < 30.70$ (88 tiroirs)	40.64 cm	$48.74 \pm 0.53$
SVRE 06	$9.35 < R_{\text{eq}} < 41.93$ (172 tiroirs)	40.64 cm	$55.15 \pm 0.61$
SVRE 07	$9.35 < R_{\text{eq}} < 18.96$ (28 tiroirs)	50.80 cm	$53.98 \pm 0.58$
SVRE 08	$9.35 < R_{\text{eq}} < 30.70$ (88 tiroirs)	50.80 cm	$50.60 \pm 0.56$
SVRE 09	$9.35 < R_{\text{eq}} < 41.93$ (172 tiroirs)	50.80 cm	$46.73 \pm 0.52$
SVRE 10	$9.35 < R_{\text{eq}} < 18.96$ (28 tiroirs)	68.58 cm	$44.78 \pm 0.49$
SVRE 11	$9.35 < R_{\text{eq}} < 30.70$ (88 tiroirs)	68.58 cm	$50.52 \pm 0.45$
SVRE 12	$9.35 < R_{\text{eq}} < 41.93$ (172 tiroirs)	68.58 cm	$35.39 \pm 0.39$

TABLE A.9: Liste des  $\Delta\rho_{\text{Na}}$  réalisées dans le cœur ZPPR-10A

#### A.2.4 Calcul du $\beta_{\text{eff}}$

On remarque dans la Table A.9 que les valeurs expérimentales sont données en  $\epsilon$  comme c'est souvent le cas pour des effets en réactivité. Afin de pouvoir comparer ces valeurs expérimentales aux calculs, il est nécessaire de convertir l'effet en réactivité calculé en pcm dans la même unité, c'est-à-dire en  $\epsilon$ . Ainsi, on voit que cela requiert le calcul du  $\beta_{\text{eff}}$ .

Ce type de calcul se fait depuis plusieurs années à travers les codes déterministes, par l'utilisation des outils de perturbations. Très récemment, le code stochastique TRIPOLI (depuis la version 4.7) permet d'estimer par deux méthodes le  $\beta_{\text{eff}}$ .

Dans les cœurs MASURCA, ce calcul était effectué auparavant avec une description géométrique RZ, en passant par un calcul de transport réalisé avec BISTRO dans ERANOS (afin d'avoir accès aux intégrales de perturbation). On obtenait pour ces configurations des valeurs de  $\beta_{\text{eff}}$  généralement assez proches de ce qui avait été évalué pour chaque programme.

Pour le cœur ZPPR-10A, le calcul du  $\beta_{\text{eff}}$  avec ERANOS (en géométrie RZ) nous donnait une valeur de 369.4 pcm tandis que la valeur calculée à l'époque de l'expérience était de 339.3 pcm, soit une sur-estimation de près de 9%. C'est un véritable problème puisque cette valeur va normaliser toutes les valeurs calculées pour les effets en réactivité de vidange.

Avec la sortie de TRIPOLI-4.7, nous avons souhaité essayer les nouveaux outils pour l'estimation du  $\beta_{\text{eff}}$  dans ce cœur (bien qu'ils ne soient pas encore entièrement validés). Les deux estimateurs ont convergé vers une valeur de  $359.9 \pm 0.5$  pcm, ce qui est en deçà de la valeur calculée avec ERANOS. Vers la fin de cette thèse, des développements ont été effectués dans la plateforme PARIS pour permettre le calcul du  $\beta_{\text{eff}}$  sans y faire d'approximation. En effet dans ERANOS, on suppose que le nombre de neutrons retardés par famille est constant suivant l'énergie alors que les évaluations présentent une évolution de cette valeur, surtout vers 1 MeV. La prise en compte de cette dépendance dans PARIS nous a permis d'obtenir une valeur de  $\beta_{\text{eff}}$  de 360.2 pcm, ce qui est en très bon accord avec l'estimation avec TRIPOLI.

Cette nouvelle valeur reste, bien entendu, en désaccord (sur-estimation d'environ 6%) avec le  $\beta_{\text{eff}}$  de l'époque, mais cette correction a sensiblement amélioré les accords ( $C - E$ ) pour les effets de vidange dans le cœur ZPPR-10A.

# Analyse de l'Impact du Schéma de Calcul en Déterministe

---

Dans le Chapitre 2, nous avons évoqué l'usage d'un schéma de calcul déterministe appelé "schéma de référence". Il est notamment décrit en détail à la page 34. Cette annexe a pour objectif de montrer l'impact des hypothèses et approximations faites dans les différentes phases déterministes (cellule et cœur) qui permettent de mener à terme les calculs de la réactivité et des vidanges du sodium. Pour cela, on utilisera les configurations détaillées en Annexe A et employées pour analyser l'impact des données nucléaires du sodium sur ces dernières dans le Chapitre 2. Dans un souci de clarté, nous avons pensé qu'il était préférable de séparer le schéma de calcul utilisé au niveau cellule du schéma de calcul au niveau cœur.

## B.1 Impact du Schéma de Calcul Cellule

### B.1.1 Description des Schémas Utilisés

Le calcul cellule (ou calcul réseau) nécessite une excellente prise en compte de la neutronique, cela pour éviter des conséquences souvent désastreuses par la suite dans le calcul au niveau cœur. Dans ERANOS [21] et plus particulièrement dans ECCO [22] (module employé pour le calcul cellule des RNR), le calcul réseau se fait en plusieurs passes ou *steps* où plusieurs options peuvent être choisies. Ainsi, nous avons décidé de prendre le schéma dit de référence, où certaines de ces options seront modifiées afin de redéfinir d'autres schémas de calcul cellule dont les détails sont donnés dans les Tables B.1 à B.5.

Tout d'abord, les cellules MASURCA qui sont vidangées possèdent une spécificité qui ne se reproduit que très rarement dans les assemblages de RNR industriels (type Phénix ou SuperPhénix). Comme l'indique la Figure B.1, des couloirs de fuite radiaux apparaissent et nécessitent un traitement particulier.



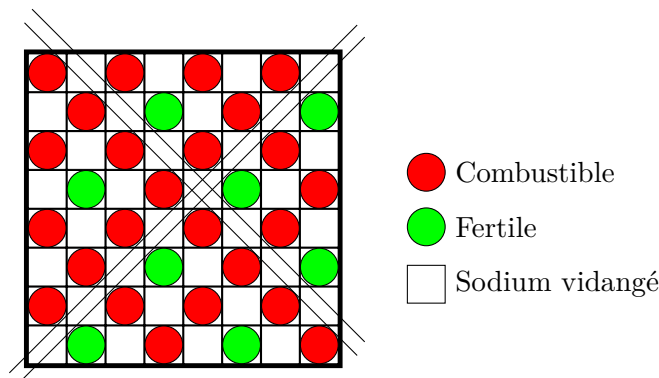


FIGURE B.1. Couloirs de fuite radiaux lors de la vidange du sodium dans un assemblage MASURCA de type ZONA1

Dans le schéma de référence, on utilise des probabilités de collision approchées en temps normal (méthode de Roth avec différentiation des quatre faces), cependant les cellules vidangeables (combustibles et fertiles) sont traitées avec la méthode exacte PRONACE de calcul de probabilités de collision. C'est la principale différence entre le schéma de référence et le schéma Bis 1.

Ensuite, on utilise une source externe (pour les cellules fertiles et les cellules type réflecteur) provenant des cellules combustibles voisines dans le schéma de référence. À l'inverse, dans le schéma Bis 2, la source est intrinsèque à la cellule étudiée puisqu'on utilise les fissions provoquées soit par l'uranium contenu dans la cellule, soit par les traces de  $^{239}\text{Pu}$  ( $10^{-10}$ ) qui ont été ajoutées dans les compositions des réglettes (dans le cas où il n'y a pas d'uranium dans la cellule comme pour les réflecteurs).

Dans le schéma Bis 3, les calculs de condensation énergétique (passage d'un découpage fin à un découpage plus grossier) aboutissent dorénavant à une structure en 172 groupes au lieu de 33 groupes dans le schéma de référence. Nous avons choisi 33 groupes d'énergie pour la référence car les calculs cœurs en 3D nécessiteraient énormément de mémoire avec un découpage plus fin.

Cette section étant dédiée uniquement aux calculs cellule, les calculs de cœur seront toujours réalisées de la même manière (schéma fixe) en utilisant le solveur  $S_n$  en différences finies nommé BISTRO [114], où les géométries des cœurs sont décrites de manière cylindrique (RZ).

	Schéma Référence	Schéma Bis 1	Schéma Bis 2	Schéma Bis 3
<b>Step 1</b>	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Laplacien Crit.	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Laplacien Crit.	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Laplacien Crit.	Geométrie hét. <b>Découpage 172g</b> Laplacien Crit.
<b>Step 2</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 172g</b>
<b>Step 3</b>	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Laplacien Crit.	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Laplacien Crit.	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Laplacien Crit.	Geométrie hét. <b>Découpage 172g</b> Laplacien Crit.
<b>Step 4</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 172g</b>

TABLE B.1. Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages combustibles classiques (non-vidangés)

	Schéma Référence	Schéma Bis 1	Schéma Bis 2	Schéma Bis 3
<b>Step 1</b>	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> <b>Source Comb.</b> Lapl. empirique	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> <b>Source Comb.</b> Lapl. empirique	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> <b>Source Int.</b> Lapl. empirique	Geométrie hét. <b>Découpage 172g</b> <b>Source Comb.</b> Lapl. empirique
<b>Step 2</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 172g</b>
<b>Step 3</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 172g</b>

TABLE B.2. Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages fertiles classiques (non-vidangés)

	Schéma Référence	Schéma Bis 1	Schéma Bis 2	Schéma Bis 3
<b>Step 1</b>	<b>Découpage 33g</b> Source Externe Laplacien nul	<b>Découpage 33g</b> Source Externe Laplacien nul	<b>Découpage 33g</b> Source Externe Laplacien nul	<b>Découpage 172g</b> Source Externe Laplacien nul
<b>Step 2</b>	Geométrie hom. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hom. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hom. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hom. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 172g</b>
<b>Step 3</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 172g</b>

TABLE B.3. Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages en matériaux de structure (diffuseur, écran, etc...)

	Schéma Référence	Schéma Bis 1	Schéma Bis 2	Schéma Bis 3
<b>Step 1</b>	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Lapl. imposé	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Lapl. imposé	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> Lapl. imposé	Geométrie hét. <b>Découpage 172g</b> Lapl. imposé
<b>Step 2</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 172g</b>
<b>Step 3</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Pronace</b> <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Roth</b> <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Pronace</b> <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Pronace</b> <b>Découpage 172g</b>
<b>Step 4</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 172g</b>

TABLE B.4. Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages combustibles vidangeables

	Schéma Référence	Schéma Bis 1	Schéma Bis 2	Schéma Bis 3
<b>Step 1</b>	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> <b>Source Comb.</b> Lapl. empirique	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> <b>Source Comb.</b> Lapl. empirique	Geométrie hét. <b>Découpage 33g</b> <b>Source Int.</b> Lapl. empirique	Geométrie hét. <b>Découpage 172g</b> <b>Source Comb.</b> Lapl. empirique
<b>Step 2</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 33g</b>	Geométrie hét. Découpage 1968g Autoprotection <b>Condens. 172g</b>
<b>Step 3</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Pronace</b> <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Roth</b> <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Pronace</b> <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hét. <b>Méth. Pronace</b> <b>Découpage 172g</b>
<b>Step 4</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 33g</b>	Geométrie hom. <b>Découpage 172g</b>

TABLE B.5: Options utilisées pour le calcul cellule des assemblages fertiles vidangeables

## B.1.2 Résultats

Comme nous l'avons fait auparavant lors du Chapitre 2, on montre dans les Tables qui vont suivre seulement l'écart induit par l'utilisation d'un schéma par rapport au schéma de référence. Par exemple,  $\Delta(\text{Bis 1}) = C(\text{Bis 1}) - C(\text{Ref.})$  correspond à la différence des calculs obtenus avec le schéma Bis 1 et des calculs avec le schéma de référence.

### B.1.2.1 Réactivité

La Table B.6 présente l'impact sur la réactivité de référence des cœurs MASURCA et ZPPR, des schémas de calcul cellule "bis" par rapport au schéma de référence. L'utilisation de probabilités de collision approchées (schéma Bis 1) pour les cellules "vidangeables" a tendance à augmenter la réactivité de 20 à 60 pcm environ, ce qui reste assez faible.

Par contre, le schéma Bis 2 (traces de Pu dans les assemblages fertiles) a un impact très important sur ce paramètre neutronique puisque ce dernier, suivant la quantité de couverture présente dans le cœur, va augmenter d'une centaine de pcm jusqu'à près de 350 pcm.

Enfin, le schéma Bis 3 (172 groupes) n'a pas d'impact trop important sur la réactivité, mis à part pour le cœur CIRANO ZONA2B où la condensation joue un rôle clé.

$\rho$ (pcm)	$\Delta$ (Bis 1)	$\Delta$ (Bis 2)	$\Delta$ (Bis 3)
PRE-RACINE I	+7	+188	-12
PRE-RACINE IIA	+40	+122	-2
PRE-RACINE IIB	+40	+122	-4
ZPPR-10A	+0	+82	+20
RACINE-1A	+18	+311	-61
RACINE-1D Na Fol.	+11	+349	-71
RACINE-1D B <sub>4</sub> C Rod	+14	+290	-34
CIRANO ZONA2A	+66	+187	+10
CIRANO ZONA2B	+58	+289	+290

TABLE B.6. Impact des schémas de calcul cellules sur la réactivité dans les cœurs MASURCA et ZPPR

### B.1.2.2 Effets en Réactivité de Vidange Sodium (SVRE)

Dans les Tables B.7, B.8, B.9 et B.10, on trouve les résultats de l'impact du schéma réseau sur les SVRE respectivement dans les cœurs PRE-RACINE IIA et PRE-RACINE IIB, le cœur ZPPR-10A, les cœurs RACINE-IA et ID et les cœurs CIRANO ZONA2A et ZONA2B.

Dans les cœurs PRE-RACINE, l'usage de probabilités de collision approchées (schéma Bis 1) a l'effet le plus important et peut atteindre plusieurs  $\sigma$  expérimentaux des SVRE. Le schéma Bis 2 impacte un peu moins les SVRE mais reste non-négligeable. La condensation à 172 groupes (schéma Bis 3) a un moindre impact que les deux autres schémas.

Le cœur ZPPR-10A est le moins impacté par les schémas de calcul réseau, à part pour les vidanges dans les couvertures fertiles (SVRE 10 à 12) où le schéma Bis 2 (avec source interne des couvertures) commence à influencer. Les cellules dans cette configuration sont à une dimension, dans laquelle les probabilités de collision sont calculées de manière exacte (aucun impact du schéma Bis 1). Le fait de modéliser les cellules en 1D (et non en 2D comme cela est le cas pour les assemblages MASURCA) dans ce cœur pourrait expliquer la faible influence des schémas de calcul cellule.

Les cœurs RACINE sont le plus impactés (plusieurs  $\sigma$  exp.) par le schéma Bis 2 (traces de Pu) et cela peut s'interpréter par la présence très importante d'anneaux cylindriques composés de couvertures fertiles (schémas des cœurs donnés en Annexe A). Les probabilités de collision approchées (schéma Bis 1) jouent un rôle un peu moins significatif. La condensation a le moins d'impact ici.

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Bis 1)	$\Delta$ (Bis 2)	$\Delta$ (Bis 3)
PR2A SVRE 01	$\pm 4$	+0.1	+0.1	+0.3
PR2A SVRE 02	$\pm 3$	+0.5	+0.2	+1.1
PR2A SVRE 03	$\pm 3$	+1.4	+0.6	+1.8
PR2A SVRE 04	$\pm 3$	+3.4	+1.4	+2.0
PR2A SVRE 05	$\pm 3$	+6.1	+2.6	+2.6
PR2A SVRE 06	$\pm 4$	+7.4	+2.0	+5.3
PR2A SVRE 07	$\pm 4$	+1.0	-0.5	+0.1
PR2A SVRE 08	$\pm 4$	+4.4	+1.9	+1.4
PR2A SVRE 09	$\pm 5$	+5.7	+1.3	+1.4
PR2A SVRE 10	$\pm 10$	+10.7	+4.7	+4.2
PR2A SVRE 11	$\pm 10$	+16.5	+7.1	+5.8
PR2A SVRE 12	$\pm 7$	+36.7	+14.7	+9.2
PR2A SVRE 13	$\pm 12$	+31.3	+12.3	+9.3
PR2A SVRE 14	$\pm 12$	+19.6	+6.7	+6.2
PR2B SVRE 1	$\pm 3$	+0.1	+0.0	+0.3
PR2B SVRE 2	$\pm 3$	+1.4	+0.6	+1.5
PR2B SVRE 3	$\pm 3$	+5.9	+2.4	+2.6
PR2B SVRE 4	$\pm 8$	+16.2	+7.3	+6.7
PR2B SVRE 5	$\pm 8$	+35.6	+14.1	+8.4

TABLE B.7. Impact des schéma de calcul cellule sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans les cœurs PRE-RACINE-IIA et PRE-RACINE-IIB

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Bis 1)	$\Delta$ (Bis 2)	$\Delta$ (Bis 3)
SVRE 01	$\pm 0.5$	+0.0	-0.1	+0.2
SVRE 02	$\pm 0.9$	+0.0	-0.4	+0.6
SVRE 03	$\pm 1.7$	+0.0	-0.5	+0.1
SVRE 04	$\pm 1.7$	+0.0	-0.3	+0.4
SVRE 05	$\pm 1.9$	+0.0	+0.0	+1.4
SVRE 06	$\pm 2.2$	+0.0	+0.1	+1.0
SVRE 07	$\pm 2.1$	+0.0	+0.3	+1.7
SVRE 08	$\pm 2.0$	+0.0	+0.9	+1.9
SVRE 09	$\pm 1.9$	+0.0	+2.1	+2.6
SVRE 10	$\pm 1.8$	+0.0	+2.8	+0.8
SVRE 11	$\pm 1.6$	+0.0	+5.6	-0.1
SVRE 12	$\pm 1.4$	+0.0	+8.9	-2.5

TABLE B.8: Impact des schéma de calcul cellule sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans le cœur ZPPR-10A

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Bis 1)	$\Delta$ (Bis 2)	$\Delta$ (Bis 3)
R1A SVRE 01	$\pm 3$	+1.3	+3.4	-0.8
R1A SVRE 02	$\pm 6$	+5.6	+13.3	+1.6
R1A SVRE 03	$\pm 12$	+1.0	+12.4	-1.0
R1A SVRE 04	$\pm 9$	+8.2	+20.7	-1.1
R1A SVRE 05	$\pm 4$	+6.6	+8.0	+0.6
R1A SVRE 06	$\pm 5$	+4.2	+9.4	+1.7
R1A SVRE 07	$\pm 7$	+7.0	+16.6	-0.1
R1A SVRE 08	$\pm 6$	+2.7	+6.6	-1.1
R1A SVRE 09	$\pm 9$	+3.9	-25.7	-17.5
R1A SVRE 10	$\pm 8$	+9.4	+14.9	-1.7
R1D-NaF SVRE 1	$\pm 5$	-1.0	+10.5	-4.2
R1D-NaF SVRE 2	$\pm 5$	+9.6	+21.7	-3.2
R1D-B <sub>4</sub> C SVRE 2	$\pm 5$	+9.1	+9.0	+0.3

TABLE B.9. Impact des schéma de calcul cellule sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans les cœurs RACINE-IA, RACINE-ID (Na Follower et B<sub>4</sub>C Rod)

Dans le cœur CIRANO ZONA2A, tous les schémas Bis ont un effet notable (environ un  $\sigma$  exp.) sur les SVRE.

Pour le cœur ZONA2B, l'impact le plus important vient de la condensation énergétique (schéma Bis 3) mais les autres schémas ont également une assez grande influence pour les "grosses" vidanges (SVRE 5 à 8).

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Bis 1)	$\Delta$ (Bis 2)	$\Delta$ (Bis 3)
ZONA2A SVRE 1	$\pm 2.7$	-0.9	+0.5	+1.4
ZONA2A SVRE 2	$\pm 2.7$	-0.1	+1.4	+2.7
ZONA2A SVRE 3	$\pm 3.5$	+4.2	+3.7	+3.4
ZONA2A SVRE 4	$\pm 3.0$	+3.4	+2.2	+1.1
ZONA2B SVRE 1	$\pm 2.7$	-1.0	+0.6	+1.9
ZONA2B SVRE 2	$\pm 2.7$	-0.2	+2.1	+5.7
ZONA2B SVRE 3	$\pm 3.5$	+4.3	+5.0	+8.1
ZONA2B SVRE 4	$\pm 3.0$	+3.7	+2.9	+2.7
ZONA2B SVRE 5	$\pm 2.7$	-1.3	+2.5	+6.8
ZONA2B SVRE 6	$\pm 2.7$	+1.6	+7.1	+13.3
ZONA2B SVRE 7	$\pm 3.5$	+13.5	+15.8	+19.6
ZONA2B SVRE 8	$\pm 3.0$	+11.4	+8.3	+7.8

TABLE B.10. Impact des schémas de calcul cellule sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans les cœur CIRANO ZONA2A et ZONA2B

## B.2 Impact du Schéma de Calcul Cœur

### B.2.1 Description des Schémas Utilisés

Une fois que le calcul au niveau des assemblages est effectué<sup>1</sup>, l'étape suivante, appelée calcul cœur, consiste à décrire le cœur du réacteur et d'y calculer les paramètres neutroniques d'intérêt (réactivité, effets en réactivité, nappe de puissance, traverses de taux de réactions, etc...).

1. Le calcul cellule produit des sections macroscopiques homogénéisées et condensées dans un découpage énergétique large, plus adapté pour le calcul cœur.



Pour cela, la résolution du calcul cœur nécessite plusieurs éléments :

- une description géométrique du cœur : les géométries des réacteurs sont données sous forme soit 3D cartésienne soit 3D hexagonale. Auparavant, on “cylindrisait” ces géométries pour avoir accès aux modules de perturbation/sensibilité dans ERANOS. Avec les nouveaux solveurs développés (SNATCH [24]) au sein de la plateforme PARIS [23], on peut dorénavant conserver les géométries originales.
- le choix du solveur : on a, dans ERANOS, accès à un certain nombre de solveurs en transport (on n'utilise pas les solveurs en diffusion). Le plus utilisé, BISTRO [114], est un solveur de type  $S_n$  en différences finies pour traiter des géométries à 2 dimensions (XY ou RZ). Un solveur 3D de transport nodal variationnel VARIANT [115] existe également mais ne permet pas les calculs d'intégrales de perturbation. Dans la plateforme PARIS, SNATCH est un groupe de solveurs de transport  $S_n$  basés sur les éléments finis discontinus.
- des options de résolution propres à chaque solveur : discrétisation angulaire  $S_n$ , critère de convergence des itérations interne et externe, ordre des fonctions de base utilisées pour les éléments finis, etc. . .

Les outils de perturbation étaient nécessaires dans notre cas pour la production de sensibilités, c'est la raison pour laquelle nous n'avons pas utilisé VARIANT. Les cœurs que nous avons étudiés sont décrits en cartésien 3D. Notre schéma de référence, présenté dans le Chapitre 2, se base donc sur la résolution avec SNATCH où la description exacte des géométries est représentée. Le schéma cœur simplifié, encore largement employé pour les études de RNR, passe par la résolution avec BISTRO avec une géométrie simplifiée et cylindrisée. Dans la Table B.11 sont présentées les différentes options, relatives à chaque schéma de calcul cœur.

	Schéma Référence	Schéma Simplifié
Solveur	$S_n$	$S_n$
Approximation Spatiale	Éléments finis discontinus	Différences finies
Type de Géométrie	Cartésien XYZ	Cylindrique RZ
Discrétisation Angulaire	$S_4$	$S_8$
Raffinement en ordre	$p \in [2 - 4]$	-
Convergence intégrale	$10^{-6}$	$10^{-6}$
Convergence locale	$10^{-5}$	$10^{-5}$
Nombre max d'itérations	200	200

TABLE B.11: Détails des schémas de référence et simplifié pour le calcul cœur

Le raffinement de maillage est une particularité offerte par les solveurs de SNATCH dans PARIS. Dans cette optique, il est possible, soit de raffiner en espace (raffinement de type  $h$ ) où une maille de calcul est subdivisée en plusieurs sous-maillages, soit de raffiner en ordre

(raffinement de type  $p$ ) où on augmente l'ordre des fonctions-tests qui décrivent le flux dans une maille spécifique. Suite aux travaux réalisés dans la Référence [25], nous avons opté pour un raffinement uniforme en  $p$ , s'étalant de 2 à 4 en fonction du nombre de cellules de calcul présenté par la configuration étudiée. En effet, nous avons constaté que le passage d'un calcul avec  $p = 1$  au calcul avec  $p = 2$  induisait des effets significatifs sur les grandeurs neutroniques observées. Par contre, le passage  $p = 2$  à  $p = \{3, 4\}$  avait bien moins d'impact.

La discrétisation angulaire  $S_4$  en 3D requiert 24 directions tandis que cela nécessite 80 directions pour du  $S_8$ . Dans le cas 3D avec SNATCH, on observe peu de différence entre le passage de  $S_4$  à  $S_8$ <sup>2</sup>. Par ailleurs, une discrétisation angulaire plus fine nécessite beaucoup plus de mémoire, ce qui devient très rapidement un facteur limitant. Ce n'est pas le cas de la géométrie RZ où une discrétisation  $S_8$  requiert deux fois moins de directions qu'en 3D, soit 40 directions. De plus, le nombre de mailles de calcul est bien moins important en RZ qu'en 3D-XYZ, ce qui conduit à une empreinte mémoire bien moindre.

## B.2.2 Résultats

### B.2.2.1 Réactivité

On trouve dans la Table B.12 l'effet des schémas de calcul cœur sur la réactivité pour les cœurs étudiés. En l'occurrence, l'effet dans ce cas consiste en la différence du calcul obtenu avec le schéma dit "simplifié" avec le résultat obtenu avec le schéma de référence. Les écarts sont très différents d'un cœur à l'autre : par exemple, pour PRE-RACINE I, PRE-RACINE IIA, RACINE-1A ou encore ZONA2A, l'effet du schéma est assez faible sur la réactivité ; par contre, pour les autres cœurs, on observe des effets, positif et négatif, de l'ordre de la centaine de pcm (plus de 500 pcm pour RACINE-1D avec suiveur de sodium. . .).

---

2. Cela dépend des cœurs mais l'effet est en général inférieur à 10 pcm

$\rho$ (pcm)	$\Delta$ (Simplifié - Référence)
PRE-RACINE I	+34
PRE-RACINE IIA	-31
PRE-RACINE IIB	+229
ZPPR-10A	+97
RACINE-1A	-4
RACINE-1D Na Fol.	-13
RACINE-1D B <sub>4</sub> C Rod	+125
CIRANO ZONA2A	+40
CIRANO ZONA2B	+230

TABLE B.12. *Impact du schéma de calcul cœur sur la réactivité dans les cœurs MASURCA et ZPPR*

### B.2.2.2 Effets en Réactivité de Vidange Sodium (SVRE)

Les Tables B.13, B.14, B.15 et B.16 montrent les résultats de l'impact du schéma cœur sur les SVRE, respectivement dans les cœurs PRE-RACINE IIA et PRE-RACINE IIB, le cœur ZPPR-10A, les cœurs RACINE-IA et ID et les cœurs CIRANO ZONA2A et ZONA2B.

Dans les cœurs PRE-RACINE, l'impact du schéma simplifié reste assez faible (inférieur à l'incertitude expérimentale), sauf pour les deux dernières vidanges dans PRE-RACINE IIB où les volumes de sodium vidangés sont plus importants (composantes de fuite et spectrale supérieures à 500 pcm en absolu mais qui se compensent sur l'effet global).

Le schéma simplifié a un effet significatif dans les vidanges du sodium pour le cœur ZPPR-10A. En effet, les écarts obtenus sont pour la grande majorité des SVRE très supérieures aux écarts-types expérimentaux ( $\sigma$  exp.). Mis à part la première configuration, la cylindrisation (XYZ à RZ) a pour effet de sur-estimer l'effet en réactivité de vidange dans ce cœur.

Le cœur RACINE-IA n'est en général pas trop impacté par l'utilisation du schéma simplifié pour les SVRE. Par contre, les vidanges dans les cœurs RACINE-ID sont un peu plus sensibles aux effets de cylindrisation puisqu'on peut remarquer un écart légèrement supérieur aux incertitudes expérimentales.

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Simplifié - Référence)
PR2A SVRE 01	$\pm 4$	+0.1
PR2A SVRE 02	$\pm 3$	+0.9
PR2A SVRE 03	$\pm 3$	+1.1
PR2A SVRE 04	$\pm 3$	+0.9
PR2A SVRE 05	$\pm 3$	+1.1
PR2A SVRE 06	$\pm 4$	+0.5
PR2A SVRE 07	$\pm 4$	-0.3
PR2A SVRE 08	$\pm 4$	-0.2
PR2A SVRE 09	$\pm 5$	-1.4
PR2A SVRE 10	$\pm 10$	+1.1
PR2A SVRE 11	$\pm 10$	+3.9
PR2A SVRE 12	$\pm 7$	+3.2
PR2A SVRE 13	$\pm 12$	+0.8
PR2A SVRE 14	$\pm 12$	-2.5
PR2B SVRE 1	$\pm 3$	+0.6
PR2B SVRE 2	$\pm 3$	+1.6
PR2B SVRE 3	$\pm 3$	+2.9
PR2B SVRE 4	$\pm 8$	+8.6
PR2B SVRE 5	$\pm 8$	+17.1

TABLE B.13. Impact du schéma de calcul cœur sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans les cœurs PRE-RACINE-IIA et PRE-RACINE-IIB

Les résultats pour les SVRE pour le cœur ZONA2A sont assez influencés par le schéma simplifié, ce qui est somme toute logique puisque les motifs vidangés (voir Annexe A) ne ressemblent pas, en première approximation, à des cylindres. C'est d'autant plus vrai pour le cœur ZONA2B et en particulier pour les quatres dernières vidanges où la cylindrification des assemblages vidangés n'est plus très réaliste. Cela explique donc les effets très importants pour ces SVRE.

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Simplifié - Référence)
SVRE 01	$\pm 0.5$	-0.2
SVRE 02	$\pm 0.9$	+1.9
SVRE 03	$\pm 1.7$	+4.0
SVRE 04	$\pm 1.7$	+3.2
SVRE 05	$\pm 1.9$	+4.6
SVRE 06	$\pm 2.2$	+6.5
SVRE 07	$\pm 2.1$	+7.1
SVRE 08	$\pm 2.0$	+6.3
SVRE 09	$\pm 1.9$	+6.9
SVRE 10	$\pm 1.8$	+7.3
SVRE 11	$\pm 1.6$	+7.5
SVRE 12	$\pm 1.4$	+7.4

TABLE B.14: Impact du schéma de calcul cœur sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans le cœur ZPPR-10A

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Simplifié - Référence)
R1A SVRE 01	$\pm 3$	+0.3
R1A SVRE 02	$\pm 6$	+2.7
R1A SVRE 03	$\pm 12$	+0.5
R1A SVRE 04	$\pm 9$	+0.6
R1A SVRE 05	$\pm 4$	+0.2
R1A SVRE 06	$\pm 5$	-0.1
R1A SVRE 07	$\pm 7$	+0.4
R1A SVRE 08	$\pm 6$	-0.5
R1A SVRE 09	$\pm 9$	+7.3
R1A SVRE 10	$\pm 8$	+2.5
R1D-NaF SVRE 1	$\pm 5$	-2.1
R1D-NaF SVRE 2	$\pm 5$	-2.7
R1D-B <sub>4</sub> C SVRE 2	$\pm 5$	+3.3

TABLE B.15. Impact du schéma de calcul cœur sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans les cœurs RACINE-IA, RACINE-ID (Na Follower et B<sub>4</sub>C Rod)

$\Delta\rho_{Na}$ (pcm)	$\sigma$ exp. (pcm)	$\Delta$ (Simplifié - Référence)
ZONA2A SVRE 1	$\pm 2.7$	+1.1
ZONA2A SVRE 2	$\pm 2.7$	+2.2
ZONA2A SVRE 3	$\pm 3.5$	+1.8
ZONA2A SVRE 4	$\pm 3.0$	+1.0
ZONA2B SVRE 1	$\pm 2.7$	+1.2
ZONA2B SVRE 2	$\pm 2.7$	+0.9
ZONA2B SVRE 3	$\pm 3.5$	+2.4
ZONA2B SVRE 4	$\pm 3.0$	+1.6
ZONA2B SVRE 5	$\pm 2.7$	+5.9
ZONA2B SVRE 6	$\pm 2.7$	+11.6
ZONA2B SVRE 7	$\pm 3.5$	+15.9
ZONA2B SVRE 8	$\pm 3.0$	+4.8

TABLE B.16. *Impact du schéma de calcul cœur sur les  $\Delta\rho_{Na}$  dans les cœur CIRANO ZONA2A et ZONA2B*

### B.3 Conclusions sur les Schémas de Calcul Déterministes

Cette Annexe a permis de déterminer l'impact des schémas de calcul (réseau et cœur), employés pour les calculs déterministes, sur les paramètres neutroniques qui nous ont intéressés dans cette thèse, c'est-à-dire la réactivité et la vidange du sodium.

L'essentiel de la physique, plus précisément de la neutronique, se joue au niveau du calcul réseau (ou calcul cellule) et on a pu voir que le choix de diverses options est souvent crucial notamment pour les études de l'effet en réactivité de vidange.

Par ailleurs, nous avons observé que certains motifs vidangés étaient à la limite du cylindrisable, entraînant des biais non-négligeables dans les calculs cœur.

Avec l'évolution constante des codes de calcul neutroniques, on voit donc qu'il est primordial de mettre au point les schémas de calcul (ou d'en créer de nouveaux si les anciens sont inadaptés), ce qui est une des principales missions du LEPh.



# Validation des Développements dans CONRAD

---

Tout développement dans un code passe par une phase de validation, essentielle pour vérifier si les différents modules ou composants implémentés correspondent à ce qui est attendu. Pour le bon déroulement de cette thèse, plusieurs ajouts et/ou modifications ont été apportés dans le code CONRAD qu'il a fallu valider. La validation des principaux développements est détaillée dans cette Annexe.

## C.1 Calcul des Sections Inélastiques avec Reich-Moore

La prise en compte des sections inélastiques dans le domaine des résonances résolues (RRR), en particulier dans l'approximation Reich-Moore, a été un des premiers ajouts dans CONRAD.

Tout d'abord, cela a nécessité l'introduction des largeurs neutroniques inélastiques dans l'interface utilisateur du code, puis l'implémentation de la théorie dans le modèle Reich-Moore de CONRAD. Une fois les développements pour le calcul de ces sections effectués, nous avons dû les comparer, afin des les valider, avec un autre code qui permet le même genre de calcul. Pour cela, nous avons employé le code SAMMY dans sa version 7.0.0, où nous avons fait correspondre les fichiers d'entrée (fichiers *input*) avec CONRAD.

Il est obligatoire de vérifier toutes les réactions car l'ajout des largeurs inélastiques provoque des modifications non-négligeables sur les sections efficaces (apparition d'interférences). Sur la Figure C.1, on peut observer les différentes sections efficaces de notre évaluation du sodium dans le RRR, calculées avec les codes SAMMY et CONRAD. On remarque que les résidus sont toujours inférieurs (en valeur absolue) à  $10^{-5}\%$ , ce qui conforte nos développements dans CONRAD.



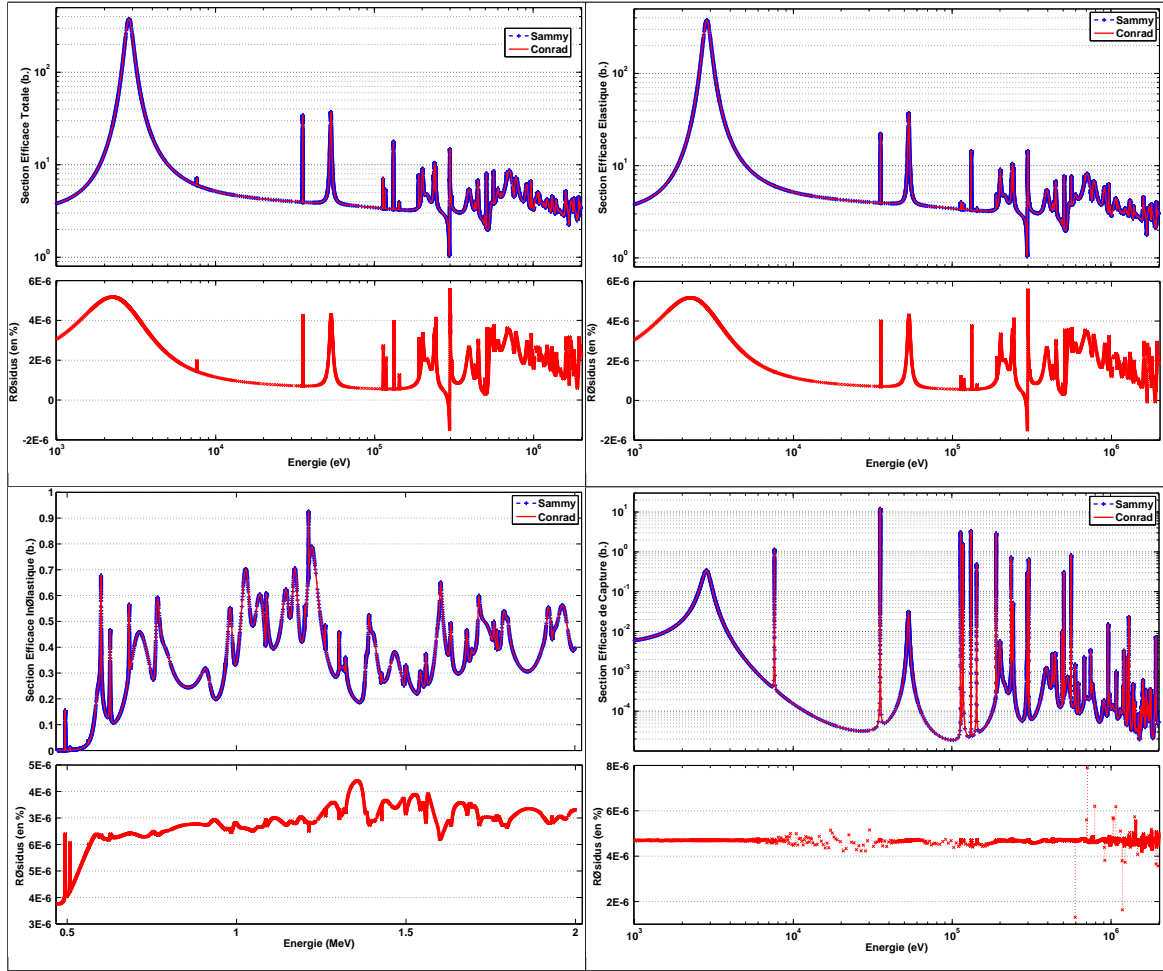


FIGURE C.1. Comparaison du calcul des sections efficaces totale, élastique, inélastique et de capture radiative entre CONRAD et SAMMY. Les courbes supérieures montrent les sections calculées avec les deux codes. Dans la partie inférieure, on trouve les résidus ( $= \frac{\sigma_{\text{Sammy}} - \sigma_{\text{Conrad}}}{\sigma_{\text{Sammy}}}$ ) en % entre les deux calculs

Après avoir introduit le calcul des sections inélastiques, il nous fallait valider le calcul des dérivées des sections aux nouveaux paramètres, *i.e.* aux largeurs inélastiques (en théorie, on calcule les dérivées par rapport aux amplitudes et pas directement aux largeurs). Ces dérivées sont nécessaires entre autres lors de l’ajustement à partir de mesures ou encore lors de la propagation d’incertitudes.

Dans le domaine des résonances résolues, les dérivées sont calculées analytiquement pour tous les paramètres de résonance tandis que pour les autres domaines d’évaluation (URR, continuum), les dérivées sont estimées numériquement. La formulation analytique pour les paramètres de résonances ne sera pas présentée ici, elle est cependant détaillée de manière exhaustive dans le manuel [64] du code SAMMY.

Présenter les dérivées n'est pas chose aisée (elles dépendent surtout du niveau des sections efficaces), par contre, les sensibilités (voir l'Équation (C.1), qui donne la formule de la sensibilité à une section par rapport à un paramètre  $p$ ) sont généralement du même ordre de grandeur, quelle que soit la réaction étudiée, et peuvent ainsi être plus facilement présentées.

$$S_p^\sigma(E) = \left( \frac{\partial \sigma(E)}{\partial p} \right) \cdot \frac{p}{\sigma(E)} \quad (\text{C.1})$$

Sur la Figure C.2, on peut observer les sensibilités calculées pour les principales sections efficaces du sodium avec les codes CONRAD et SAMMY par rapport à quelques largeurs inélastiques à des énergies de résonance (et de spin) différentes (les informations sur les paramètres de résonance sont fournies en Annexe D).

Les courbes réalisées avec SAMMY sont en traits pointillés mais ne sont pas visibles car les valeurs sont très proches de celles obtenues avec CONRAD. De ce fait, les résidus (en valeur absolue) sont inférieurs en moyenne à  $10^{-5}\%$ , sauf à certaines énergies où l'on voit des pics.

L'annulation, par un changement de signe, des dérivées est à l'origine de ces augmentations dans les résidus, qui peuvent être également causées par la précision numérique pour les très faibles valeurs.

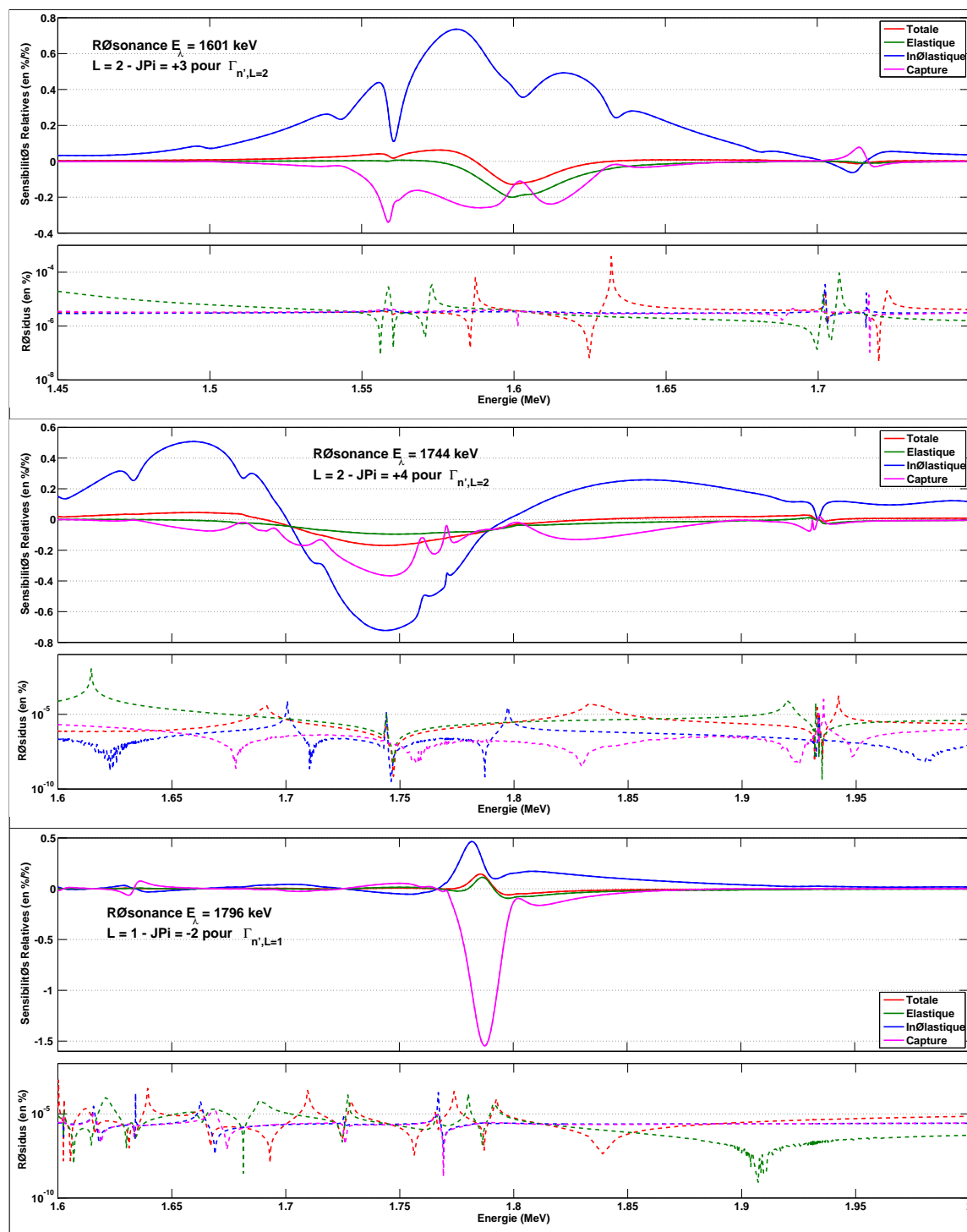


FIGURE C.2. Comparaison du calcul des sensibilités (ou dérivées) des sections efficaces totale, élastique, inélastique et de capture radiative à quelques largeurs neutroniques inélastiques entre CONRAD (traits pleins) et SAMMY (traits pointillés). Les résidus ( $= \left| \frac{\sigma_{Sammy} - \sigma_{Conrad}}{\sigma_{Sammy}} \right|$ ) sont donnés en valeur absolue

## C.2 Calcul des Distributions Angulaires avec Reich-Moore

Nous avons introduit la théorie de Blatt-Biedenharn (*cf.* page 68) pour le calcul des distributions angulaires dans l'approximation Reich-Moore.

La Figure C.3 présente une comparaison entre CONRAD et SAMMY du calcul de sections efficaces différentielles pour la réaction élastique, réalisé avec l'évaluation du sodium, à deux angles dans le laboratoire. Les résidus sont très faibles (inférieurs à  $10^{-5}\%$  en absolu) ce qui permet de valider le développement de cette théorie dans CONRAD, en particulier le calcul des coefficients de Clebsch-Gordan et de Racah.

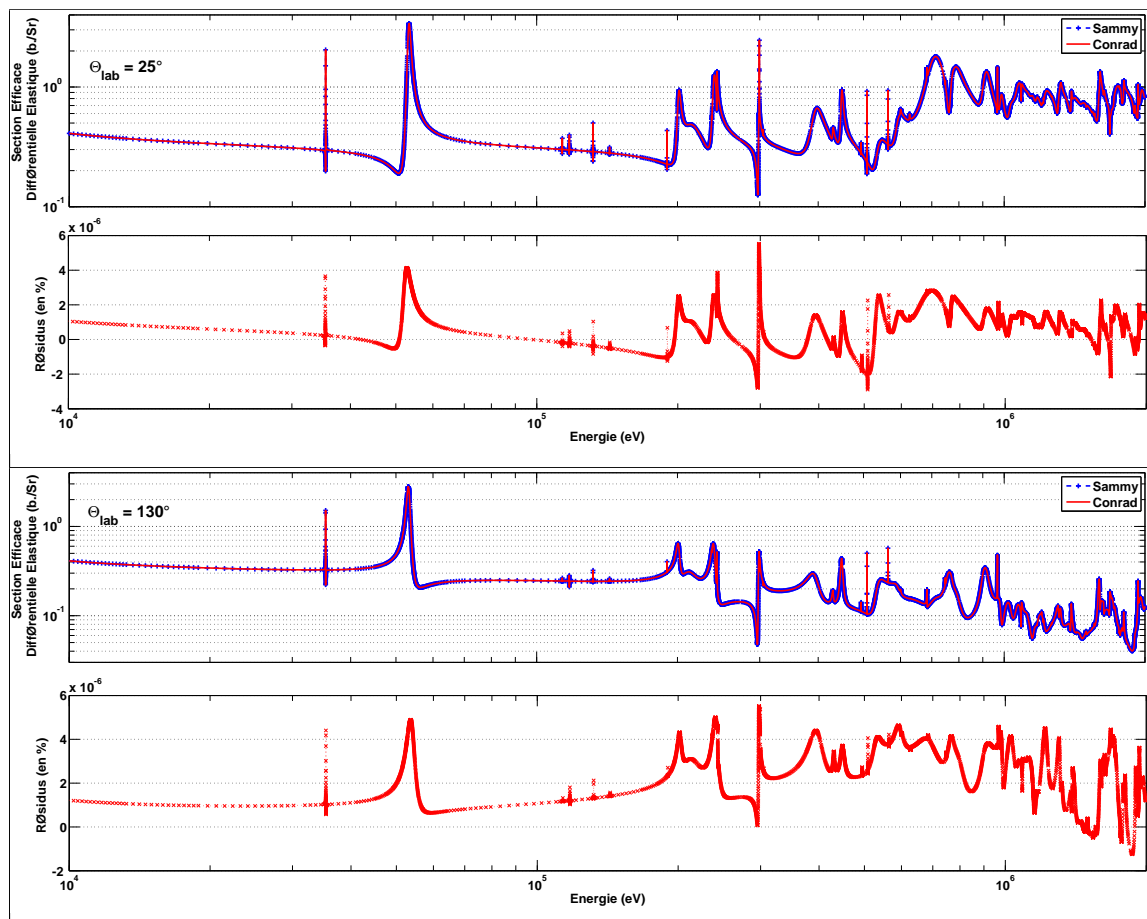


FIGURE C.3. Comparaison du calcul des sections efficaces différentielles élastiques entre les codes CONRAD et SAMMY. Dans la partie inférieure, on trouve les résidus entre les deux calculs, avec SAMMY qui est pris comme référence

### C.3 Interfaces avec les Codes ECIS et TALYS

Pour prendre en compte le domaine du continuum dans notre évaluation, il a été nécessaire de relier CONRAD aux codes ECIS (pour le calcul des sections totales, *shape elastic* et de réaction) et TALYS (pour le calcul des sections efficaces partielles).

Les programmes ECIS et TALYS sont utilisés en tant que *subroutine* (équivalent d'une méthode statique en C++) dans CONRAD. Pour se faire, CONRAD s'occupe d'appeler les routines quand cela lui est nécessaire et de créer les fichiers d'entrée indispensables pour ces deux codes. À noter que le fichier d'entrée pour ECIS contient notamment les parties réelle et imaginaire des différentes contributions (volumique, surfacique et spin-orbite) du potentiel pour le modèle optique.

Le pré-calcul de ce potentiel, suivant les options requises par l'utilisateur, peut être assez complexe (relation de dispersion, etc...) dans certains cas et n'est pas géré par ECIS lui-même. En fait, un programme FORTRAN, nommé *om\_retrieve*, développé par P.G. Young, R. Capote et P. Talou, est disponible sur le site<sup>1</sup> de RIPL-3 [50] et s'occupe de préparer le fichier d'entrée d'ECIS. Par conséquent, nous avons développé l'équivalent de *om\_retrieve* dans CONRAD pour calculer le potentiel du modèle optique et le fournir à ECIS par la suite à travers le fichier d'entrée.

Concernant la partie liée à ECIS, nous devons donc valider le calcul du potentiel dans CONRAD et l'interface entre ECIS et CONRAD. Pour cela, nous allons calculer, en externe, les sections totales pour quelques isotopes, en utilisant plusieurs options (modèles optiques sphériques ou couplés, avec ou sans les relations de dispersion) et les comparer avec celles obtenues avec CONRAD.

Pour valider l'interface avec TALYS (qui est plus souple au niveau du fichier d'entrée que pour ECIS), nous comparerons les sections obtenues avec TALYS seul (en version *stand-alone*) et les sections obtenues à l'aide de CONRAD.

#### C.3.1 <sup>27</sup>Al : Sphérique Non Dispersif

Pour tester le modèle optique avec un potentiel sphérique classique (sans les relations de dispersion entre les parties réelle et imaginaire du potentiel), nous avons décidé d'utiliser la paramétrisation de Koning-Delaroche [48] pour l'<sup>27</sup>Al qui correspond au N°1402 des potentiels dans la base de données RIPL-3 [50].

---

1. Site web pour RIPL-3 : <http://www-nds.iaea.org/RIPL-3>

La Figure C.4 montre le résultat des calculs réalisés avec CONRAD et ECIS ainsi que les résidus entre les deux calculs, qui sont insignifiants ici, preuve que les développements effectués sont bons dans ce cas.

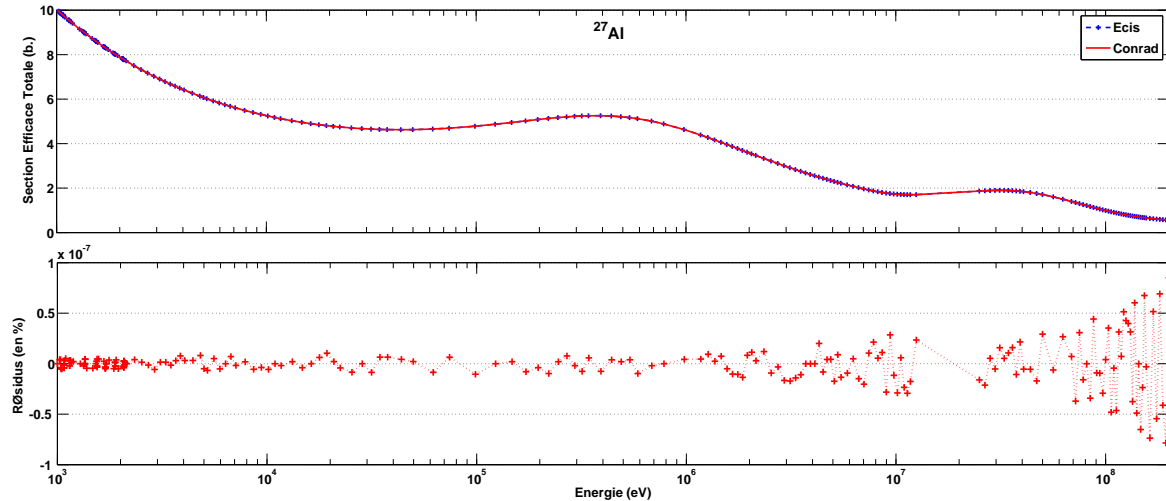


FIGURE C.4. Comparaison du calcul de la section efficace totale entre les codes CONRAD et ECIS pour l'isotope du  $^{27}\text{Al}$  avec le potentiel N°1402 dans RIPL-3 de Koning-Delaroche. On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les deux calculs, en prenant ECIS comme référence

### C.3.2 $^{56}\text{Fe}$ : Sphérique Dispersif

On emploie le N°1475 de la base RIPL-3 [50], qui correspond à la paramétrisation du potentiel de Morillon-Romain [49] pour l'isotope du  $^{56}\text{Fe}$  (c'est d'ailleurs une version analogue à cette paramétrisation que nous avons employée pour notre évaluation du sodium). Dans ce cas de figure, le potentiel du modèle optique est sphérique et prend en compte les relations de dispersion.

On peut observer sur la Figure C.5 les sections efficaces totales calculées respectivement avec CONRAD et ECIS, où les différences sont d'ordre purement numérique (précision des fichiers de sortie d'ECIS).

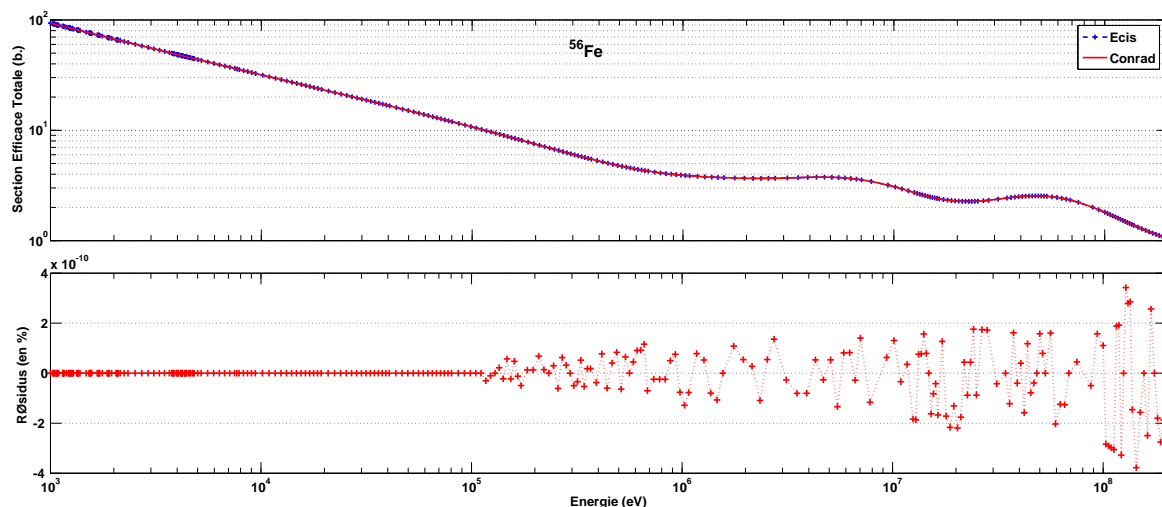


FIGURE C.5. *Comparaison du calcul de la section efficace totale entre les codes CONRAD et ECIS pour le  $^{56}\text{Fe}$  avec le potentiel N°1475 dans RIPL-3 de Morillon-Romain. On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les deux calculs, en prenant ECIS comme référence*

### C.3.3 $^{238}\text{U}$ : Rotationnel Non Dispersif

Nous avons traité le modèle optique avec un potentiel rotationnel pour l'isotope de  $^{238}\text{U}$ . On emploie pour cela la paramétrisation de E. Soukhovitskii [116] (N°2601 des potentiels dans RIPL-3 [50]) qui ne nécessite pas les relations de dispersion pour le potentiel mais requiert des paramètres de déformation donnés dans la base RIPL-3<sup>2</sup>.

On voit sur la Figure C.6 les résultats obtenus avec CONRAD et ECIS pour la section efficace totale. On observe également, à travers les résidus, que nos calculs sont équivalents, ce qui clôt nos tests de validation entre CONRAD et ECIS.

2. On trouve aussi des potentiels rotationnels dispersif pour  $^{238}\text{U}$ , notamment le N°2408 [117] de R. Capote mais cela donne des résultats très comparables au potentiel que nous utilisons ici.

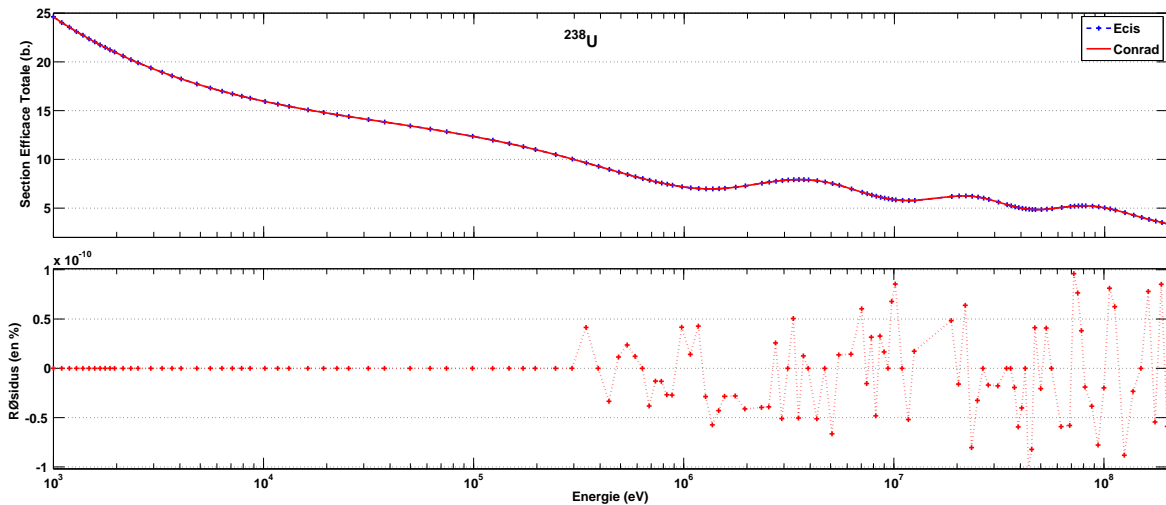


FIGURE C.6. *Comparaison du calcul de la section efficace totale entre les codes CONRAD et ECIS pour l'isotope de  $^{238}\text{U}$  avec le potentiel N°2601 dans RIPL-3 de Soukhovitskii. On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les deux calculs, en prenant ECIS comme référence*

### C.3.4 Calculs avec CONRAD et TALYS

Nous avons effectué une comparaison entre des calculs de sections efficaces effectués à travers CONRAD et des calculs réalisés avec TALYS seul (en *stand-alone*). Ces calculs sont basés sur notre évaluation du sodium (*cf.* Chapitre 5) entre 500 keV et 20 MeV. On souhaite vérifier dans cette partie si l'interface entre CONRAD et TALYS est correctement établie.

On observe sur la Figure C.7 les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$  calculées avec CONRAD et TALYS. On remarque que les résidus sont faibles, de l'ordre de  $10^{-3}\%$ , sauf pour la section élastique où les écarts sont un peu plus importants pour les basses énergies. Ces différences restent cependant insignifiantes et on peut estimer que l'interface entre les deux codes est valide.



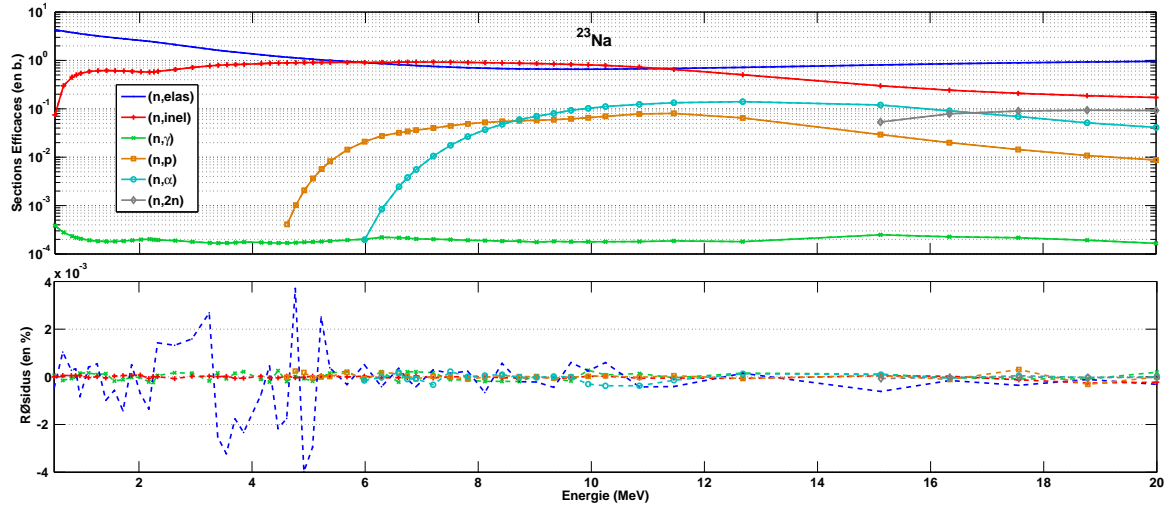


FIGURE C.7. Comparaison du calcul de plusieurs sections efficaces entre les codes CONRAD et TALYS, basé sur notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$ . On trouve dans la partie inférieure les résidus (en %) entre les calculs avec les deux codes, en prenant TALYS comme référence

## C.4 Modèle Optique Sphérique Basé sur SCAT2000

Le code ECIS, utilisé dans sa forme actuelle dans CONRAD (comme une routine), ne permet pas de procéder à des calculs employant le *multithreading* (la grille énergétique est divisée en sous-grilles, sur lesquelles sont effectués les calculs utilisant un cœur distinct parmi ceux disponibles sur l'ordinateur).

Pour avoir accès au *multithreading* dans CONRAD, il est nécessaire d'avoir les modèles codés sous forme d'objet (pour qu'ils puissent être clonés et attribués à un cœur ou *thread*) et de manière sous-jacente, ces modèles doivent pouvoir traiter la résolution numérique du modèle optique. Nous avons trouvé la solution à notre problème grâce au code SCAT2000 [47], développé par O. Bersillon, et à son manuel bien détaillé.

SCAT réalise des calculs par modèle optique mais uniquement pour des potentiels sphérique, au contraire d'ECIS qui reste encore aujourd'hui une référence puisqu'il résout tous les types de potentiel (sphérique, rotationnel, vibrationnel, etc. . .). Les calculs avec des modèles optiques couplés n'ont pas été utilisés pour notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$ , ce qui rend le code SCAT très attractif puisqu'il est moins complexe qu'ECIS pour la résolution avec un potentiel sphérique.

Nous avons donc développé notre propre modèle optique (et sa résolution) en se basant sur le code source de SCAT et son manuel. Une fois mis en place, nous devons valider ces

ajouts en réalisant des calculs avec CONRAD et SCAT. On doit également tester si la résolution fonctionne correctement si le potentiel prend en compte les relations de dispersion.

La Figure C.8 présente une comparaison des sections totales calculées sur l'isotope du  $^{56}\text{Fe}$  avec CONRAD et SCAT, en utilisant, dans le premier cas, le potentiel de Koning-Delaroche [48] (N°1416 des potentiels dans RIPL-3 [50]), et dans le second cas, le potentiel de Morillon-Romain [49] (N°1475) où les relations de dispersion sont intégrées dans le potentiel. Les sources de différences entre les deux codes sont plus nombreuses car les calculs dans CONRAD bénéficient de certaines avancées avec le C++, notamment pour l'algèbre, qui ne sont pas présentes avec le FORTRAN dans SCAT<sup>3</sup>. Malgré cela, on voit sur la Figure que les écarts sont assez faibles (souvent inférieurs à  $10^{-3}\%$ ) ce qui permet de valider ces derniers développements pour le modèle optique avec des potentiels sphériques.

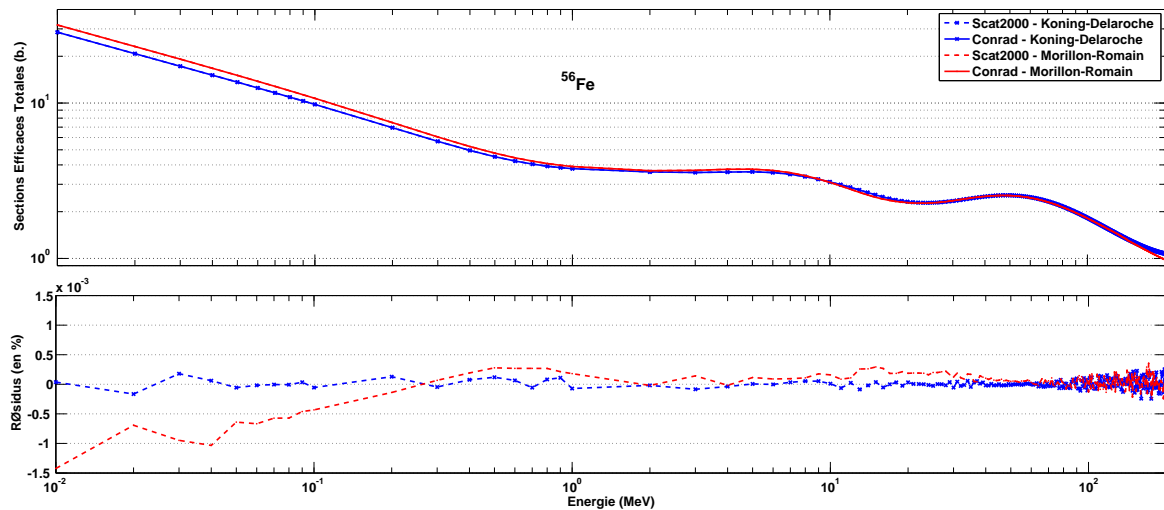


FIGURE C.8. *Comparaison du calcul des sections efficaces totales avec les codes CONRAD et SCAT, en utilisant les potentiels de Koning-Delaroche et de Morillon-Romain sur l'isotope du  $^{56}\text{Fe}$ . Dans la partie inférieure, les résidus (en %) entre les calculs sont présentés, SCAT étant le code de référence*

3. Dans SCAT, la résolution de l'équation de Schrödinger est faite en séparant les parties réelle et imaginaire tandis que dans CONRAD, on travaille directement avec des variables complexes (ce qui rend la résolution plus lisible par ailleurs).



# Résultats Complémentaires pour l'Évaluation

---

Cette Annexe est consacrée aux résultats dédiés à notre évaluation, que nous n'avons pas présentés dans les Chapitres 5 et 6 afin d'en alléger la lecture.

Tout d'abord, nous allons exposer les valeurs moyennes et les incertitudes des paramètres obtenus pendant l'évaluation avec les données microscopiques (Chapitre 5) ainsi que les matrices de covariances multigroupes sur les sections efficaces.

Ensuite, nous présenterons les matrices de covariances des sections efficaces multigroupes, obtenues hypothétiquement<sup>1</sup> grâce à l'exercice consistant à l'application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales (Chapitre 6).

## D.1 Paramètres de Résonance du Sodium

Les paramètres de résonance de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  sont exposés dans la Table D.1. Nous avons écrit les largeurs inélastiques sous la forme  $\Gamma_{n',x}$ , qui est une abréviation de  $\Gamma_{n',\ell=x}$  (largeur inélastique pour le moment orbital  $\ell$  égal à  $x$ ).

Les incertitudes relatives sur ces paramètres de résonances sont quant à elles disposées dans la Table D.1 (nous n'avons pas mis d'incertitude pour les énergies des résonances). Les corrélations entre les paramètres ne sont pas données, faute de place. Enfin, on rappelle que le rayon effectif (constant en énergie) vaut  $4.9 \pm 0.1$  fm.

---

1. On obtiendrait ces résultats si l'ajustement avec les données intégrales avait fonctionné. Nous renvoyons le lecteur à la page 166 du Chapitre 6 pour plus de détails.

$E_\lambda$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_\gamma$ (eV)	$\Gamma_n$ (keV)	$\Gamma_{n',0}$ (keV)	$\Gamma_{n',1}$ (keV)	$\Gamma_{n',2}$ (keV)	$\Gamma_{n',3}$ (keV)
-176.00	0	2+	2.908	39.75				
2.8465	0	1+	0.34	0.377				
7.617	2	3+	2.115	7.40E-6				
35.356	1	2-	0.82	1.24E-3				
53.237	1	2-	0.99	1.061				
113.427	2	3+	2.115	4.26E-4				
117.426	1	1-	18.79	5.36E-3				
131.964	2	3+	0.643	2.11E-3				
143.136	2	0+	16.77	5.98E-3				
190.038	2	3+	2.315	1.11E-3				
201.103	1	1-	4.00	3.908				
213.431	1	0-	4.90	23.209				
236.716	1	3-	23.625	1.89E-3				
239.258	1	2-	1.40	5.336				
242.791	1	0-	1.40	0.287				
243.049	0	1+	4.61	0.400				
298.377	0	2+	1.14	2.102				
299.415	1	3-	1.20	0.031				
305.210	1	2-	2.00	2.93E-4				
394.015	1	1-	12.00	27.288				
430.327	1	0-	11.00	3.708				
448.886	2	2+	4.20	6.076				
494.321	2	0+	1.70	0.052			0.027	
508.593	2	4+	0.59	0.011			1.0E-6	
534.831	0	1+	10.70	30.590			1.0E-6	
564.012	2	4+	2.115	0.010			1.0E-6	
594.548	1	1-	0.80	25.665		1.542		3.188
600.123	2	4+	7.00	0.239			2.293	
627.231	2	2+	2.115	0.320	0.205		1.605	
683.445	2	1+	2.115	0.969			0.289	
700.355	1	2-	4.141	86.638		0.018		7.883
709.893	2	3+	2.115	66.682	1.0E-6		4.341	
748.171	2	0+	2.115	0.310			1.0E-6	
766.453	2	3+	2.115	3.576	1.0E-6		14.860	
774.750	1	2-	4.141	35.577		0.329		0.038
788.979	2	1+	2.115	42.157			3.817	
907.267	2	1+	2.115	32.606			1.0E-6	

suite page suivante

*suite de la page précédente*

$E_\lambda$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_\gamma$ (eV)	$\Gamma_n$ (keV)	$\Gamma_{n',0}$ (keV)	$\Gamma_{n',1}$ (keV)	$\Gamma_{n',2}$ (keV)	$\Gamma_{n',3}$ (keV)
913.176	2	2+	2.115	35.628	3.042		1.0E-6	
967.215	2	4+	2.115	0.459			1.0E-6	
982.061	1	2-	4.141	12.253		5.197		1.846
1027.35	2	2+	2.115	5.588	26.753		1.0E-6	
1035.64	1	2-	4.141	37.470		15.127		0.418
1072.01	2	2+	2.115	29.546	4.978		4.518	
1089.18	2	2+	2.115	4.929	1.668		1.0E-6	
1118.51	2	0+	2.115	29.281			4.038	
1145.98	1	3-	4.141	7.683		7.522		16.548
1173.35	1	3-	4.141	2.634		18.681		0.134
1178.30	2	2+	2.115	20.885	17.400		22.639	
1202.38	2	0+	2.115	0.461			0.483	
1213.17	2	3+	2.115	0.032	0.066		0.104	
1225.39	1	3-	4.141	23.803		20.266		3.154
1262.81	2	3+	2.115	5.31E-3	0.091		1.0E-6	
1303.60	2	1+	2.115	6.88E-3			0.014	
1307.99	1	2-	4.141	18.894		2.531		0.276
1319.38	2	1+	2.115	12.010			1.596	
1322.09	2	2+	2.115	0.166	0.090		2.466	
1387.20	1	1-	4.141	5.575		5.674		11.247
1391.91	2	2+	2.115	5.269	0.310		0.749	
1405.42	1	2-	4.141	11.724		21.058		1.0E-6
1428.60	2	3+	2.115	0.012	0.097		0.525	
1469.21	1	3-	4.141	7.798		0.892		41.290
1499.85	1	2-	4.141	0.928		5.907		1.779
1543.40	2	2+	2.115	0.670	6.524		0.337	
1560.29	2	3+	2.115	0.549	0.520		2.783	
1595.91	2	2+	2.115	19.151	0.853		0.123	
1601.28	2	3+	2.115	27.710	12.756		0.420	
1602.63	1	2-	4.141	7.324		0.517		1.527
1633.44	1	2-	4.141	1.833		4.446		1.0E-6
1681.22	0	2+	2.115	5.061	0.387		0.783	
1695.06	1	0-	4.141	3.857				1.628
1716.14	2	3+	2.115	1.286	6.549		0.082	
1724.82	1	2-	4.141	66.875		3.203		0.838
1744.06	2	4+	2.115	33.100			102.05	
1760.43	1	3-	4.141	0.283		1.025		2.900
1770.77	1	3-	4.141	0.090		1.122		0.104

*suite page suivante*

*suite de la page précédente*

$E_\lambda$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_\gamma$ (eV)	$\Gamma_n$ (keV)	$\Gamma_{n',0}$ (keV)	$\Gamma_{n',1}$ (keV)	$\Gamma_{n',2}$ (keV)	$\Gamma_{n',3}$ (keV)
1795.53	1	2-	4.141	23.618		12.847		4.336
1801.92	2	2+	2.115	6.450	0.105		0.277	
1900.77	1	1-	4.141	10.646		0.144		0.183
1919.57	0	2+	2.115	50.709	0.440		28.670	
1921.52	1	3-	4.141	2.126		11.184		3.273
1931.23	2	1+	2.115	0.168			1.0E-6	
1933.72	2	4+	2.115	3.878			1.0E-6	
1962.51	2	2+	2.115	26.460	8.811		2.909	
1972.30	2	1+	2.115	27.578			27.960	
2004.00	2	0+	2.115	48.259			5.984	
2020.00	2	2+	2.115	37.458	0.755		18.985	

TABLE D.1. Paramètres de résonance du  $^{23}\text{Na}$  obtenus suite à l'ajustement sur les mesures microscopiques.  $E_\lambda$  correspond à l'énergie de la résonance,  $\Gamma_\gamma$  à la largeur radiative,  $\Gamma_n$  à la largeur neutronique et  $\Gamma_{n',x}$  aux largeurs inélastiques pour  $\ell = x$

$E_\lambda$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_\gamma$	$\Gamma_n$	$\Gamma_{n',0}$	$\Gamma_{n',1}$	$\Gamma_{n',2}$	$\Gamma_{n'3}$
-176.00	0	2+	20.	10.4				
2.8465	0	1+	7.8	1.7				
7.617	2	3+	40.	4.1				
35.356	1	2-	40.	3.1				
53.237	1	2-	40.	2.0				
113.427	2	3+	40.	4.0				
117.426	1	1-	40.	4.9				
131.964	2	3+	40.	4.0				
143.136	2	0+	40.	4.0				
190.038	2	3+	40.	4.0				
201.103	1	1-	100.	1.3				
213.431	1	0-	100.	13.4				
236.716	1	3-	100.	4.5				
239.258	1	2-	100.	2.9				
242.791	1	0-	100.	5.1				
243.049	0	1+	100.	3.6				
298.377	0	2+	100.	4.8				
299.415	1	3-	100.	14.6				
305.210	1	2-	100.	4.2				
394.015	1	1-	100.	7.8				
430.327	1	0-	100.	5.6				
448.886	2	2+	100.	4.9				
494.321	2	0+	100.	4.0			4.0	
508.593	2	4+	100.	3.8				
534.831	0	1+	100.	4.2				
564.012	2	4+	100.	4.5				
594.548	1	1-	100.	16.9		6.0		9.8
600.123	2	4+	100.	17.8			11.7	
627.231	2	2+	100.	7.9	3.9		6.7	
683.445	2	1+	100.	2.8			3.9	
700.355	1	2-	100.	4.9		4.6		14.4
709.893	2	3+	100.	4.8			17.8	
748.171	2	0+	100.	4.8				
766.453	2	3+	100.	14.9			3.9	
774.750	1	2-	100.	5.3		12.9		11.7
788.979	2	1+	100.	30.0			28.0	
907.267	2	1+	100.	34.3				

*suite page suivante*



*suite de la page précédente*

$E_\lambda$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_\gamma$	$\Gamma_n$	$\Gamma_{n',0}$	$\Gamma_{n',1}$	$\Gamma_{n',2}$	$\Gamma_{n',3}$
913.176	2	2+	100.	4.7	11.4			
967.215	2	4+	100.	6.9				
982.061	1	2-	100.	4.3		12.6		18.8
1027.35	2	2+	100.	11.8	4.8			
1035.64	1	2-	100.	5.1		17.1		15.6
1072.01	2	2+	100.	9.7	7.8		11.0	
1089.18	2	2+	100.	7.8	8.8			
1118.51	2	0+	100.	42.3			13.9	
1145.98	1	3-	100.	9.0		13.4		6.2
1173.35	1	3-	100.	15.3		4.2		4.5
1178.30	2	2+	100.	13.6	18.8		15.6	
1202.38	2	0+	100.	3.9			4.0	
1213.17	2	3+	100.	7.0	4.0		4.0	
1225.39	1	3-	100.	9.4		12.9		5.8
1262.81	2	3+	100.	4.0	4.0			
1303.60	2	1+	100.	4.0			4.0	
1307.99	1	2-	100.	8.0		7.1		3.6
1319.38	2	1+	100.	17.9			6.4	
1322.09	2	2+	100.	5.1	4.2		4.4	
1387.20	1	1-	100.	13.0		6.8		4.1
1391.91	2	2+	100.	10.9	6.9		13.9	
1405.42	1	2-	100.	4.6		4.4		
1428.60	2	3+	100.	4.1	4.0		4.0	
1469.21	1	3-	100.	13.1		4.6		7.6
1499.85	1	2-	100.	9.4		5.1		4.2
1543.40	2	2+	100.	4.6	4.1		4.0	
1560.29	2	3+	100.	6.0	4.0		6.2	
1595.91	2	2+	100.	11.8	10.9		4.3	
1601.28	2	3+	100.	8.8	20.8		4.4	
1602.63	1	2-	100.	12.1		9.0		10.0
1633.44	1	2-	100.	5.1		4.4		
1681.22	0	2+	100.	10.8	6.8		7.9	
1695.06	1	0-	100.	6.0				6.1
1716.14	2	3+	100.	10.5	5.3		4.1	
1724.82	1	2-	100.	6.3		15.9		8.6
1744.06	2	4+	100.	13.8			3.8	
1760.43	1	3-	100.	6.3		4.0		4.4
1770.77	1	3-	100.	4.2		3.9		4.0

*suite page suivante*

*suite de la page précédente*

$E_\lambda$ (keV)	$\ell$	$J^\pi$	$\Gamma_\gamma$	$\Gamma_n$	$\Gamma_{n',0}$	$\Gamma_{n',1}$	$\Gamma_{n',2}$	$\Gamma_{n',3}$
1795.53	1	2-	100.	8.0		7.6		10.9
1801.92	2	2+	100.	13.1	4.2		5.3	
1900.77	1	1-	100.	15.5		4.9		4.1
1919.57	0	2+	100.	10.8	4.2		19.6	
1921.52	1	3-	100.	32.5		7.4		4.5
1931.23	2	1+	100.	4.0				
1933.72	2	4+	100.	8.4				
1962.51	2	2+	100.	9.3	15.3		5.4	
1972.30	2	1+	100.	18.6			19.6	
2004.00	2	0+	100.	10.9			7.9	
2020.00	2	2+	100.	13.0	5.4		10.7	

TABLE D.2. *Incertitudes relatives (en %) sur les paramètres de résonance du  $^{23}\text{Na}$  obtenus suite à l'ajustement sur les mesures microscopiques*

## D.2 Paramètres du Modèle Optique pour le Sodium

On présente dans la Table D.3 les paramètres du modèle optique, obtenus après l'assimilation des mesures de la section efficace totale de Larson [11] (l'incertitude relative sur les paramètres est donnée entre parenthèses). On y trouve également les paramètres originaux du  $^{24}\text{Mg}$  [49] (N°1469 des potentiels disponibles dans la base de données RIPL-3 [50]) utilisés *a priori*.

Contribution		Noms des paramètres	$^{24}\text{Mg}$	$^{23}\text{Na}$	
Volumique	Réelle	$v_{HF}$ (MeV)	-82.800	-81.813	(8.0%)
		$\beta$ (fm)	1.114	1.154	(5.5%)
		$\gamma$ (fm)	1.165E-1	1.159E-1	(5.1%)
	Imagi.	$w_{v1}$ (MeV)	11.210	11.103	(11.6%)
		$w_{v2}$ (MeV)	62.000	62.638	(14.8%)
Surfacique	Imagi.	$w_{s1}$ (MeV)	17.000	16.500	(17.2%)
		$w_{s2}$ (MeV)	13.000	13.366	(16.4%)
		$w_{s3}$ (MeV $^{-1}$ )	2.500E-2	2.528E-2	(13.9%)
Spin-Orbite	Réelle	$v_{so1}$ (MeV)	6.000	6.031	(17.2%)
		$v_{so2}$ (MeV $^{-1}$ )	4.000E-3	4.000E-3	-
	Imagi.	$w_{so1}$ (MeV)	-3.000	-3.000	-
		$w_{so2}$ (MeV)	160.00	160.00	-
Géométrique	R + I.	$r$ (fm)	1.299	1.290	(6.0%)
		$a$ (fm)	0.566	0.558	(10.6%)

TABLE D.3. Paramètres du modèle optique du  $^{24}\text{Mg}$  et de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  (les incertitudes relatives sont données entre parenthèses)

## D.3 Covariances de l'Évaluation avec les Données Microscopiques

Les incertitudes et les matrices de corrélations qui n'ont pas pu être présentées lors du Chapitre 5 sont proposées ici. Notamment, nous donnons les valeurs utilisées avec les codes déterministes ERANOS-PARIS pour les calculs d'incertitudes sur les RNR-Na (réalisés dans la Chapitre 6, page 170).

## D.3.1 Covariances sur les Sections Efficaces Partielles

Dans les Tables D.4 et D.5, on peut trouver respectivement les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$  et les incertitudes relatives (en %) associées, obtenues à la suite de notre travail d'évaluation à partir des mesures microscopiques. Les valeurs sont proposées dans un format multigroupe à 33 groupes d'énergie.

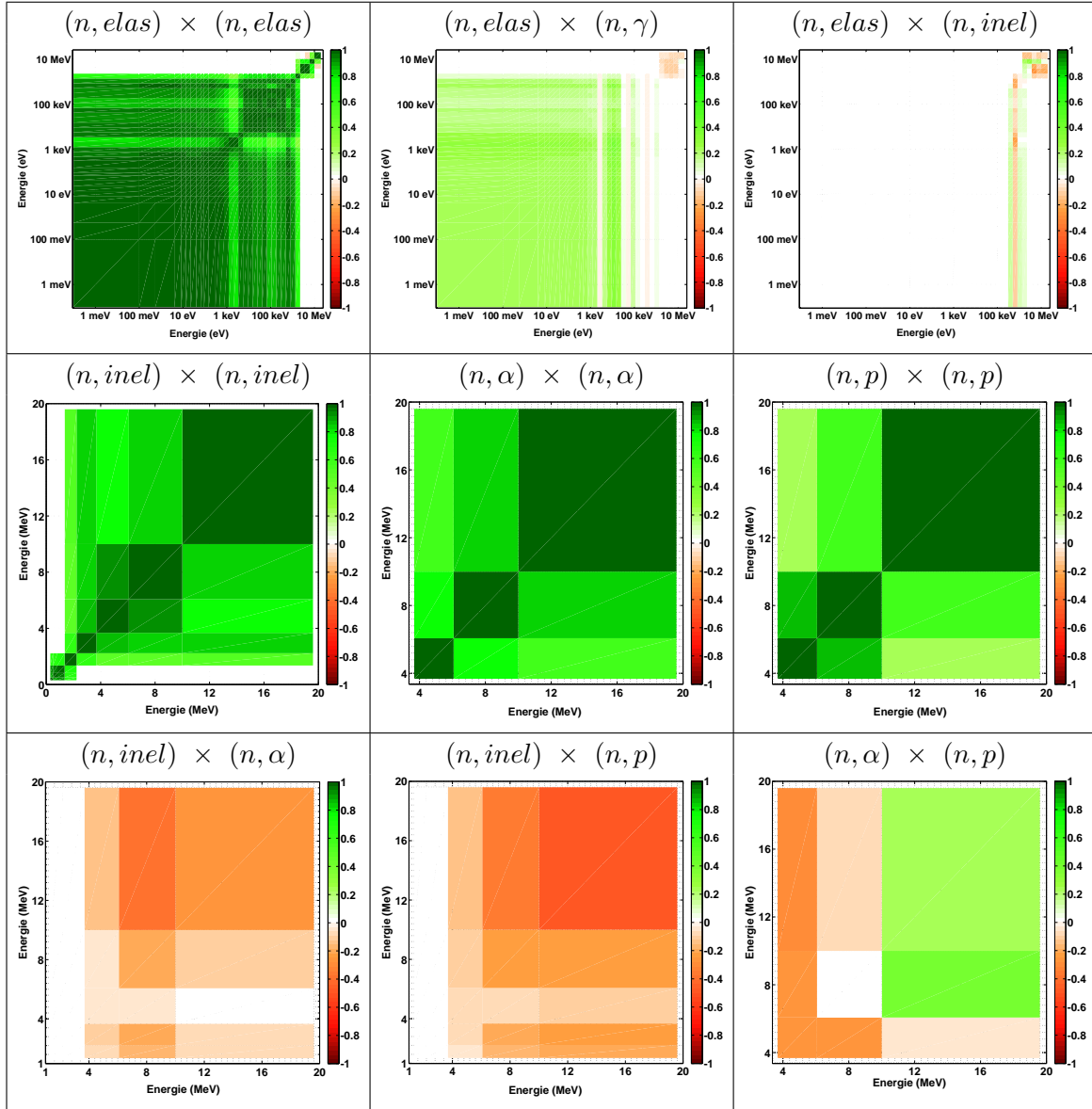


FIGURE D.1. Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir des mesures microscopiques, pour les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$

Les matrices de corrélations (et matrices de corrélations croisées ou *cross-correlations*) des principales sections efficaces de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  sont présentées sur la Figure D.1.

N° Groupe	En. Sup. (MeV)	Sections Efficaces (barns)						
		( <i>n, tot</i> )	( <i>n, elas</i> )	( <i>n, inel</i> )	( <i>n, <math>\gamma</math></i> )	( <i>n, p</i> )	( <i>n, <math>\alpha</math></i> )	( <i>n, 2n</i> )
1	1.960E+01	1.73	0.80	0.390	2.2e-4	4.0e-2	0.106	4.6e-2
2	1.000E+01	1.70	0.72	0.888	1.9e-4	4.8e-2	4.1e-2	-
3	6.070E+00	2.03	1.13	0.887	1.8e-4	5.6e-3	2.7e-5	-
4	3.680E+00	2.62	1.91	0.711	1.8e-4	-	-	-
5	2.230E+00	2.80	2.37	0.431	1.2e-4	-	-	-
6	1.350E+00	3.73	3.31	0.417	1.4e-4	-	-	-
7	8.210E-01	5.16	4.93	0.235	3.3e-4	-	-	-
8	4.980E-01	3.51	3.51	2.2e-4	4.9e-4	-	-	-
9	3.020E-01	4.13	4.13	-	1.4e-3	-	-	-
10	1.830E-01	3.28	3.28	-	1.5e-3	-	-	-
11	1.110E-01	3.51	3.51	-	2.9e-5	-	-	-
12	6.740E-02	5.77	5.77	-	1.9e-3	-	-	-
13	4.090E-02	3.99	3.99	-	2.5e-3	-	-	-
14	2.480E-02	4.29	4.29	-	5.1e-5	-	-	-
15	1.500E-02	4.86	4.86	-	1.2e-4	-	-	-
16	9.120E-03	6.42	6.42	-	1.6e-3	-	-	-
17	5.530E-03	18.50	18.49	-	7.2e-3	-	-	-
18	3.350E-03	137.01	136.88	-	0.124	-	-	-
19	2.030E-03	7.56	7.55	-	0.012	-	-	-
20	1.230E-03	3.84	3.84	-	6.1e-3	-	-	-
21	7.490E-04	3.29	3.28	-	5.4e-3	-	-	-
22	4.540E-04	3.13	3.13	-	5.7e-3	-	-	-
23	3.040E-04	3.06	3.06	-	6.7e-3	-	-	-
24	1.490E-04	3.03	3.02	-	8.4e-3	-	-	-
25	9.170E-05	3.02	3.01	-	9.9e-3	-	-	-
26	6.790E-05	3.01	3.00	-	0.012	-	-	-
27	4.020E-05	3.01	2.99	-	0.016	-	-	-
28	2.260E-05	3.01	2.99	-	0.020	-	-	-
29	1.370E-05	3.02	2.99	-	0.026	-	-	-
30	8.320E-06	3.02	2.99	-	0.035	-	-	-
31	4.000E-06	3.05	2.99	-	0.062	-	-	-
32	5.400E-07	3.15	2.99	-	0.160	-	-	-
33	1.000E-07	3.50	2.99	-	0.512	-	-	-

TABLE D.4. Sections efficaces multigroupes (33 groupes d'énergie) pour les réactions principales de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  à partir des mesures microscopiques

N° Groupe	En. Sup. (MeV)	Incertitudes sur les Sections Efficaces						
		( <i>n, tot</i> )	( <i>n, elas</i> )	( <i>n, inel</i> )	( <i>n, γ</i> )	( <i>n, p</i> )	( <i>n, α</i> )	( <i>n, 2n</i> )
1	1.960E+01	5.30	10.19	14.56	33.59	28.99	25.32	34.74
2	1.000E+01	5.49	5.42	9.12	56.35	36.52	31.14	-
3	6.070E+00	6.67	10.87	9.94	61.16	80.55	43.50	-
4	3.680E+00	8.78	11.12	11.27	59.87	-	-	-
5	2.230E+00	4.50	5.04	6.51	34.89	-	-	-
6	1.350E+00	5.42	6.03	6.17	55.16	-	-	-
7	8.210E-01	3.60	3.83	6.70	71.27	-	-	-
8	4.980E-01	4.24	4.24	5.72	57.93	-	-	-
9	3.020E-01	3.87	3.87	-	32.29	-	-	-
10	1.830E-01	4.24	4.24	-	8.06	-	-	-
11	1.110E-01	4.51	4.49	-	25.78	-	-	-
12	6.740E-02	3.35	3.35	-	39.61	-	-	-
13	4.090E-02	4.39	4.37	-	23.68	-	-	-
14	2.480E-02	4.43	4.45	-	16.73	-	-	-
15	1.500E-02	4.30	4.31	-	10.57	-	-	-
16	9.120E-03	3.91	3.94	-	3.94	-	-	-
17	5.530E-03	3.08	3.06	-	7.92	-	-	-
18	3.350E-03	1.39	1.40	-	7.79	-	-	-
19	2.030E-03	4.57	4.57	-	7.96	-	-	-
20	1.230E-03	5.08	5.07	-	7.90	-	-	-
21	7.490E-04	5.29	5.29	-	7.87	-	-	-
22	4.540E-04	5.36	5.36	-	7.85	-	-	-
23	3.040E-04	5.37	5.37	-	7.84	-	-	-
24	1.490E-04	5.41	5.43	-	7.83	-	-	-
25	9.170E-05	5.42	5.40	-	7.83	-	-	-
26	6.790E-05	5.42	5.45	-	7.83	-	-	-
27	4.020E-05	5.40	5.45	-	7.83	-	-	-
28	2.260E-05	5.40	5.45	-	7.83	-	-	-
29	1.370E-05	5.41	5.44	-	7.83	-	-	-
30	8.320E-06	5.39	5.42	-	7.83	-	-	-
31	4.000E-06	5.35	5.43	-	7.83	-	-	-
32	5.400E-07	5.25	5.42	-	7.83	-	-	-
33	1.000E-07	5.03	5.46	-	7.83	-	-	-

TABLE D.5. *Incertitudes relatives (en %) pour les principales sections efficaces de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  à partir des mesures microscopiques*

### D.3.2 Covariances pour les Calculs d'Incertitudes en Déterministe

Pour les calculs d'incertitudes avec les codes déterministes (seuls ces codes sont capables, pour le moment, de produire rapidement et facilement des données de sensibilités), il est nécessaire de regrouper les sections partielles en "macro" sections partielles. Dans les codes ERANOS et PARIS, on distingue quatre types de section : CAPTURE, ELASTIC, INELASTIC et N,xN, qui regroupent les sections partielles selon :

- ELASTIC =  $(n, elas)$  ;
- INELASTIC =  $(n, inel) + (n, np) + (n, n\alpha) + \dots$  (somme de toutes les sections qui émettent un seul neutron et d'autres particules comme des photons  $\gamma$ , des protons, etc...);
- N,xN =  $\sum_{x=2}^{+\infty} (n, xn)$  (somme de toutes les sections qui émettent au moins deux neutrons);
- CAPTURE =  $(n, \gamma) + (n, p) + (n, \alpha) + \dots$  (somme de toutes les sections qui n'émettent pas de neutron).

Les incertitudes relatives (en %) pour les sections efficaces, utilisées dans les codes déterministes, sont fournies dans la Table D.6.

Sur la Figure D.2, on peut voir les matrices de corrélations des sections efficaces de CAPTURE, ELASTIC et INELASTIC, produites à partir de notre évaluation en utilisant les mesures microscopiques. La section efficace N,xN étant très faible (elle existe est différente de zéro pour le groupe N°1), nous avons donc négligé cette réaction sur la Figure.

N° Groupe	En. Sup. (MeV)	Incertitudes sur les Sections Efficaces			
		CAPTURE	ELASTIC	INELASTIC	N,XN
1	1.960E+01	21.39	10.22	8.53	34.75
2	1.000E+01	24.19	5.44	9.08	-
3	6.070E+00	77.22	10.81	9.98	-
4	3.680E+00	59.87	11.15	11.20	-
5	2.230E+00	34.89	5.02	6.51	-
6	1.350E+00	55.16	5.98	6.13	-
7	8.210E-01	71.27	3.81	6.71	-
8	4.980E-01	57.93	4.24	5.73	-
9	3.020E-01	32.29	3.85	-	-
10	1.830E-01	8.06	4.24	-	-
11	1.110E-01	25.78	4.49	-	-
12	6.740E-02	39.61	3.36	-	-
13	4.090E-02	23.68	4.38	-	-
14	2.480E-02	16.73	4.44	-	-
15	1.500E-02	10.57	4.31	-	-
16	9.120E-03	3.94	3.92	-	-
17	5.530E-03	7.92	3.08	-	-
18	3.350E-03	7.79	1.40	-	-
19	2.030E-03	7.95	4.56	-	-
20	1.230E-03	7.90	5.10	-	-
21	7.490E-04	7.87	5.27	-	-
22	4.540E-04	7.85	5.36	-	-
23	3.040E-04	7.84	5.37	-	-
24	1.490E-04	7.84	5.39	-	-
25	9.170E-05	7.83	5.41	-	-
26	6.790E-05	7.83	5.41	-	-
27	4.020E-05	7.83	5.44	-	-
28	2.260E-05	7.83	5.45	-	-
29	1.370E-05	7.83	5.43	-	-
30	8.320E-06	7.83	5.44	-	-
31	4.000E-06	7.83	5.42	-	-
32	5.400E-07	7.83	5.44	-	-
33	1.000E-07	7.83	5.43	-	-

TABLE D.6. *Incertitudes relatives (en %) pour les sections efficaces de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$ , obtenues à partir des mesures microscopiques et mises dans le format employé par les codes déterministes*



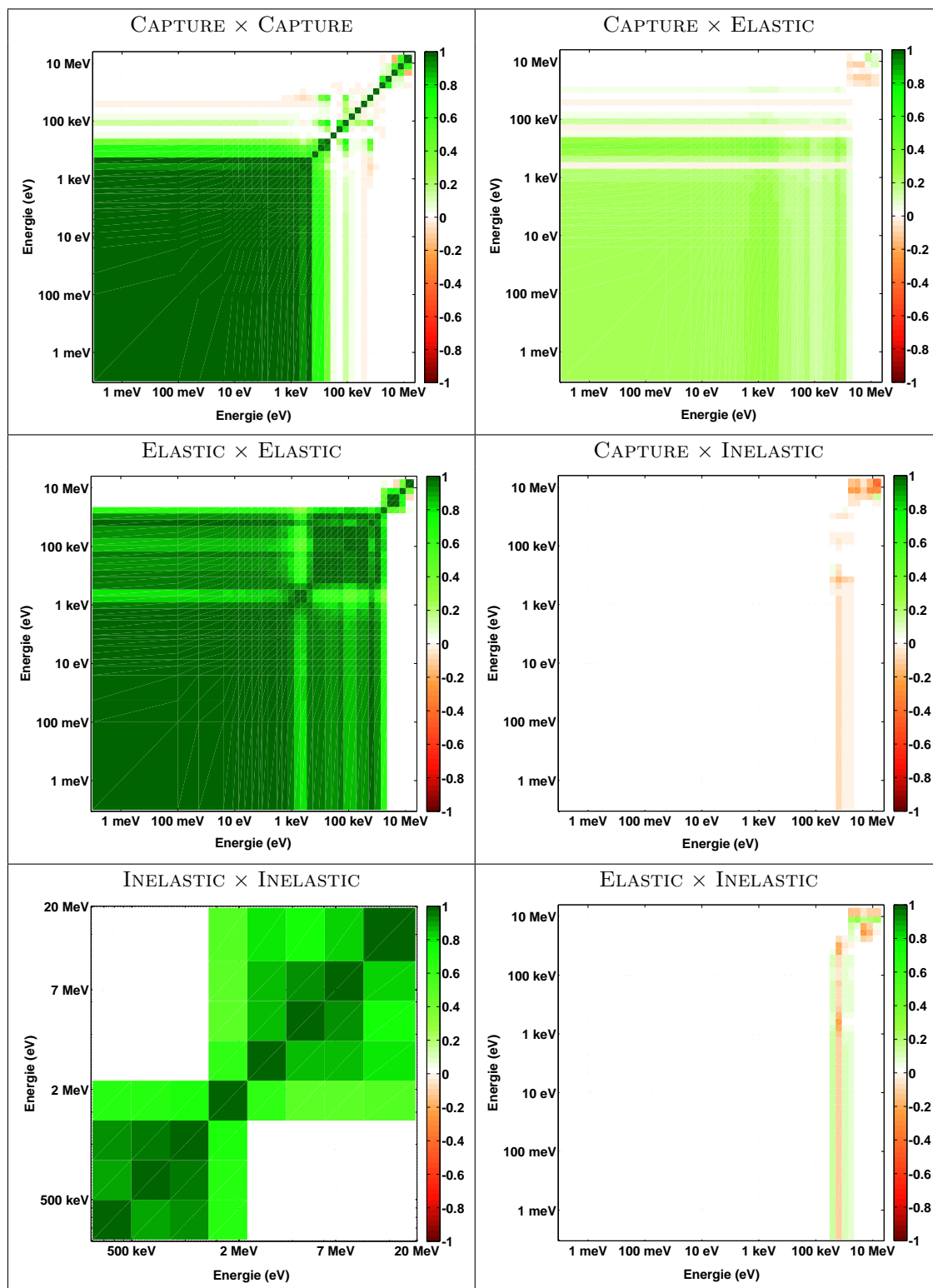


FIGURE D.2. Matrices de corrélations (à 33 groupes en énergie), obtenues à partir des mesures microscopiques, pour les “macro” sections efficaces

## D.4 Covariances de l'Évaluation avec les Données Microscopiques et Intégrales

On présente ici les incertitudes et les matrices de corrélations obtenues dans le Chapitre 6 après l'application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales (données de covariances que nous aurions obtenues si l'ajustement avec les données intégrales avait fonctionné). De manière analogue à la section précédente, nous montrerons les covariances pour les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ , puis nous exposerons ces données au format utilisé par les codes déterministes notamment dans les calculs d'incertitudes.

### D.4.1 Covariances sur les Sections Efficaces Partielles

La Table D.7 détaille les incertitudes relatives (en %) sur les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ , obtenues après la méthode Rétroactive par la technique de l'IDA (Assimilation de Données Intégrales) avec les vidanges du sodium.

On présente sur la Figure D.3 les matrices de corrélations (et *cross-correlations*) des principales sections efficaces de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$ .

N° Groupe	En. Sup. (MeV)	Incertitudes sur les Sections Efficaces						
		(n, tot)	(n, elas)	(n, inel)	(n, $\gamma$ )	(n, p)	(n, $\alpha$ )	(n, 2n)
1	1.960E+01	4.96	9.78	12.91	33.54	28.92	25.26	34.36
2	1.000E+01	3.97	4.79	7.40	56.18	36.30	30.88	-
3	6.070E+00	4.65	9.59	7.93	60.90	79.02	43.37	-
4	3.680E+00	7.27	10.15	8.37	59.66	-	-	-
5	2.230E+00	4.00	4.63	4.35	34.77	-	-	-
6	1.350E+00	4.30	4.85	5.46	54.73	-	-	-
7	8.210E-01	2.97	3.17	5.89	71.55	-	-	-
8	4.980E-01	3.36	3.36	5.13	57.83	-	-	-
9	3.020E-01	3.07	3.06	-	32.17	-	-	-
10	1.830E-01	3.36	3.36	-	8.06	-	-	-
11	1.110E-01	3.58	3.56	-	25.66	-	-	-
12	6.740E-02	2.66	2.67	-	39.44	-	-	-
13	4.090E-02	3.47	3.45	-	23.54	-	-	-
14	2.480E-02	3.50	3.52	-	16.59	-	-	-
15	1.500E-02	3.41	3.42	-	10.42	-	-	-
16	9.120E-03	3.12	3.15	-	3.90	-	-	-
17	5.530E-03	2.59	2.58	-	7.80	-	-	-
18	3.350E-03	1.28	1.29	-	7.67	-	-	-
19	2.030E-03	4.19	4.19	-	7.84	-	-	-
20	1.230E-03	4.41	4.39	-	7.78	-	-	-
21	7.490E-04	4.46	4.46	-	7.74	-	-	-
22	4.540E-04	4.46	4.46	-	7.72	-	-	-
23	3.040E-04	4.44	4.44	-	7.71	-	-	-
24	1.490E-04	4.45	4.47	-	7.71	-	-	-
25	9.170E-05	4.46	4.44	-	7.71	-	-	-
26	6.790E-05	4.45	4.48	-	7.70	-	-	-
27	4.020E-05	4.43	4.47	-	7.70	-	-	-
28	2.260E-05	4.43	4.47	-	7.70	-	-	-
29	1.370E-05	4.44	4.46	-	7.70	-	-	-
30	8.320E-06	4.42	4.45	-	7.70	-	-	-
31	4.000E-06	4.39	4.46	-	7.70	-	-	-
32	5.400E-07	4.32	4.45	-	7.70	-	-	-
33	1.000E-07	4.17	4.48	-	7.70	-	-	-

TABLE D.7. Incertitudes relatives (en %) pour les principales sections efficaces de notre évaluation du  $^{23}\text{Na}$  après utilisation de la méthode Rétroactive avec les données intégrales

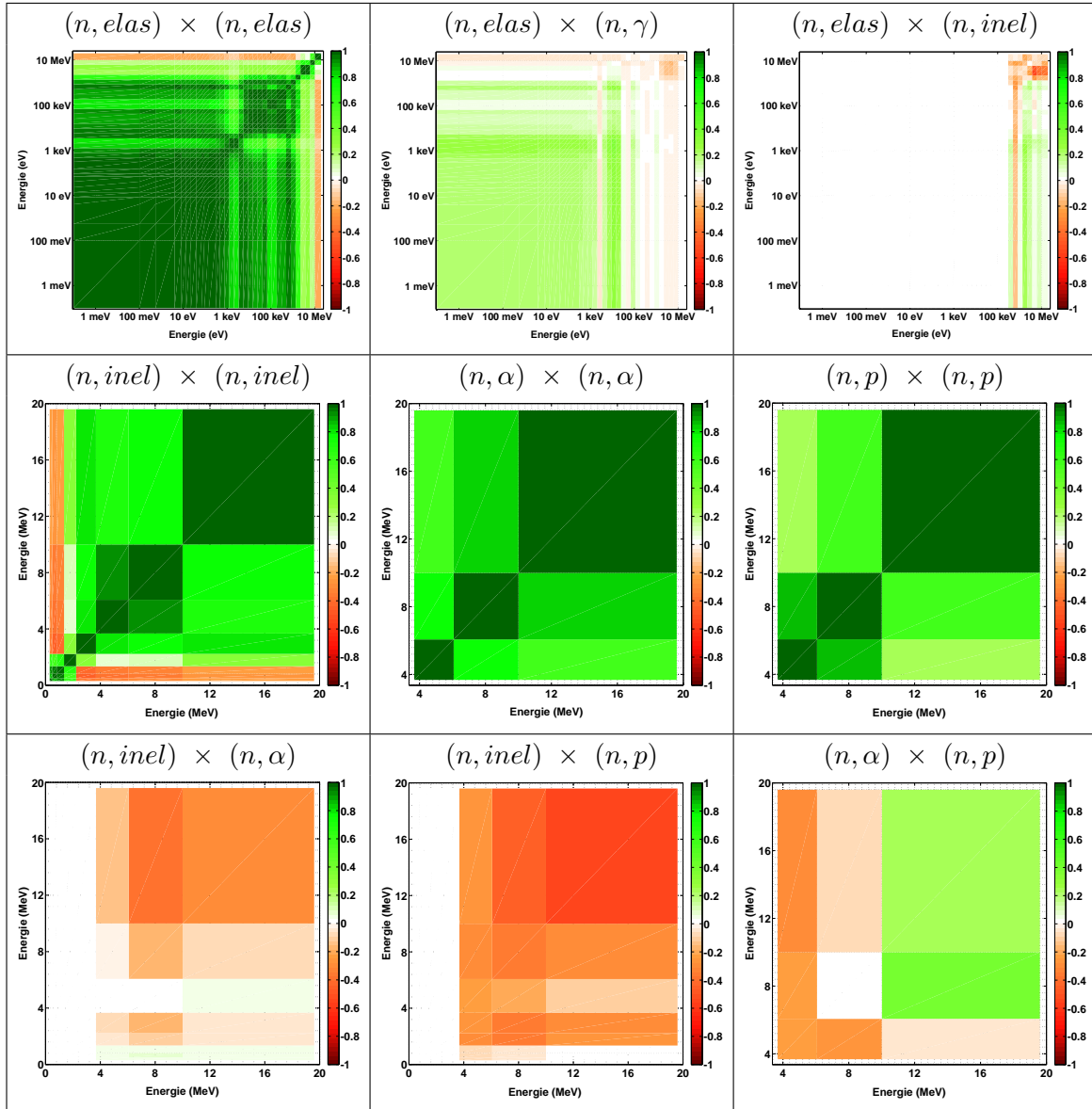


FIGURE D.3. Matrices de corrélations multigroupes (à 33 groupes en énergie) pour les principales sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ , après application de la méthode Rétroactive par IDA

### D.4.2 Covariances pour les Calculs d'Incertitudes en Déterministe

On présente dans la Table [D.8](#) les incertitudes relatives (en %) pour les sections efficaces dans le format utilisé par les codes déterministes.

Les matrices de corrélations des sections efficaces de CAPTURE, ELASTIC et INELASTIC, produites suite à l'utilisation de la méthode Rétroactive par IDA, sont exposées sur la Figure [D.4](#).

N° Groupe	En. Sup. (MeV)	Incertitudes sur les Sections Efficaces			
		CAPTURE	ELASTIC	INELASTIC	N,xN
1	1.960E+01	21.31	9.81	6.87	34.37
2	1.000E+01	24.16	4.81	7.37	-
3	6.070E+00	75.73	9.54	7.96	-
4	3.680E+00	59.66	10.17	8.32	-
5	2.230E+00	34.77	4.61	4.35	-
6	1.350E+00	54.73	4.81	5.42	-
7	8.210E-01	71.55	3.16	5.90	-
8	4.980E-01	57.83	3.36	5.14	-
9	3.020E-01	32.17	3.05	-	-
10	1.830E-01	8.06	3.37	-	-
11	1.110E-01	25.66	3.56	-	-
12	6.740E-02	39.44	2.67	-	-
13	4.090E-02	23.54	3.47	-	-
14	2.480E-02	16.59	3.52	-	-
15	1.500E-02	10.42	3.42	-	-
16	9.120E-03	3.90	3.13	-	-
17	5.530E-03	7.80	2.59	-	-
18	3.350E-03	7.67	1.29	-	-
19	2.030E-03	7.84	4.18	-	-
20	1.230E-03	7.78	4.42	-	-
21	7.490E-04	7.74	4.44	-	-
22	4.540E-04	7.73	4.46	-	-
23	3.040E-04	7.71	4.44	-	-
24	1.490E-04	7.71	4.44	-	-
25	9.170E-05	7.71	4.45	-	-
26	6.790E-05	7.70	4.45	-	-
27	4.020E-05	7.70	4.46	-	-
28	2.260E-05	7.70	4.47	-	-
29	1.370E-05	7.70	4.46	-	-
30	8.320E-06	7.70	4.46	-	-
31	4.000E-06	7.70	4.45	-	-
32	5.400E-07	7.70	4.47	-	-
33	1.000E-07	7.70	4.46	-	-

TABLE D.8. *Incertitudes relatives (en %) pour les sections efficaces du  $^{23}\text{Na}$ , après application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales. Les incertitudes sont fournies dans le format employé par les codes déterministes*

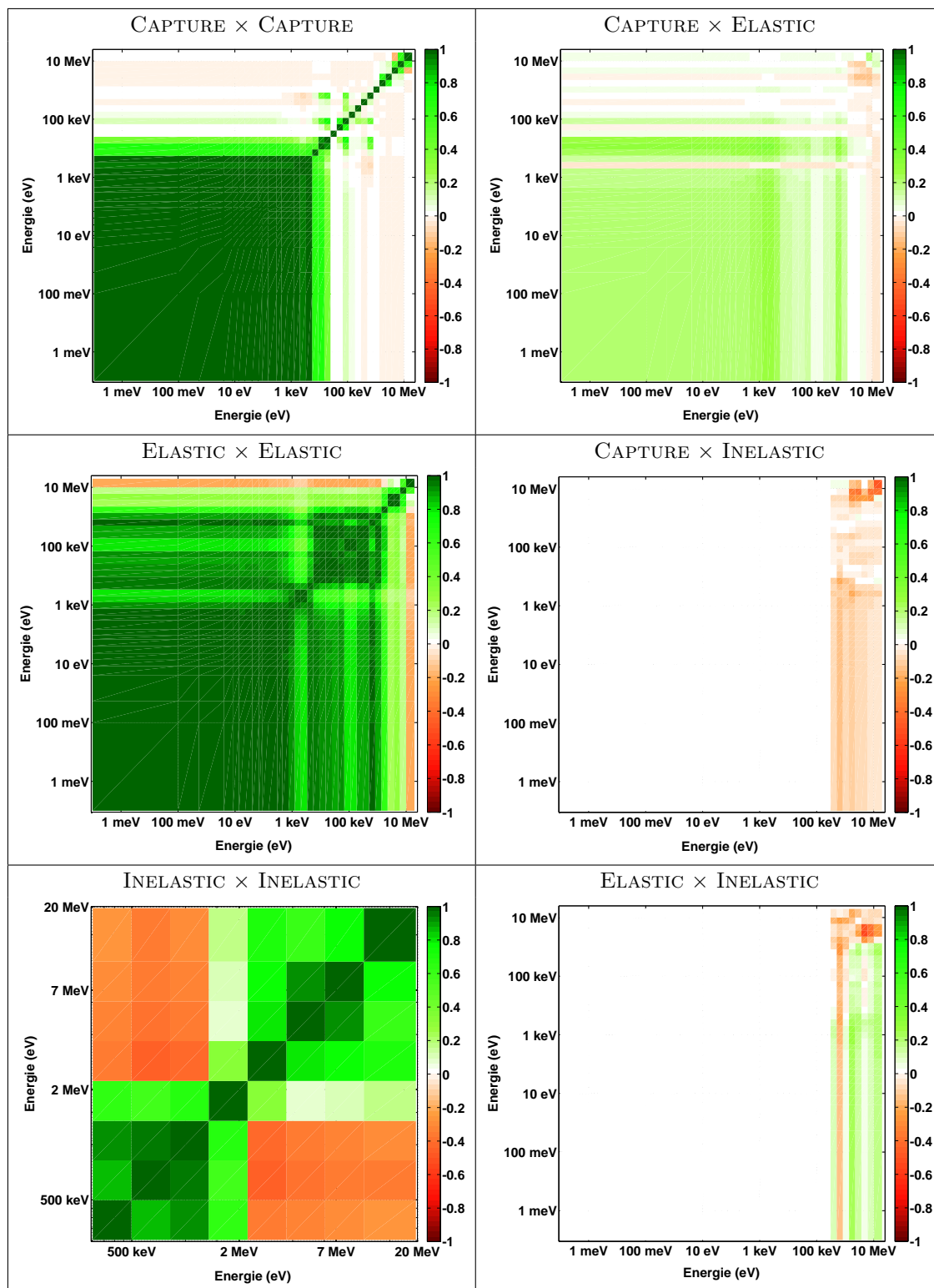


FIGURE D.4. Matrices de corrélations pour les sections efficaces utilisées en déterministe, après application de la méthode Rétroactive avec les données intégrales

# Bibliographie

- [1] GENERATION-IV INTERNATIONAL FORUM. A technology roadmap for Generation-IV nuclear energy systems. In *Gen-IV International Forum/US DoE*, Washington DC, 2002.
- [2] M. SALVATORES *et al.* *Uncertainty and Target Accuracy Assessment for Innovative Systems Using Recent Covariance Data Evaluations*. Rapport, OECD/NEA WPEC Subgroup 26 Final Report, Paris, 2008.
- [3] A. SANTAMARINA *et al.* *The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library : Validation Results from JEF-2.2 to JEFF-3.1.1*. Rapport, OECD/NEA JEFF Report 22, 2009.
- [4] M.B. CHADWICK *et al.* ENDF/B-VII.0 : Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology. *Nuclear Data Sheets*, **107**, p. 2931–3060, 2006.
- [5] K. SHIBATA *et al.* JENDL-4.0 : A New Library for Nuclear Science and Engineering. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **48**, p. 1–30, 2011.
- [6] M. HERMAN et A. TRKOV. *ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/BVII*. Rapport, Brookhaven National Laboratory report BNL-90365-2009, 2009.
- [7] K. SHIBATA. Evaluation of Neutron Nuclear Data for Sodium-23. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **39**, p. 1065–1071, 2002.
- [8] E. FORT, G. RIMPAULT, J.-C. BOSQ, B. CAMOUS, V. ZAMMIT, E. DUPONT, R. JACQMIN, P. SMITH, D. BIRON et D. VERRIER. Improved performances of the fast reactor calculational system ERANOS-ERALIB1 due to improved a priori nuclear data and consideration of additional specific integral data. *Annals of Nuclear Energy*, **30**, p. 1879–1898, 2003.
- [9] S.F. MUGHABGHAB. *Atlas of Neutron Resonances*. Elsevier Science, 5th Edition, 2006.
- [10] M.C. MOXON, D.S. BOND et J.B BRISLAND. The measurement of the total cross-section of sodium and carbon. In *Proceedings of the International Conference on the Physics of Reactors - PHYSOR'90*, Volume 1, p. 32, Marseille, France, 1990.



- [11] D.C. LARSON, J.A. HARVEY et N.W. HILL. *Measurement of the neutron total cross section of sodium from 32 keV to 37 MeV*. Rapport, ORNL-TM-5614, 1976. Oak Ridge National Laboratory.
- [12] S. CIERJACKS, P. FORTI, D. KOPSCH, K. KROPP, J. NEBE et H. UNSELD. *High resolution total neutron cross sections for Na, Cl, K, V, Mn and Co between 0.5 and 30 MeV*. Rapport, KFK Report No. 1000, (Suppl. 2), 1969.
- [13] S. KOPECKY, R. SHELLEY, H. MAERTEN, J. WARTENA et H. WEIGMANN. High resolution inelastic scattering cross sections of  $^{23}\text{Na}$  and  $^{27}\text{Al}$ . In *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology - NDST-97*, Volume 1, p. 523, Trieste, Italy, May 19-24 1997.
- [14] F.G. PEREY, W.E. KINNEY et R.L. MACKLIN. High resolution inelastic cross section measurements for Na, Si, and Fe. In *Conference on Neutron Cross-Sections and Technology*, Volume 1, p. 191, Knoxville, USA, 1971.
- [15] W.E. KINNEY et J.W. MCCONNELL. High resolution neutron scattering experiments at ORELA. In *Proceedings of the International Conference on Interaction of Neutron with Nuclei*, Volume 2, p. 1319, Lowell, 1976.
- [16] D. ROCHMAN et A.J. KONING. *TENDL-2010 : Reaching completeness and accuracy*. Jeff meeting, JEFFDOC-1349, OECD/NEA, Paris, France, December 2010.
- [17] J.-F. LEBRAT, J. TOMMASI, P. ARCHIER et J.-M. RUGGIERI. JEFF-3.1.1 Nuclear Data Validation for Sodium Fast Reactors. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **48**(4), p. 620–627, April 2011.
- [18] G. RIMPAULT. *Étude de l'effet en réactivité de vidange de sodium dans les expériences critiques à neutrons rapides. Transposition aux réacteurs de puissance*. Thèse de doctorat, Université de Provence - Aix Marseille I, Décembre 1979.
- [19] A. AVERY. *JANUS Phase 8 Benchmark Experiment - Data for Inclusion in the SINBAD Database*. Rapport, NEA/OECD 1517/42 SINBAD REACTOR, Winfrith, 1998.
- [20] IRPHE. *International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments*. Rapport, NEA/OECD NEA/NSC/DOC(2006)1, 2009.
- [21] J.-M. RUGGIERI *et al.* ERANOS-2.1 : the International Code System for GEN-IV Fast Reactor Analysis. In *Proceedings of the 2006 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants - ICAPP'06*, Reno, Nevada, June 4-8 2006.
- [22] G. RIMPAULT. *ERANOS : Manuel des méthodes - Le code de cellule ECCO*. Rapport, RT SPRC/LEPh 97-001, October 1997.

- [23] R. LE TELLIER, D. FOURNIER et C. SUTEAU. Reactivity Perturbation Formulation for a Discontinuous Galerkin-Based Transport Solver and Its Use with Adaptive Mesh Refinement. *Nuclear Science and Engineering*, **167**, p. 209–220, 2011.
- [24] L. GASTALDO, R. LE TELLIER, C. SUTEAU, D. FOURNIER et J.-M. RUGGIERI. High-Order Discrete Ordinate Transport in Non-Conforming 2D Cartesian Meshes. IN AMERICAN NUCLEAR SOCIETY, editor, *Proceedings of the International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009)*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12 2009.
- [25] D. FOURNIER, P. ARCHIER, R. LE TELLIER et C. SUTEAU. Improvement of Neutronic Calculations on a MASURCA Core using Adaptive Mesh Refinement Capabilities. In *Proceedings of the International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2011)*, 2011.
- [26] J.P. BOTH, M. DERRIENNIC, B. MORILLON et J.C. NIMAL. A survey of TRIPOLI-4. In *Proceedings of 8th Conference on Radiation Shielding*, Volume I, p. 373, Arlington, USA, 1994.
- [27] G. ALIBERTI, G. PALMIOTTI, M. SALVATORES, J.F. LEBRAT, J. TOMMASI et R. JACQMIN. Methodologies for Treatment of Spectral Effects at Core-Reflector Interfaces in Fast Neutron Systems. In *Proceedings of PHYSOR 2004 - Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Global Developments*, Chicago, Illinois, April 25-29 2004.
- [28] P. JACQUET. *Nouvelles méthodes de modélisation neutronique des réacteurs rapides de quatrième Génération*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, Mai 2011.
- [29] WORKING PARTY ON INTERNATIONAL NUCLEAR DATA EVALUATION CO-OPERATION SUBGROUP 33. Methods and issues for the combined use of integral experiments and covariance data. [Website URL](#).
- [30] G. PALMIOTTI *et al.* *Assessment of Existing Nuclear Data Adjustment Methodologies*. Rapport, OECD/NEA WPEC Subgroup 33 intermediate Report, 2010.
- [31] M. SALVATORES. *La théorie des perturbations et les analyses de sensibilité*. Rapport, CEA NT DRNR/SPCI/LEPh 87-208, 1987.
- [32] J. TOMMASI. *ERANOS manuel des méthodes - Applications de la théorie des perturbations avec des solveurs de flux de diffusion et transport  $S_n$  en différences finies*. Rapport, CEA SPRC/LEPh 07-003, 2007.
- [33] X-5 MONTE CARLO TEAM. *MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code (Version 5)*. Rapport, LA-UR-03-1987, Los-Alamos, USA, 2003.

- [34] A.M. LANE et R.G. THOMAS. R-Matrix Theory of Nuclear Reactions. *Review of Modern Physics*, **30**(2), p. 257, April 1958.
- [35] A. FODERARO. *The Elements of Neutron Interaction Theory*. MIT Press, 1971.
- [36] N. BOHR. Neutron capture and nuclear constitution. *Nature*, **134**, p. 344, 1936.
- [37] M. HERMAN, R. CAPOTE, B.V. CARLSON, P. OBLOŽINSKÝ, M. SIN, A. TRKOV, H. WIENKE et V. ZERKIN. EMPIRE : Nuclear Reaction Model Code System for Data Evaluation. *Nuclear Data Sheets*, **108**, p. 2655–2715, 2007.
- [38] J.M. BLATT et L.C. BIEDENHARN. The Angular Distribution of Scattering and Reaction Cross Sections. *Review of Modern Physics*, **24**(4), p. 258, October 1952.
- [39] U. FANO et G. RACAH. *Irreducible Tensor Sets*. Academic Press, New York, 1959.
- [40] F.H. FRÖHNER. *Evaluation and Analysis of Nuclear Resonance Data*. Rapport, OECD/NEA JEFF Report 18, 2000.
- [41] E.P. WIGNER et L. EISENBUD. Higher Angular Momenta and Long Range Interaction in Resonance Reactions. *Physical Review*, **72**(1), p. 29–41, 1947.
- [42] E.P. WIGNER. Resonance Reactions. *Physical Review*, **70**, p. 606, 1946.
- [43] G. BREIT et E. WIGNER. Capture of Slow Neutrons. *Physical Review*, **49**, p. 519–531, 1936.
- [44] C.W. REICH et M.S. MOORE. Multilevel Formula for the Fission Process. *Physical Review*, **111**(3), p. 929–933, 1958.
- [45] T. TAMURA. Analyses of the Scattering of Nuclear Particles by Collective Nuclei in Terms of the Coupled-Channel Calculation. *Reviews of Modern Physics*, **37**(4), p. 679–708, 1965.
- [46] G.R. SATCHLER. *Direct Nuclear Reactions*. Oxford University Press, New York, 1993.
- [47] O. BERSILLON. SCAT2000 - Un Programme de modèle optique sphérique. Non publié, 2002.
- [48] A.J. KONING et J.P. DELAROCHE. Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV. *Nuclear Physics A*, **713**, p. 231–310, 2003.
- [49] B. MORILLON et P. ROMAIN. Dispersive and global spherical optical model with a local energy approximation for the scattering of neutrons by nuclei from 1 keV to 200 MeV. *Physical Review C*, **70**, p. 014601, 2004.

- [50] R. CAPOTE *et al.* RIPL - Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. *Nuclear Data Sheets*, **110**, p. 3107–3214, 2009.
- [51] D. ROCHMAN et A.J. KONING. *TENDL-2009 $\beta$  : Chasing JEFF-3.2*. Rapport, NEA/OECD JEFFDOC-1310, 2009.
- [52] N. OLSSON, E. RAMSTRÖM et B. TROSTELL. Neutron elastic and inelastic scattering from Mg, Si, S, Ca, Cr, Fe and Ni at  $E_n = 21.6$  MeV. *Nuclear Physics A*, **513**(2), p. 205–238, 1990.
- [53] W. HAUSER et H. FESHACH. The inelastic scattering of neutrons. *Physical Review*, **87**, p. 366–373, 1952.
- [54] P. MOLDAUER. Evaluation of the fluctuation enhancement factor. *Physical Review C*, **14**, p. 764–766, 1976.
- [55] P. MOLDAUER. Statistics and the average cross section. *Nuclear Physics A*, **344**(2), p. 185–195, 1980.
- [56] INTERNATIONAL NETWORK OF NUCLEAR STRUCTURE AND DECAY DATA EVALUATORS. ENSDF : Evaluated Nuclear Structure Data File. [Website URL](#).
- [57] H. BETHE. Nuclear Physics B. Nuclear Dynamics, Theoretical. *Review of Modern Physics*, **9**, p. 69–244, 1937.
- [58] A. GILBERT et A. CAMERON. A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Canadian Journal of Physics*, **43**, p. 146–1496, 1965.
- [59] A. IGNATYUK. Phenomenological description of the energy dependence of the level density parameter. *Sov. J. Nucl. Phys.*, **21**, p. 255, 1975.
- [60] D. BRINK. Individual particle and collective aspects of the nuclear photoeffect. *Nuclear Physics*, **4**, p. 215–220, 1957.
- [61] P. AXEL. Electric Dipole Ground-State Transition Width Strength Function and 7 Mev Photon Interactions. *Physical Review*, **126**(2), p. 671–683, 1962.
- [62] J. KOPECKY et M. UHL. Test of gamma-ray strength functions in nuclear reaction model calculations. *Physical Review C*, **41**(5), p. 1941–1955, 1990.
- [63] J. KOPECKY, M. UHL et R.E. CHRIEN. Radiative strength in the compound nucleus  $^{157}\text{Gd}$ . *Physical Review C*, **47**(1), p. 312–322, 1993.
- [64] N.M. LARSON. *Updated Users : Guide for SAMMY : Multilevel R-Matrix Fits to Neutron Data Using Bayes Equations*. Rapport, ORNL/TM-9179/R8,, 2008.

- [65] M. MOXON, T. WARE et C. DEAN. *REFIT-2009 A Least-Square Fitting Program for Resonance Analysis of Neutron Transmission, Capture, Fission and Scattering Data, Users' Guide for REFIT-2009-10*. Rapport, UKNSF, 2010.
- [66] A.J. KONING, S. HILAIRE et M.C. DUIJVESTIJN. TALYS-1.0. In *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology - ND2007*, Nice, France, May 22-27 2007.
- [67] P.G. YOUNG, E.D. ARTHUR et M.B. CHADWICK. Comprehensive nuclear model calculations : theory and use of the GNASH code. IN M.K. MEHTA et J.J. SCHMID, editors, *Workshop on Computation and Analysis of Nuclear Data Relevant to Nuclear Energy and Safety*, Trieste, Italy, February 10 - March 13 1992.
- [68] C. DE SAINT JEAN, B. HABERT, O. LITAIZE, G. NOGUÈRE et C. SUTEAU. Status of CONRAD, a nuclear reaction analysis tool. IN EDP SCIENCES, editor, *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology - ND2007*, Nice, France, April 22-27 2007.
- [69] J. RAYNAL. *Notes on ECIS94*. Rapport, CEA Saclay Report No. CEA-N-2772, 1994.
- [70] C. BASTIAN *et al.* AGS, A Computer Code for Uncertainty Propagation in Time-Of-Flight Cross Section Data. In *Proceedings of PHYSOR 2006 - Advances in Nuclear Analysis and Simulation*, Vancouver, Canada, September 10-14 2006.
- [71] E. FORT et J.P. DOAT. *ESTIMA, A Code to Calculate Average Parameters from Sets of Resolved Resonance Parameters*. Rapport, NEANDC-162-U, 1983.
- [72] B. HABERT. *Estimation des Incertitudes dans l'Évaluation des Sections Efficaces de Réactions Nucléaires*. Thèse de doctorat, Institut Polytechnique de Grenoble, 2009.
- [73] T. BAYES. An Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances. *Philos. Trans. R. Soc. London*, **53**, p. 370, 1763. reprinted in *Biometrika*, 45, 293 (1958).
- [74] C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE, B. HABERT et B. IOOSS. A Monte Carlo Approach to Nuclear Model Parameter Uncertainties Propagation. *Nuclear Science and Engineering*, **161**, p. 363–370, 2009.
- [75] B. HABERT, C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE, L.C. LEAL et Y. RUGAMA. Retroactive Generation of Covariance Matrix of Nuclear Model Parameters Using Marginalization Techniques. *Nuclear Science and Engineering*, **166**, p. 276–287, 2010.
- [76] C. DE SAINT JEAN, B. HABERT, D. BERNARD, G. NOGUÈRE, O. BOULAND, O. LITAIZE, O. SEROT, C. SUTEAU et J.-M. RUGGIERI. Improved resonance shape analysis

- methodology in CONRAD using integral data constraints : case of  $^{239}\text{Pu}$ . In *5th Workshop on Neutron Measurements, Evaluations and Applications - NEMEA-5*, Ljubljana, Slovenia, October 27-29 2008.
- [77] R.E. MACFARLANE et D.M. MUIR. *NJOY-99.0 : Code System for Producing Point-wise and Multigroup Neutron and Photon Cross Section from ENDF/B data*. Rapport, LANL Report, PSR-480, 2000.
- [78] R. SANCHEZ *et al.* APOLLO II : A user-oriented, portable, modular code for multi-group transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, **100**, p. 352–362, 1988.
- [79] G. PALMIOTTI, M. SALVATORES, H. HIRUTA, M. HERMAN, P. OBLOZINSKY et M.T. PIGNI. Use of Covariance Matrices in a Consistent (Multiscale) Data Assimilation for Improvement of Basic Nuclear Parameters in Nuclear Reactor Applications : From Meters to Femtometers. In *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology - ND2010*, Jeju Island, Korea, April 26-30 2010.
- [80] P. ARCHIER, C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE, J. TOMMASI, P. BLAISE et B. HABERT. Neutron Cross Section Evaluation with Integral Data Assimilation Techniques. Soumis à Nuclear Science and Engineering, 2011.
- [81] P. ARCHIER, C. DE SAINT JEAN, G. NOGUÈRE et J. TOMMASI.  $^{23}\text{Na}$  Evaluation with Conrad for Fast Reactor Applications. In *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology - ND2010*, Jeju Island, Korea, April 26-30 2010.
- [82] G. NOGUÈRE, P. ARCHIER, A. GRUEL, P. LECONTE et D. BERNARD. Interpretation of pile-oscillation measurements by the integral data assimilation technique. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, **629**(1), p. 288–295, February 2010.
- [83] D. BERNARD et P. LECONTE. Integral Experiments in MINERVE Reactor Facility for Nuclear Data Validation. In *Proceedings of the IAEA Technical Meeting in collaboration with NEA on Specific Applications of Research Reactors : Provision of Nuclear Data*, Vienna, Austria, October 12-16 2009.
- [84] A. GRUEL, P. LECONTE, D. BERNARD, P. ARCHIER et G. NOGUÈRE. Interpretation of Fission Product Oscillations in the MINERVE Reactor, from Thermal to Epithermal Spectra. En révision dans Nuclear Science and Engineering, 2011.
- [85] J.E. LYNN, F.W.K. FIRK et M.C. MOXON. The 2.85 keV neutron resonance of sodium. *Nuclear Physics*, **5**, p. 603–614, January-March 1958.

- [86] F. RAHN, H.S. CAMARDA, G. HACKEN, W.W. HAVENS JR., H.I. LIOU, J. RAINWATER, U.N. SINGH, M. SLAGOWITZ et S. WYNCHANK. Neutron Resonance Spectroscopy. XIII. Na to 320 keV. *Physical Review C*, **8**(5), p. 1827–1832, November 1973.
- [87] A. LANGSFORD, P.H. BOWEN, G.C. COX, F.W.K. FIRK, D.B. MCCONNELLB et M. SALTMARSH. High resolution neutron time of flight measurements on Na and C from 0.2 to 140 MeV. In *The Proceedings of the Nuclear Structure Conference*, p. 579, Antwerpen, Belgium, 1965.
- [88] J.C. CLEMENT, R. FAIRCHILD, C.G. GOULDING, P. STOLER et P.F. YERGIN. *Total MeV cross sections of Na and C from 0.5 to 40 MeV*. Rapport 24, Rensselaer Polytechnic Institute Report RPI-328-200, 1970.
- [89] H. MAERTEN, J. WARTENA et H. WEIGMANN. Simultaneous high-resolution measurement of differential elastic and inelastic neutron cross sections on selected light nuclei. Private communication to EXFOR, 1994.
- [90] A.W. SOLBRIG. Doppler Effect in Neutron Absorption Resonances. *American Journal of Physics*, **29**(4), p. 257, April 1961.
- [91] R. BABUT. *Modélisation des réactions ( $\alpha, n$ ) sur les noyaux légers pour déterminer la source inhérente d'un réacteur nucléaire*. Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal, Juin 2002.
- [92] C.F. WILLIAMSON. Absolute Cross Sections of the Reactions  $\text{Na}^{23}(n, p)\text{Ne}^{23}$  and  $\text{Na}^{23}(n, \alpha)\text{F}^{20}$ . *Physical Review*, **122**(6), p. 1877–1882, 1961.
- [93] R. BASS, P. HAUG, K. KRUGER et B. STAGINNUS. Fast neutron excitation functions by activation techniques. *EANDC(E)*, **66**, p. 64, 1966.
- [94] H. WEIGMANN, G.F. AUCHAMPAUGH, P.W. LISOWSKI, M.S. MOORE et G.L. MORGAN. Neutron Induced Charged Particle Reactions on  $^{23}\text{Na}$ . In *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, p. 814, Antwerp, Belgium, 1982.
- [95] L. HANLIN, Z. WENRONG et Y. WEIXIANG. Activation cross section measurement and evaluation for  $\text{Na}^{23}(n, 2n)\text{Na}^{22}$  reaction. *Chinese Journal of Nuclear Physics*, **14**, p. 83, 1992.
- [96] Y. UWAMINO, H. SUGITA, Y. KONDO et T. NAKAMURA. Measurement of neutron activation cross sections of energy up to 40 MeV using semimonoenergetic  $p$ -Be neutrons. *Nuclear Science and Engineering*, **111**, p. 391, 1992.

- [97] K. XIANGZHONG, W. YONGCHANG, Y. JINGKANG et 14 (1995) 5 Y. JUNQIAN. Recent progress on 14 MeV neutron activation cross section measurements. In *INDC(CPR)-036/L*, p. 5, 1995.
- [98] A.A. FILATENKOV *et al.* Systematic Measurement of Activation Cross Sections At Neutron Energies from 13.4 to 14.9 MeV. In *Khlopin Radiev. Inst., Leningrad Reports*, 252, 1999.
- [99] F.G. PEREY et W.E. KINNEY. *Neutron Elastic and Inelastic Scattering Cross Sections for Na in the Energy Range of 5.4 to 8.5 MeV*. Rapport, ORNL-TM-4518, 1970.
- [100] D.R. DONATI, S.C. MATHUR, E. SHELDON, B.K. BARNES, L.E. BEGHIAN, P. HARIHAR, G.H.R. KEGEL et PHYS. REV. C 16 (1977) 939 W.A. SCHIER. Cross sections, angular distributions, and magnetic substate populations in the  $^{23}\text{Na}(n, n'\gamma)$  reaction. *Physical Review C*, **16**(3), p. 939–957, September 1977.
- [101] D. ROCHMAN, A.J. KONING, D.F. DA CRUZ, P. ARCHIER et J. TOMMASI. On the evaluation of  $^{23}\text{Na}$  neutron-induced reactions and validations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, **612**(2), p. 374–387, January 2010.
- [102] A. PLOMPEN et C. ROUKI. Communication personnelle, 2011.
- [103] J.-C. SUBLET, P. RIBON et M. COSTE-DELCLAUX. *User manual for CALENDF-2005*. Rapport, CEA/DEN Cadarache, Rapport CEA-R-6131, 2006.
- [104] G. PANINI et P. PEERANI. *Production of an ECCO library*. Rapport, Winfrith Technology Centre, Report CFSM/P(88)71, 1988.
- [105] C.R. EATON et C.J. DEAN. *Improvements to the GECCO Code*. Rapport, Winfrith Technology Centre, Report CFSM/P(90)107, 1990.
- [106] A.J. KONING. Tefal-1.05 : Creating ENDF-6 files with Talys. NRG Report, 2008.
- [107] C. DE SAINT JEAN, P. ARCHIER, D. BERNARD, B. HABERT, G. NOGUÈRE, J. TOMMASI et P. BLAISE. Status of CEA Activities in SG33. In *NEA/OECD WPEC Subgroup 33 - 5<sup>th</sup> subgroup meeting*. [Fichier PDF](#), May 2011.
- [108] J. GOURDON *et al.* Special issue devoted to SuperPhénix commissioning tests. *Nuclear Science and Engineering*, **106**, p. 1–98, 1990.
- [109] P. SCIORA *et al.* Break Even Oxide Fuel Core for an Innovative French Sodium-Cooled Fast Reactor : Neutronic Studies Results. In *Proceedings of Global 2009*, Paris, France, 2009. Paper 9528.
- [110] P. SCIORA *et al.* Low void effect core design applied on 2400 MWth SFR reactor. In *Proceedings of ICAPP 2011*, Nice, France, May 2-5 2011.



- 
- [111] Y.H. BOUGET *et al.* Physics Performances of a Heterogeneous Fast Reactor Core Concept Studied in MASURCA. *Nuclear Technology*, **44**, p. 61–75, 1979.
- [112] G. HUMBERT *et al.* Parametric Studies on Heterogeneous Cores for Fast Breeder Reactors : the Pre-Racine and Racine Experimental Programs. *Nuclear Science and Engineering*, **87**, p. 233–251, 1984.
- [113] P.J. FINCK *et al.* The CIRANO Experimental Program in Support of Advanced Fast Reactor Physics. In *Proceedings of International Conference on the Physics of Reactors, PHYSOR'96*, Mito, Japan, September, 16-20 1996.
- [114] G. PALMIOTTI *et al.* Optimized two-dimensional  $S_n$  transport (BISTRO). *Nuclear Science and Engineering*, **104**(1), p. 26–33, 1990.
- [115] G. PALMIOTTI, C.B. CARRICO et E.E. LEWIS. *Variational nodal method for the solution of the diffusion and transport equation in two- and three-dimensional geometries*. Rapport, CEA NT-SPRC/LEPh 91-208 indice 1, Juin 1991.
- [116] E.S. SOUKHOVITSKII, S. CHIBA, J.-Y. LEE, O. IWAMOTO et T. FUKAHORI. Global coupled-channel optical potential for nucleon–actinide interaction from 1 keV to 200 MeV. *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, **30**(7), p. 905–920, 2004.
- [117] R. CAPOTE, S. CHIBA, E.S. SOUKHOVITSKII, J.M. QUESADA et E. BAUGE. A Global Dispersive Coupled-Channel Optical Model Potential for Actinides. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **45**(4), p. 333–340, 2008.