

## CALCULS DE TERMES SOURCES AVEC ALEPH2

Alexey STANKOVSKIY, Gert VAN DEN EYNDE,  
Luca FIORITO, Edouard MALAMBU

Institut de Systèmes nucléaires avancés, SCK•CEN  
Boeretang 200, B-2400 Mol  
[alexey.stankovskiy@sckcen.be](mailto:alexey.stankovskiy@sckcen.be)

### Introduction

Depuis 2004, le Centre de Recherche Nucléaire de Mol, Belgique, SCK•CEN en sigle, a entrepris le développement d'un logiciel, nommé ALEPH, pour le calcul neutronique d'épuisement de combustible dans le cœur de réacteur [1]. Ce code consiste en un couplage d'un code statique de type Monte Carlo pour le transport des particules avec un solveur de type déterministe pour la résolution des équations décrivant l'évolution des concentrations des différents isotopes. En calcul statique les codes Monte Carlo sont, en effet, réputés pour leur capacité à reproduire, localement, des spectres et des cartes de flux neutroniques détaillés dans des configurations géométriques tridimensionnelles complexes.

En ce qui concerne le calcul d'évolution des concentrations des différents isotopes les codes utilisés à travers le monde sont basés presque exclusivement sur des solveurs de type déterministe. Divers algorithmes numériques sont utilisés la plupart étant des variantes de la méthode dite de "matrice exponentielle". Il s'agit notamment de la méthode de développement limité de Taylor, implémentée dans les codes "ORIGEN" [2] et "ORIGEN-S" [3], de l'approche "Krylov" implémentée dans le code "AEGIS" [4] et de la méthode d'approximation rationnelle de Tchebychev, comme dans le code "SERPENT" [5]. Le prix à payer pour le gain de précision résultant d'un couplage avec un code statique de type Monte Carlo est un temps de calcul relativement long, comparé au couplage avec un code statique de type déterministe. Fort heureusement l'évolution des ordinateurs et le fonctionnement en parallèle de codes Monte-Carlo permettent d'atteindre l'objectif de précision dans des temps raisonnables.

Les sources d'incertitudes sur l'inventaire final calculé avec les codes d'évolution basés sur Monte Carlo sont de deux types. Le premier type, lié aux données nucléaires, concerne l'incertitude inhérente à l'évaluation de sections efficaces ainsi que l'incertitude engendrée par les inconsistances entre les jeux de sections efficaces utilisés dans les divers modules du code. Le second type se rapporte à l'erreur numérique inhérente aux algorithmes appliqués pour la résolution des équations différentielles décrivant l'évolution des isotopes. La réduction de toutes ces sources d'incertitudes constitue une des forces motrices ayant incité au développement de récentes versions du code ALEPH.

### Principes de base du fonctionnement

Le code ALEPH fait l'objet de mise-à-jour continue pour améliorer son efficacité et accroître ses capacités. La version actuelle du code, appelée ALEPH2 [6], présente deux spécificités qui le rendent extrêmement flexible et versatile.

Primo, ALEPH2 repose sur une consistance complète des données nucléaires: les mêmes jeux (ou des jeux compatibles) de données sont utilisés tant pour le calcul statique que pour le calcul d'évolution.

Secundo, son module d'évolution est basé sur une méthode de Runge-Kutta implicite utilisant l'algorithme dite RADAU IIA [7]. Cette méthode élimine toute propagation de l'incertitude pendant la résolution des systèmes rigides d'équations différentielles.

ALEPH2 fonctionne avec toutes les versions modernes de codes MCNP [8] et MCNPX [9], qui sont les codes Monte Carlo le plus utilisés de par le monde pour le calcul statique de flux ou de spectre de diverses particules. Utilisé avec un code de la famille MCNPX, ALEPH2 s'avère être un outil de prédilection pour l'analyse des systèmes nucléaires hybrides. Une application de ce genre est le design, au SCK•CEN, du système MYRRHA [10] dont le concept de base est celui d'un système sous-critique piloté par accélérateur (ADS, Accelerator Driven System). Le cœur, chargé de combustible MOX, est refroidi par un métal liquide, en l'occurrence du plomb-bismuth eutectique. Le système est conçu de manière à opérer aussi bien en mode sous-critique qu'en mode critique. En mode sous-critique un faisceau (2 à 3 mA) de protons de 600 MeV bombarde un cible de plomb-bismuth, en phase liquide. La réaction de spallation qui s'en suit génère les neutrons de source qui est amplifiée par le système sous-critique. Le code ALEPH2 permet l'évaluation de taux d'épuisement du combustible, l'activation des matériaux de structures, l'échauffement nucléaire voire la production et/ou l'évolution des produits de spallation.

### **Données nucléaires**

Une des améliorations majeures du code concerne le traitement des données nucléaires. Le code ORIGEN-2.2, utilisé dans version initiale de ALEPH pour le calcul d'évolution, n'était capable de traiter qu'un nombre limité de réactions, à savoir: la capture radiative, la fission, ainsi que les réactions  $(n,2n)$ ,  $(n,3n)$ ,  $(n,p)$  et  $(n,\alpha)$ . Ce qui est trop limité pour l'analyse d'un système comprenant, par exemple, un accélérateur de particules. Dans ces cas en effet, le nombre de canaux de réactions ouverts est beaucoup plus élevé, en particulier dans les applications en haute énergie. Un utilitaire du code, appelé ALEPH-DLG, est conçu pour exécuter le code NJOY [11] afin de préparer des bibliothèques de données nucléaires nécessaires sous format utilisable, pour les réactions induites par les neutrons, à partir des bibliothèques générales telles que JEFF-3.1.2 [12] ou ENDF/B-VII.1 [13]. Les bibliothèques ainsi générées sont utilisées et dans le calcul statique (dans MCNP ou MCNPX) de flux et spectres et dans le calcul d'évolution. Ceci garantit la consistance des données nucléaires. Dans les bibliothèques JEFF-3.1.2 et ENDF/B-VII.1 le nombre de nuclides est limité à environ 400, alors que les calculs d'évolution impliquent beaucoup plus de nuclides, en particulier dans le cas des ADS. Pour couvrir la gamme des hautes énergies, on puise les données complémentaires dans les bibliothèques TENDL-2013 [14] (jusqu'au 200 MeV) et HEAD-2009 [15] (jusqu'au 1 GeV). La compatibilité dans le passage d'une bibliothèque à l'autre est assurée lors du traitement ALEPH-DLG. Les données d'activation des bibliothèques TENDL-2013 et HEAD-2009 sont aussi incluses dans le traitement. Dans le cas des ADS, les réactions induites par les protons peuvent jouer un rôle important sur l'évolution temporelle des produits de spallation et d'activation. La même stratégie est appliquée pour combiner les données nucléaires provenant de bibliothèques TENDL-2013 et HEAD-2009.

Bref, la bibliothèque construite par ALEPH-DLG pour "ALEPH2" contient plus de 2000 nuclides de demi-vie supérieure à une seconde. La bibliothèque contient près de 2000 sections efficaces, jusqu'à une énergie de 1 GeV, couvrant le domaine d'application des réacteurs classiques et de systèmes nucléaires avancés. ALEPH2 utilise pratiquement tous les données spécifiques fournies dans les bibliothèques, à savoir: les paramètres de décroissance radioactive (JEFF-3.1.2, par exemple, en contient pour 3851 nuclides), l'énergie totale récupérable par fission ainsi que les rendements en produits de fission.

### **Algorithme du calcul d'évolution**

En supposant le flux neutronique constant et le spectre inchangé dans l'intervalle de temps d'irradiation considéré, on peut obtenir la concentration,  $y_i$ , d'un nuclide,  $i$ , par l'intégration

d'un système des équations différentielles du premier ordre (connues sous le nom d' "équations de Bateman") :

$$\frac{dy_i(t)}{dt} = \sum_j \lambda_{ji}^{tr} y_j(t) - \lambda_i^{tr} y_i(t). \quad (1)$$

Sous forme compacte, cela peut s'écrire :

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \Lambda \vec{y}. \quad (2)$$

Avec les coefficients de la matrice  $\Lambda$ . Ici  $\lambda_{ji}^{tr}$  est le taux de transmutation (production) du nuclide  $i$  à partir du nuclide  $j$ , et  $\lambda_i^{tr}$  est le taux de disparition du nuclide  $i$ . Ces taux sont définis par :

$$\lambda_{ji}^{tr} = \sum_m \sigma_{ji}^m \varphi^m + \lambda_{ji}^d \quad (3)$$

Et

$$\lambda_i^{tr} = \sum_m \sigma_{R,i}^m \varphi^m + \lambda_i^d \quad (4)$$

Où :

- $\lambda_{ji}^d$  est la section efficace moyenne (pondérée par le spectre neutronique) de production du nuclide  $i$  dans la réaction induite sur le nuclide  $j$  par la particule incident de type  $m$  ;
- $\varphi^m$  est le flux moyen de particules de type  $m$  ;
- $\lambda_{ji}^d$  est la constante de décroissance du nuclide  $j$  vers le nuclide  $i$  ;
- $\sigma_{R,i}^m$  est la section efficace moyenné de transformation du nuclide  $i$  ;
- $\lambda_i^d$ , la constante de décroissance du nuclide  $i$ .

Dans la plupart de cas,  $m$  désigne les neutrons, car seules les réactions induites par les neutrons sont considérées. Néanmoins lorsqu'on doit tenir compte de l'accumulation de produits de spallation et de l'activation de structures au voisinage de la cible de spallation d' un ADS, la contribution des protons n'est pas négligeable.

Le code ORIGEN-2.2 utilise la méthode de la matrice exponentielle dans laquelle la solution de l'équation (2) est obtenue sous forme d'un développement en séries de puissances limité (développement de Taylor) de la fonction exponentielle. L'erreur dans les concentrations des nuclides telle qu'induite par cette approche numérique peut s'avérer non-négligeable [6]. Par ailleurs, la rigidité de l'implémentation dans le code ORIGEN-2.2 ne permet pas son application à des particules autres que le neutron.

Heureusement la puissance des ordinateurs permet, de nos jours, l'implémentation d'algorithmes plus avancés pour la résolution des équations différentielles du premier ordre très rigides à coefficients constants. En pratique on utilise soit les formules de type différences finies soit les méthodes Runge-Kutta implicites (IRK). Beaucoup d'analyses ont montré que la méthode IRK RADAU IIA telle qu'implémentée dans le programme RADAU5 [7] était très précise et très stable [16]. C'est la raison pour laquelle nous avons choisi cet algorithme pour le code ALEPH2.

### **Flexibilité**

ALEPH2 peut traiter divers types de problèmes, notamment:

- L'irradiation du combustible d'un réacteur à une puissance donnée ;

- L'irradiation du combustible ou des matériaux de structures dans un flux de neutrons et/ou d'autres particules (mode source fixe dans laquelle on peut utiliser des différents types de particules) ;
- Les analyses post-irradiation (traitement des déchets).

Un problème typique consiste en l'irradiation du combustible dans le cœur d'un réacteur fonctionnant à une puissance donnée. L'utilisateur du code peut spécifier soit la puissance globale du réacteur soit la puissance produite localement dans la zone du matériau à étudier. ALEPH2 utilise cette donnée de puissance pour calculer l'intensité,  $S$ , de particules source, laquelle lui servira de facteur de normalisation pour l'estimation "track-length" du flux calculé par MCNP, en utilisant la formule :

$$S = \frac{P_{tot}}{C \sum_i \sum_k \varphi_{m,k}^{MCNP} \sum_j N_{k,j} \sum_i \sigma_{m,j,i} Q_{m,j,i}} \quad (5)$$

Dans cette formule :

- l'indice  $m$  désigne le type de particule (neutron, proton, photon ou tous),
- $k$ , le type de matériau,
- $j$ , le type de nuclide,
- $i$ , le type de réaction (fission, capture, etc.).
- $Q_{m,j,i}$  est l'énergie libérée dans le processus type  $i$  initié par une particule type  $m$  sur un nuclide  $j$ ,
- $\sigma_{m,j,i}$  la section efficace moyenne (pondérée par le spectre),
- $N_{k,j}$  la concentration du nuclide  $j$  dans le matériau  $k$ ,
- $\varphi_{m,k}^{MCNP}$  l'estimation "track-length" de MCNP/X pour le flux de particules de type  $m$  dans le matériau  $k$  (exprimé en particules/cm<sup>2</sup>/particule source),
- $C$ , le facteur de conversion de MW à MeV/s.

Dans l'état actuel une approche "simple" est appliquée concernant l'énergie libérée par fission: toute l'énergie récupérable est supposée être déposée localement. Une approche plus précise, basée sur un calcul en trois étapes, est en cours de développement. La première étape consiste à effectuer un calcul statique multi-particule (neutrons, photons, électrons et, éventuellement, protons) avec MCNPX pour déterminer la composante prompt de l'échauffement dans la zone d'intérêt. ALEPH2 va effectuer, ensuite, un calcul d'évolution pour évaluer les sources des rayonnements retardés (béta et gamma) générés par la décroissance des nuclides instables. Un autre calcul MCNPX de type source fixe et en mode couplé "photon-électron" sera exécuté pour déterminer la composante retardée de l'échauffement. ALEPH2 sortira alors des tableaux donnant les diverses contributions ainsi que l'échauffement total.

### Algorithme prédictor-correcteur avancé

Les méthodes prédictor-correcteur sont souvent utilisées dans les codes d'évolution pour tenir compte de la variation du flux et/ou du spectre de neutrons pendant l'étape de temps de calcul. ALEPH2 contient un prédictor-correcteur avancé, en l'occurrence le "time-dependent matrix algorithm" [17]. Dans cette méthode, les coefficients de la matrice dans l'équation (2) sont considérés comme dépendent du temps et sont approximés par des polynômes linéaires. Ces polynômes permettent d'ajuster les taux de réactions à utiliser dans l'étape de temps ultérieur du calcul d'évolution.

### Incertitudes sur les données nucléaires

Récemment, des routines ont été implémentées dans le code ALEPH2 pour l'analyse de sensibilité et de propagation des incertitudes. Elles ont été validées par des calculs sur le

"Fission Pulse Decay Heat" [18]. Trois méthodes sont implémentées, à savoir: des procédures directes et adjointes d'analyse de sensibilité ainsi qu'une approche totalement Monte Carlo. Grâce à cette nouvelle fonctionnalité, ALEPH2 est capable de produire des listes de paramètres (constantes de décroissance, énergies de décroissance ou taux de fission) auxquels la chaleur résiduelle est plus sensible.

### Calcul des termes source

Une attention particulière a été accordée à l'amélioration des routines de traitement des résultats. L'utilisateur a la possibilité de demander une variété de paramètres de sortie: (activités des matériaux, chaleur résiduelle, source de radiation alpha, bêta, gamma et la puissance associée). En plus, les sources de neutrons retardés, les sources de neutrons de type  $(\alpha, n)$ , les sources de neutrons spontanés et les doses gamma sont aussi évaluées. Les spectres de divers rayonnements sont calculés sur une découpe d'énergie très fine, ce qui en facilite l'utilisation dans des étapes ultérieures de calcul.

### Références

1. W.Haack and B.Verboomen, "An Optimum Approach to Monte Carlo Burn-up," *Nucl.Sci.Eng.*, **156**, p. 180 (2007).
2. A.G.Croff, ORNL/TM-7175, Oak Ridge National Laboratory (1980).
3. I.C.Gauld et al., SCALE-6 User Manual, ORNL/TM-2005/39, Vol.2, Sect. F7 (2009).
4. A.Yamamoto et al., " *J. Nucl. Sci. Technol.*, **Vol.44, No.2**, p.147 (2007).
5. M.Pusa and J.Leppänen, *Nucl. Sci. Eng.*, **164**, pp.140-150 (2010).
6. A.Stankovskiy and G.Van den Eynde, *Sci. and Technol. of Nucl. Installations*, **vol. 2012**, 545103 (2012).
7. E.Hairer and G.Wanner, Solving Ordinary Differential Equations. Stiff and Differential-Algebraic Problems. 2nd ed., Springer Series in Comput. Math., Vol. 14 (1996).
8. T.E.Booth, *et al.*, (X-5 Monte Carlo Team), LA-CP-03-0245 (2003).
9. D. B. Pelowitz, ed., LA-CP-11-00438 (April 2011).
10. H.Aït Abderrahim, et al., Report R-4234, SCK·CEN (2006)
11. R.E.MacFarlane and D.W.Muir, LA-12740-M, Los Alamos National Laboratory (1994)
12. A.Santamarina, *et al.*, ed., NEA No. 6807, OECD (2009)
13. M.B.Chadwick, et al, *Nuclear Data Sheets*, **112** (2011) 2887.
14. A.J. Koning and D. Rochman, *Nuclear Data Sheets* **113** (2012) 2841
15. Yu.A.Korovin, et al., *Nucl. Instr. Meth. In Phys. Res.* **A624** (2010) 20.
16. G.Van den Eynde et al., Proc. Int. Conf. M&C 2013, Sun Valley, Idaho, USA, May 5-9, 2013
17. L.Fiorito et al., *Ann. Nucl. En.* **62** (2013) 307
18. L.Fiorito et al., Proc. Int. Conf. PHYSOR-2014, Kyoto, Japan, 28 September – 1 October 2014.