



STUDIECENTRUM VOOR KERNENERGIE
CENTRE D'ETUDE DE L'ENERGIE NUCLEAIRE

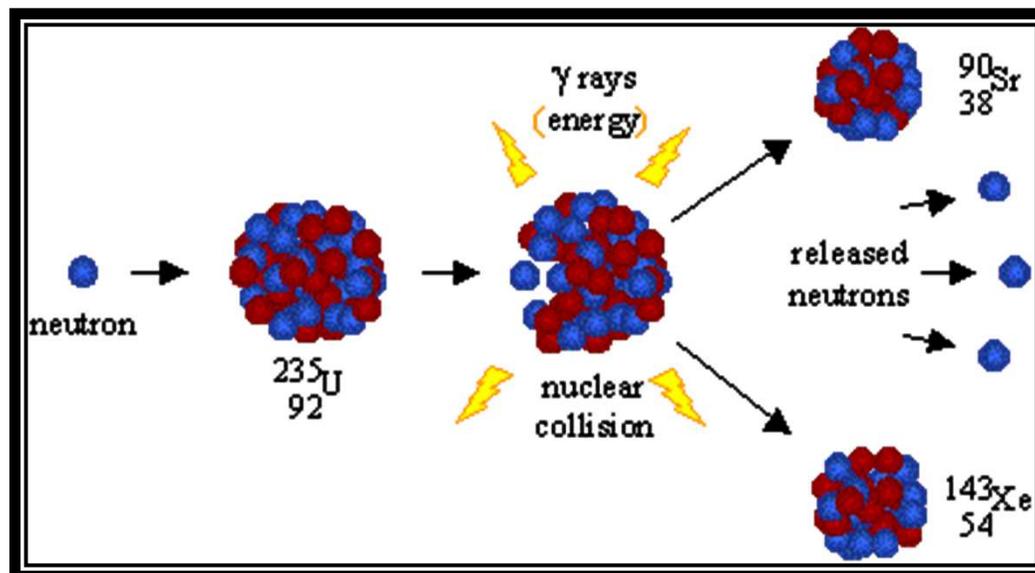
Calculs de termes sources avec ALEPH2

A.Stankovskiy, G.Van den Eynde, L.Fiorito, E.Malambu
SCK•CEN, Mol, Belgium

alexey.stankovskiy@sckcen.be

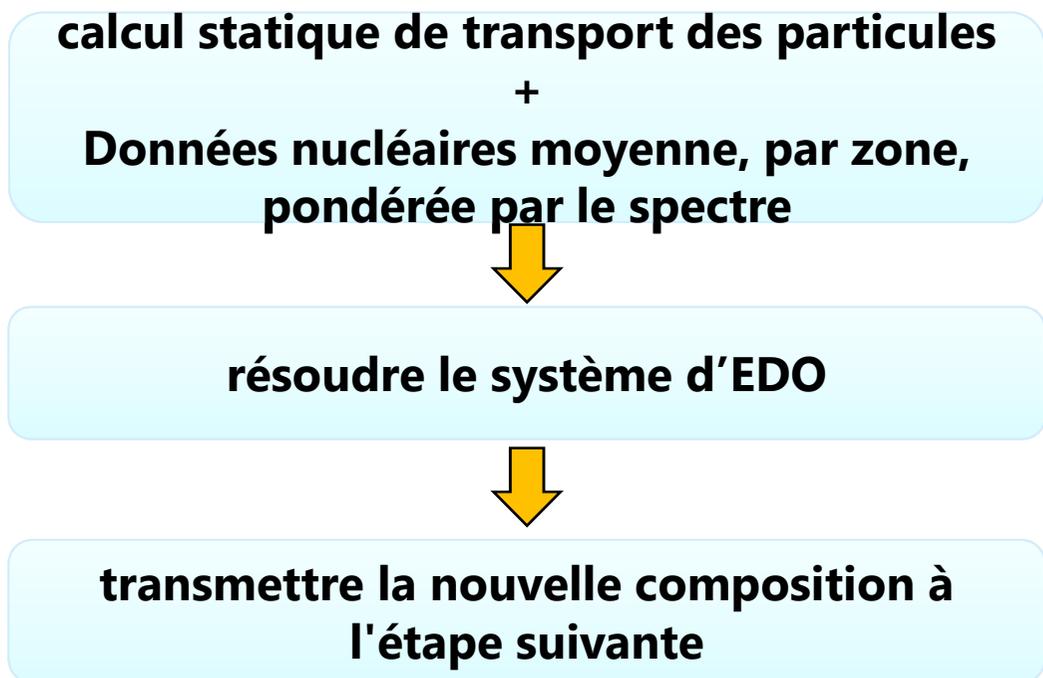
- **Principes de base du fonctionnement**
- Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance
- Algorithme du calcul d'évolution
- Flexibilité
- Algorithme prédicteur-correcteur avancé
- Incertitudes sur les données nucléaires
- Calcul des termes source

- Combustible nucléaire irradié subit plusieurs réactions



Variation de la quantité isotopique

Tâches de base d'un code d'épuisement: pour chaque étape du calcul de l'évolution:

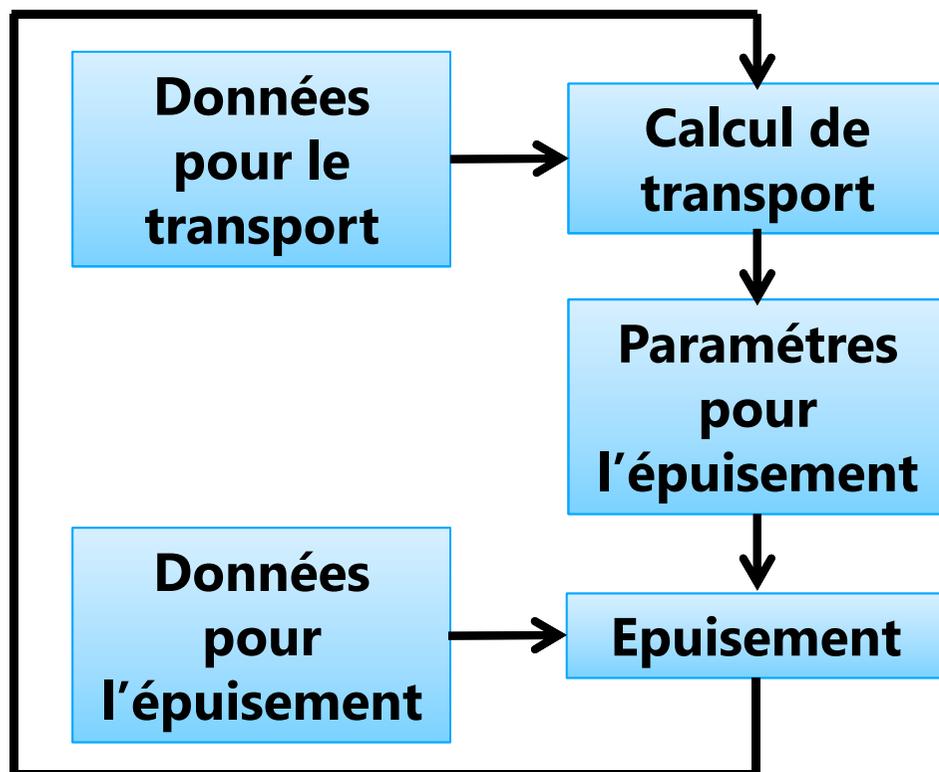


$t_i: \langle \rangle, \langle \rangle$

—

$t_{i+1}: \langle \rangle, \langle \rangle$

Deux catégories de codes d'épuisement selon la méthode (**déterministe** ou **stochastique**) utilisée pour le calcul statique



Des outils puissants:

- 😊 Simple 1D à complexe 3D
- 😊 Systèmes critiques et sous-critiques
- 😊 Physique multi-particule
- 😊 Traitement détaillé en énergie et en espace
- 😊 Implémentation en parallèle du code

Limitations:

- 😞 Consommant de temps de calcul
- 😞 Approximations réduisant la précision

2004-2008

ALEPH1

- Mises à jour uniquement des sections efficaces (la bibliothèque d'ORIGEN2.2 pour les rendements en produits de fission)
- ORIGEN2.2 comme le solveur
- Sortie: quantité isotopique seulement

2009-2013

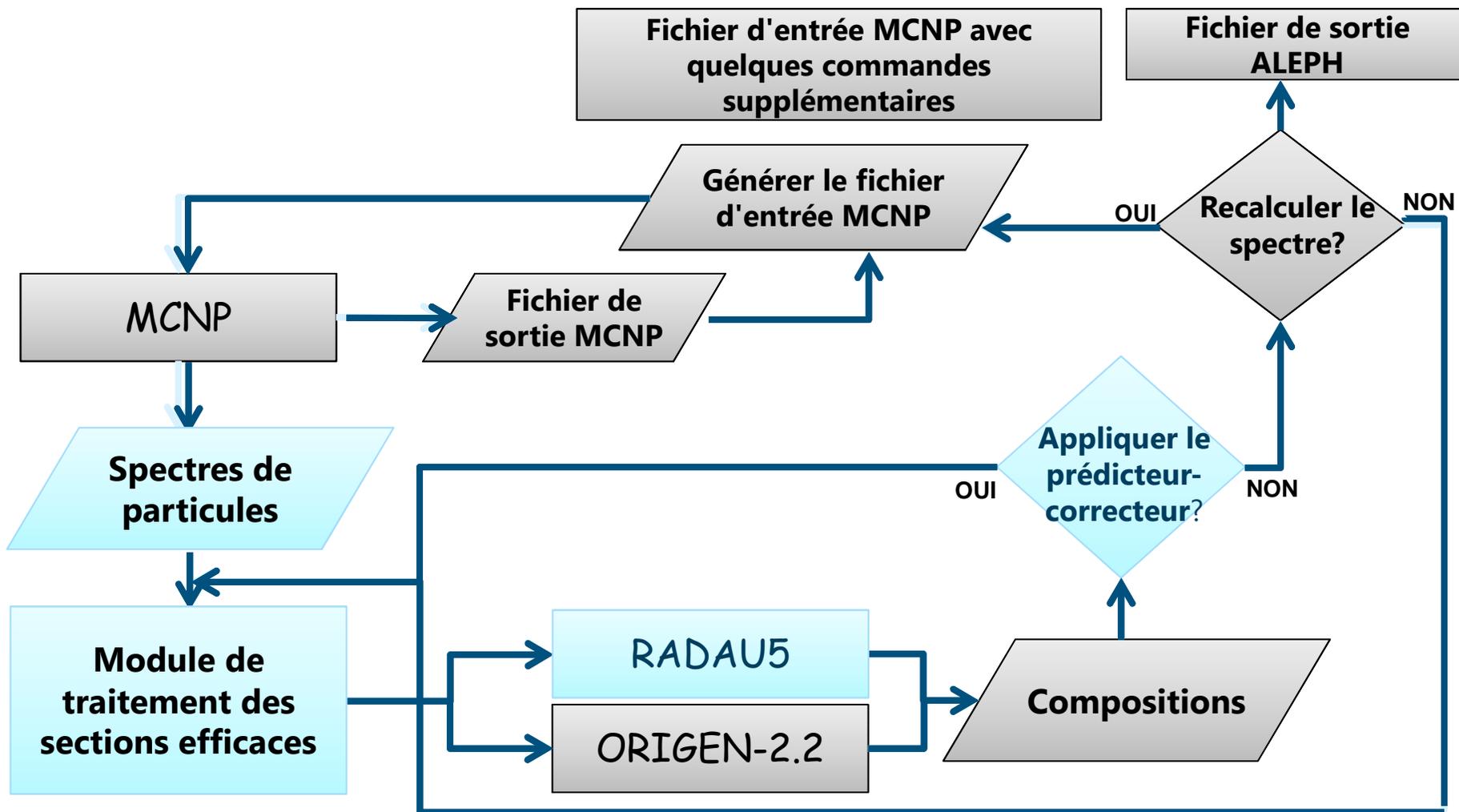
ALEPH2

- sections efficaces , rendements en produits de fission, etc. – la consistance complète des données
- Le solveur RADAU5
- Multi-particules
- Sorite: les termes sources complètes
- Calcul d'échauffement très précis

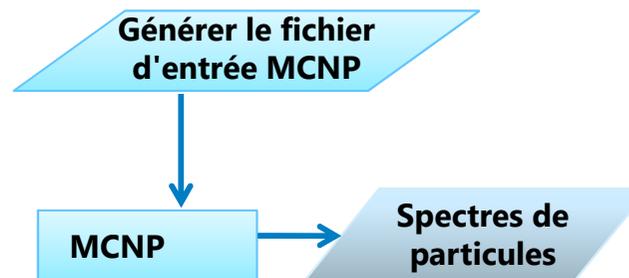
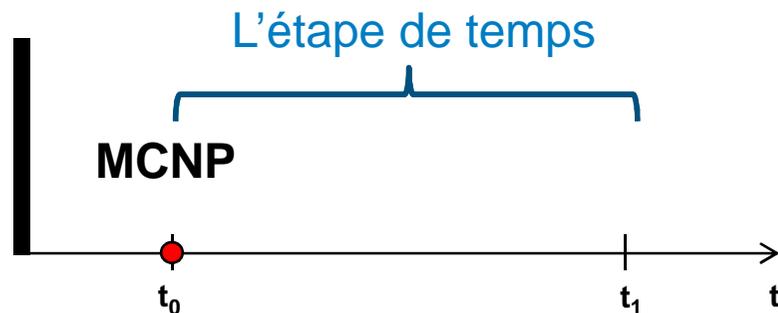
2014-2016

ALEPH3

- Propagation de l'incertitude (données nucléaires, les concentrations ...)
- Implémentation en parallèle du code
- Visualisation des termes sources



- Principes de base du fonctionnement
- **Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance**
- Algorithme du calcul d'évolution
- Flexibilité
- Algorithme prédicteur-correcteur avancé
- Incertitudes sur les données nucléaires
- Calcul des termes source

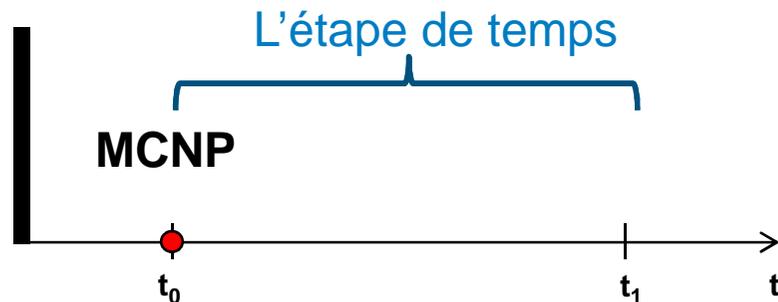


- Un seul fichier d'entrée

() à

- Méthode stochastique
Monte Carlo
- des conditions statiques

Sections efficaces au format ACE à partir de la bibliothèque JEFF (3.2, 3.1.2, 3.1.1...) ou ENDF (ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VII.0..)



Réduire à 1 groupe

Flux intégré dans le matériel k

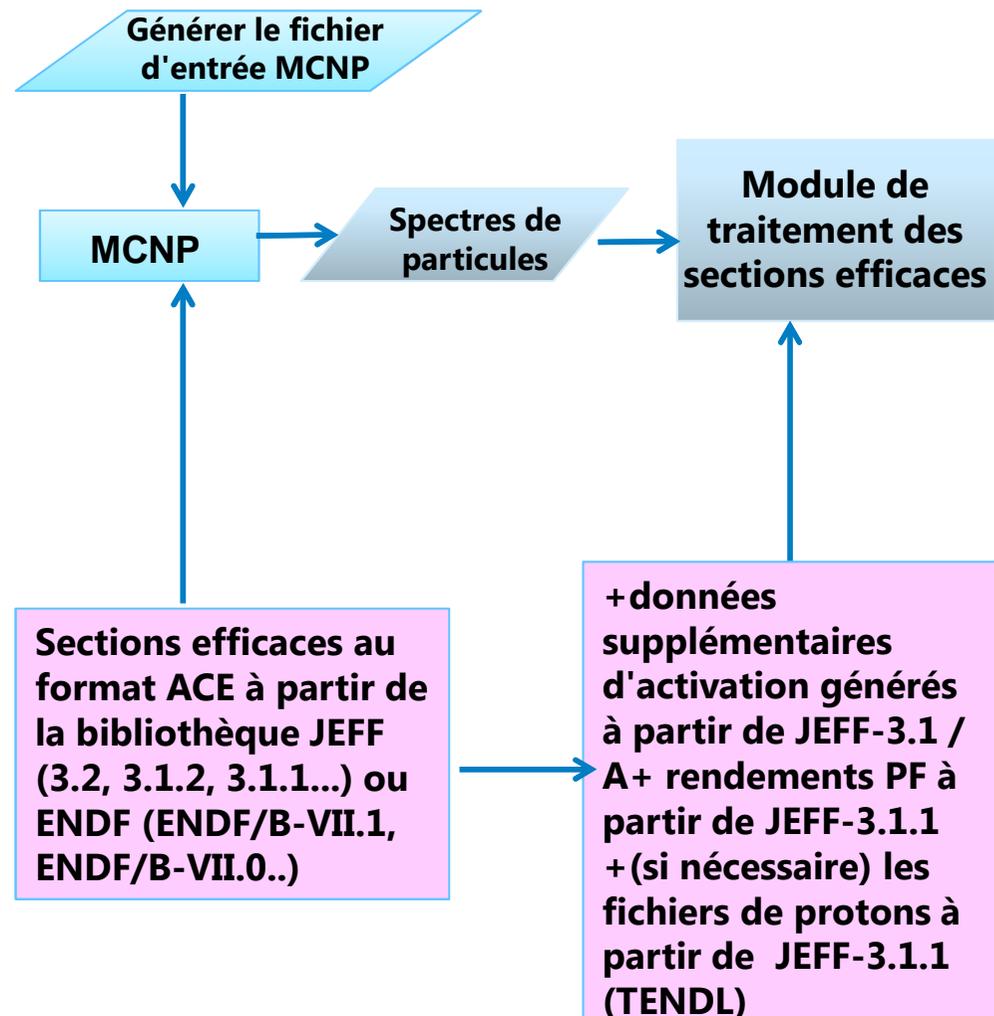
$$\langle \phi \rangle - \phi$$

- Section efficace moyenne pour la réaction de type j en nucléide i

$$\langle \sigma_j \rangle = \frac{\phi_j}{\phi}$$

- Taux de réaction de type j en nucléide i

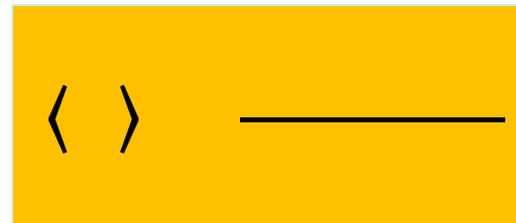
$$R_j = \phi \sigma_j$$



- Le calcul des taux de réaction dans les codes statiques Monte Carlo est assez lent. Augmentation presque linéaire du temps de calcul (100 taux de réaction dans MCNP prend ~ 90 fois plus que le calcul du spectre)



- Le calcul des taux de réaction en dehors du code statique Monte Carlo



- Réduction significative du temps de calcul par rapport à MCNP
- Sections efficaces d'activation supplémentaires non disponibles dans les bibliothèques de transport

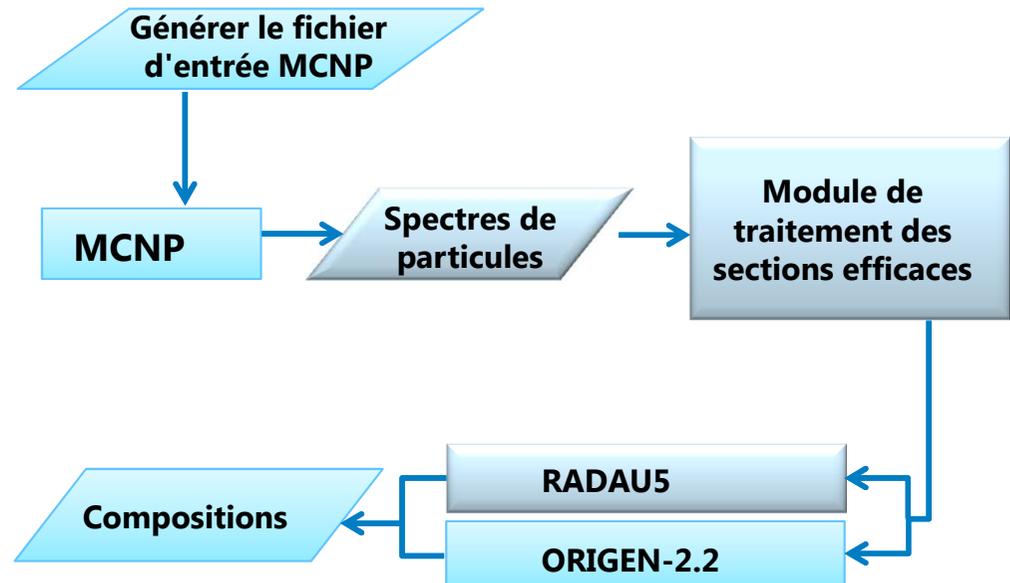
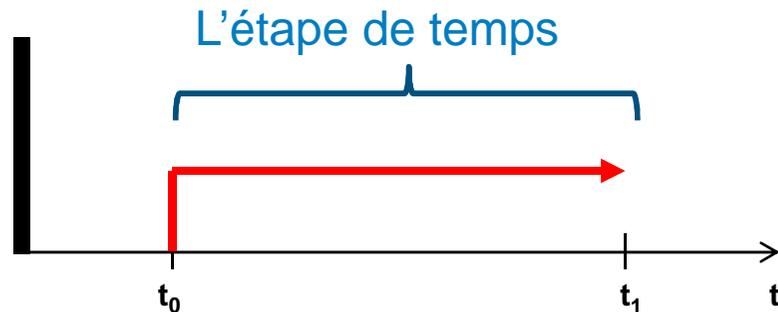
- Le temps supplémentaire utilisé pour le calcul des sections efficaces par ALEPH2 (en dehors du MCNP) est négligeable
- convergence des sections efficaces: écarts mineurs par rapport taux de réaction calculés avec MCNP
- Structure multi-groupe assez fine pour le spectre (par défaut: 116,000 groupes)

Ecarts par rapport de TR calculé avec MCNP (tally F4 + FM) (sections efficaces sont identiques)

Spectre thermique			Spectre rapide		
Nuclide	Reaction	Δ (%)	Nuclide	Reaction	Δ (%)
²³⁵ U	(n,g)	0.001	²³⁵ U	(n,g)	0.002
²³⁵ U	(n,f)	0.000	²³⁵ U	(n,f)	0.001
²³⁸ U	(n,g)	0.100	²³⁸ U	(n,g)	0.092
²³⁸ U	(n,f)	0.001	²³⁸ U	(n,f)	0.003
²³⁹ Pu	(n,g)	0.003	²³⁹ Pu	(n,g)	0.005
²³⁹ Pu	(n,f)	0.002	²³⁹ Pu	(n,f)	0.003
¹⁵⁵ Gd	(n, g)	0.091	¹⁵⁵ Gd	(n, g)	0.132
¹⁰ B	(n, g)	0.044	¹⁰ B	(n, g)	0.227

- Principes de base du fonctionnement
- Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance
- **Algorithme du calcul d'évolution**
- Flexibilité
- Algorithme prédicteur-correcteur avancé
- Incertitudes sur les données nucléaires
- Calcul des termes source

Algorithme du calcul d'évolution



- Système d'équations différentielles ordinaires
- Epuisement du matériel

$$\begin{cases} \frac{d\vec{N}(t)}{dt} = \hat{A}\vec{N}(t) \\ \vec{N}(t = t_0) = \vec{N}_0 \end{cases}$$



$$\vec{N}(t = t_1) = \vec{N}_1$$

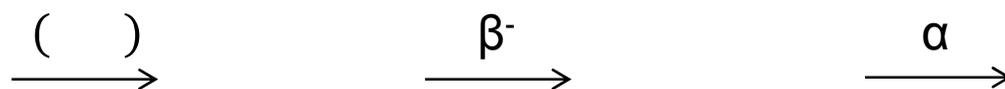
Le solveur précédent: ORIGEN-2.2

- la méthode de la matrice exponentielle
- Erreurs d'arrondies
- Nombre limité de réactions
- Inconsistance des données nucléaires

L'algorithme avancé : RADAU5

- la méthode Runge-Kutta implicite optimisé
- Nombre d'étapes $s=3$
- Ordre de précision $2s-1=5$
- Contrôle automatique de la durée de l'étape
- Pas de limitation sur le nombre de nucléides

Précision



Nuclide	ORIGEN-2.2	RADAU5,	RADAU5,
	diff, %	diff, %	diff, %
	-7.68e-5	0.0	0.0
	4.79e-1	-3.38e-2	-4.63e-11
	1.07	3.75e-3	0.0
	5.36	-5.75e-4	3.55e-10

- Plus grande précision que ORIGEN-2.2
- Moindre erreur numérique dans la résolution du système rigide d'EDO

Système de EDO est grand (JEFF bibliothèque de décroissance: 3851 nucléide) → RADAU5 est assez lent

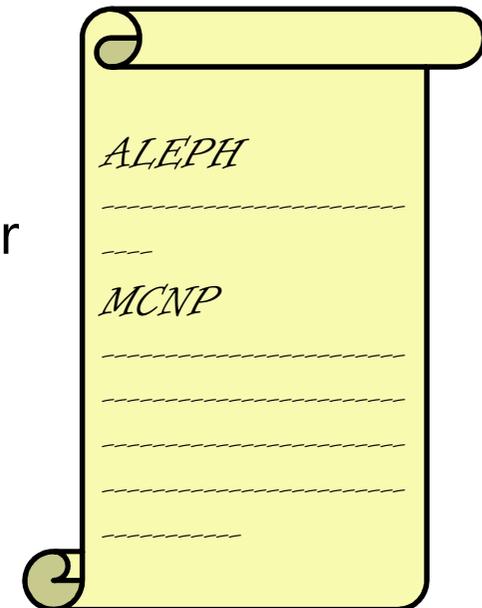
- Principes de base du fonctionnement
- Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance
- Algorithme du calcul d'évolution
- **Flexibilité**
- Algorithme prédicteur-correcteur avancé
- Incertitudes sur les données nucléaires
- Calcul des termes source

- Un autre point faible de codes d'épuisement « Monte Carlo » est leur complexité
- une grande quantité de données d'entrée et de sortie



- ALEPH possède une interface très facile à utiliser
- un seul fichier d'entrée

convivialité



- Deux options d'irradiation: l'utilisateur fournit la carte de puissance ou l'intensité de la source (le facteur de normalisation du flux).
- Si la carte de puissance est définie, le passage de la puissance au flux est réalisé via le calcul de l'intensité de la source:

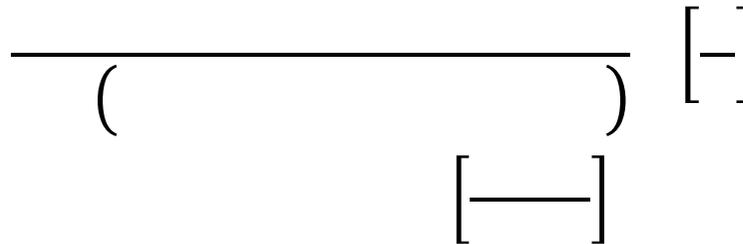
$$\frac{\left(\frac{P_i}{k} \right) \left[\frac{1}{k} \right]}{\left[\frac{1}{k} \right]}$$

(*k* – l'indice du matériau, *i*- l'indice du nucléide)

- Energie liberée par fission: prise dans les fichiers ENDF-6 (MF=1 MT=458
ER=EFR+ENP+END+EGP+EGD+EB)

	JEFF-3.1.2		ENDF/B-VII.1	
	Q ^{fiss} , MeV	Q ^{cap} , MeV	Q ^{fiss} , MeV	Q ^{cap} , MeV
²³⁵ U	193.720	6.545	193.405	6.545
²³⁸ U	197.314	4.807	197.786	4.807
²³⁹ Pu	199.073	6.533	198.902	6.534

- Une autre approche: le calcul d'échauffement



1^{er} passage MCNP:



ALEPH: crée la source retardé

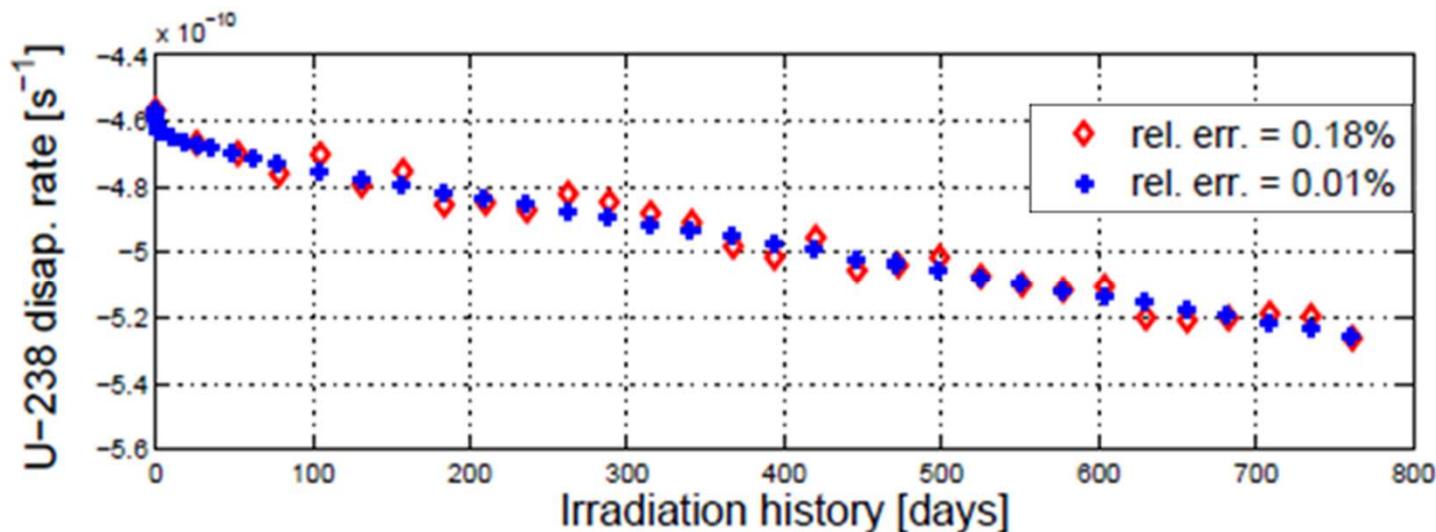
2^{ème} passage MCNP:

- Principes de base du fonctionnement
- Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance
- Algorithme du calcul d'évolution
- Flexibilité
- **Algorithme prédicteur-correcteur avancé**
- Incertitudes sur les données nucléaires
- Calcul des termes source

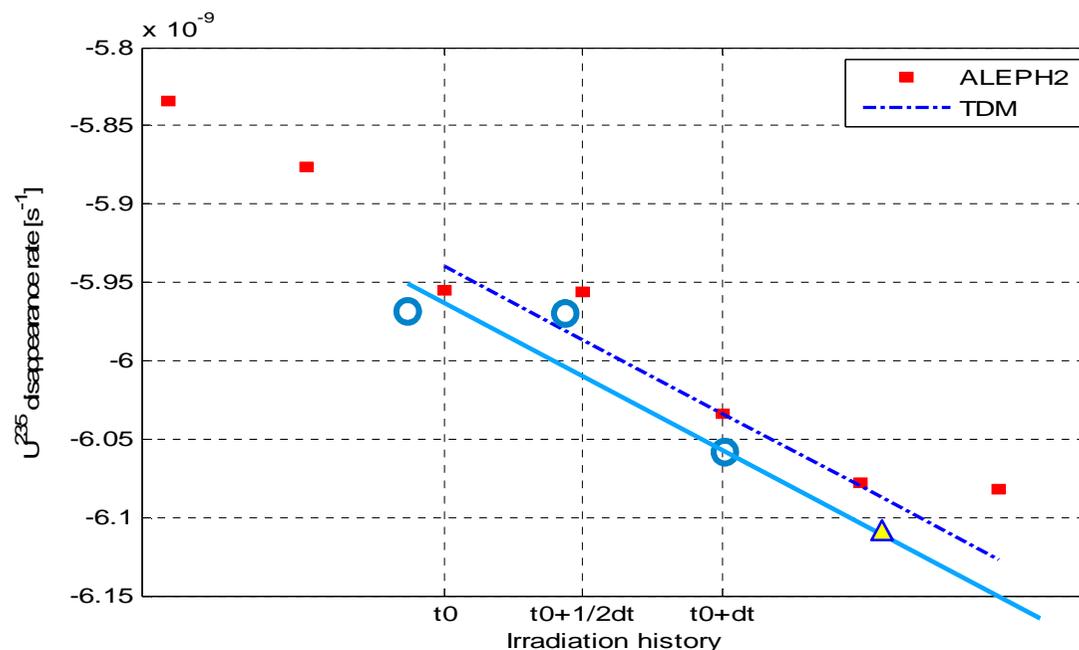
- La nouvelle fonctionnalité: les coefficients de la matrice (taux de réaction) variable dans le temps grâce à la méthode IRK



- hypothèse d'une extrapolation linéaire



Prédiction de taux de réaction



- Coefficients de la matrice en fonction du temps : () ()

- Minimisation des moindres carrés

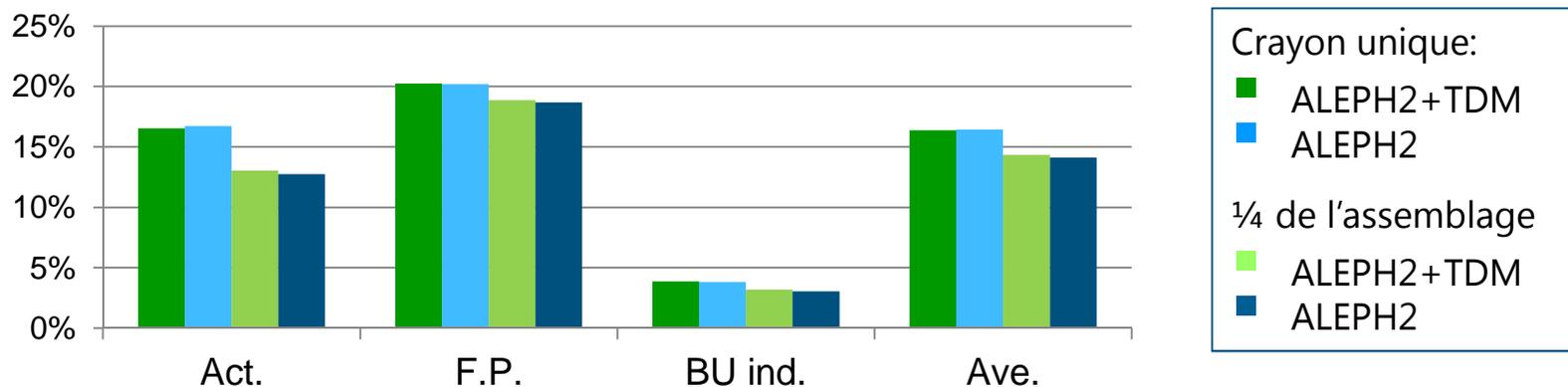
Jacobienne:

L.Fiorito, A.Stankovskiy, G.Van den Eynde, P.E. Labeau, "Development of time-dependent reaction rates to optimize predictor–corrector algorithm in ALEPH burn-up code," *Annals of Nuclear Energy*, **Volume 62** (2013), 307-315

Vérification sur le benchmark international REBUS *:

- Le modèle "crayon unique"
- Le modèle "1/4 de l'assemblage"

Ecarts relative moyenne entre les valeurs calculées et mesurées (%)



Réduction du temps de calcul

REBUS crayon unique

74.7%

REBUS 1/4 de l'assemblage

83.1%

sans TDM = 100%

- **Précision comparable avec ALEPH2**
- **Réduction exceptionnelle du temps de calcul**

* B. Lance. REBUS International Programme, REBUS-PWR Final Report. Ref. No./ File 0501320/221-1 (RE 2005/37). SCK•CEN, Belgium, 2006

- Principes de base du fonctionnement
- Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance
- Algorithme du calcul d'évolution
- Flexibilité
- Algorithme prédicteur-correcteur avancé
- **Incertitudes sur les données nucléaires**
- Calcul des termes source

Propagation d'incertitudes de divers paramètres et leur corrélation à travers les étapes du calcul d'évolution.

L'équation d'évolution à la valeur nominale		la perturbation des paramètres du système		l'analyse de sensibilité & La propagation de l'incertitude
$\begin{cases} \frac{dN_0(t)}{dt} = A(\alpha_0)N_0(t) \\ N_0(0) = N_{in,0} \end{cases}$	+	$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_0 + \delta\alpha \\ N_{in} &= N_{in,0} + \delta N_{in} \\ N &= N_0 + \delta N \end{aligned}$	=	

Des données sur les incertitudes peuvent être récupérées des bibliothèques en format ENDF-6 ou introduites dans le calcul par l'utilisateur.

● paramètres perturbés :

- Sections efficaces,
- constantes radioactives,
- énergies de désintégration,
- Les rendements de fission,
- ...

● réponses:

- Les concentrations de nucléides,
- puissance résiduelle,
- ...

- **“Linear Forward Sensitivity Analysis Procedure (FSAP)”**

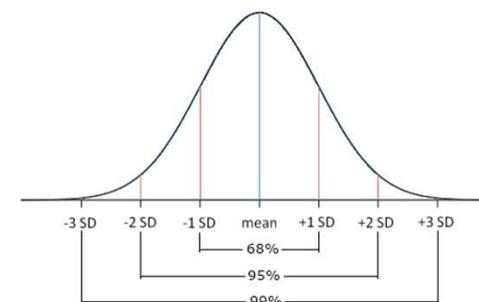
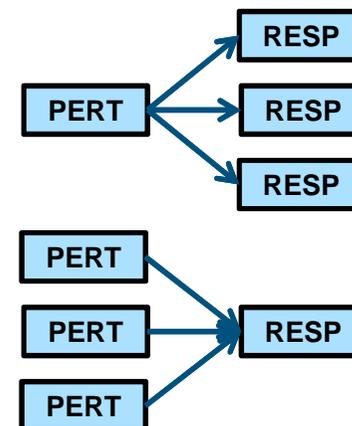
- Peu de paramètres perturbés, de nombreuses réponses.
- L'équation perturbée est résolu directement

- **“Linear Adjoint Sensitivity Analysis Procedure (ASAP)”**

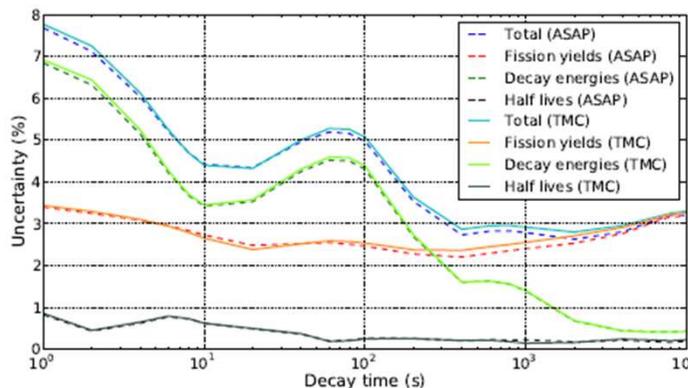
- Beaucoup de paramètres perturbés, peu de réponses.
- Une fonction adjointe doit être définie (elle dépend de la réponse).

- **“Total Monte Carlo (TMC)”**

- Échantillonnage aléatoire $N(0,1)$
- une bonne statistique repose sur le nombre d'échantillons
- l'information de covariance par décomposition de Cholesky
- très lent.



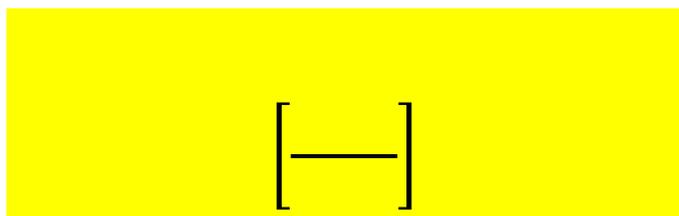
Exemple: “fission pulse decay heat”



- Principes de base du fonctionnement
- Bibliothèques de données nucléaires et leur parfaite consistance
- Algorithme du calcul d'évolution
- Flexibilité
- Algorithme prédicteur-correcteur avancé
- Incertitudes sur les données nucléaires
- **Calcul des termes source**

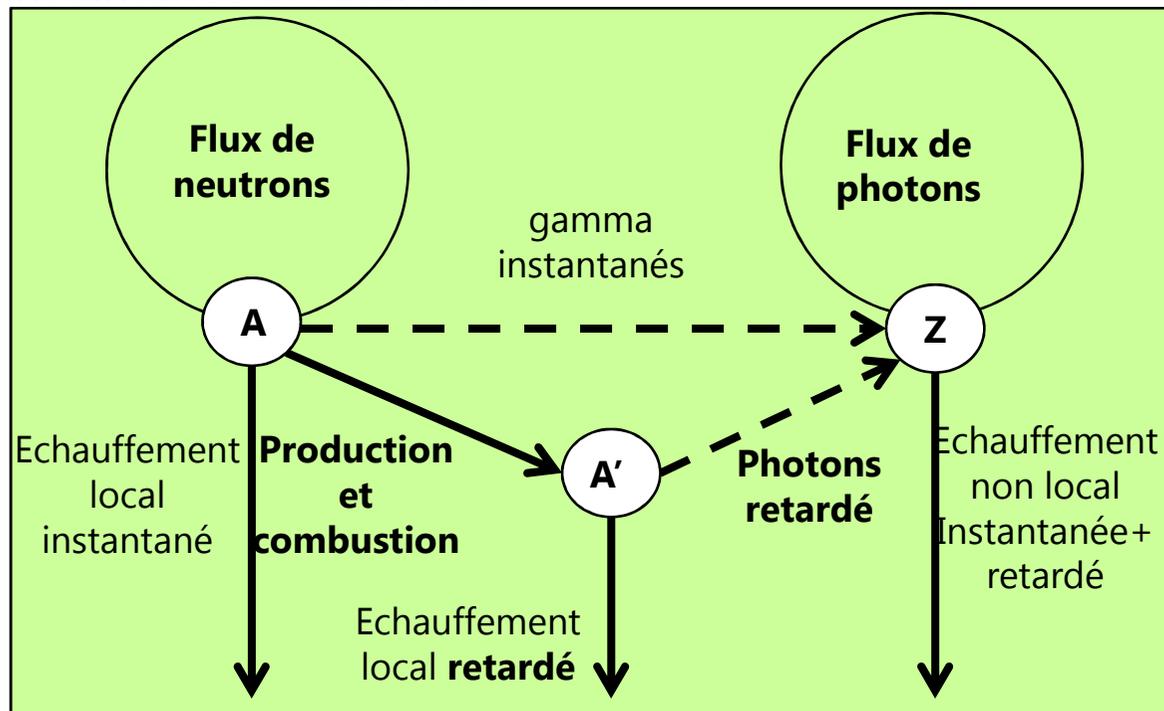
- Activité
- Puissance résiduelle
- Les sources de rayonnement (alpha, bêta, gamma), leur spectre d'énergie, puissance résiduelle et les doses
- Source de neutrons retardés
- source de neutrons de fission spontanée
- source de neutrons de réactions (alpha,n)

- Grille d'énergie très fine (1 keV) → lignes gamma individuelles facilement identifiables
- Contribution d'échauffement instantanée et retardée



2 calculs MCNP successifs (à chaque étape de temps) pour obtenir les spectres de photons

- le problème **n,p** → H_{prompt}
- le problème **p** avec la source de désintégration → $H_{delayed}$



> **3000** bins d'énergie (par défaut) de 1 keV à 100 MeV:

- Amélioration dans le tally d'échauffement
- les principales lignes discrètes d'un spectre de photon peuvent être identifiées

- La méthode

$$\left(\begin{array}{cc} & \\ & () \quad () \end{array} \right)$$

= la densité de neutrons dans le matériel k

- le transport des particules alpha nécessaire → MCNPX, MCNP6
- La bibliothèque des sections efficaces (α,n) : TENDL-2013 pour >2000 nucléides
- Les spectres de neutrons sont calculés en utilisant TENDL-2013 → ils peuvent être directement utilisés dans les calculs MCNP

Accélérateur
(600 MeV - 4 mA proton)



Réacteur

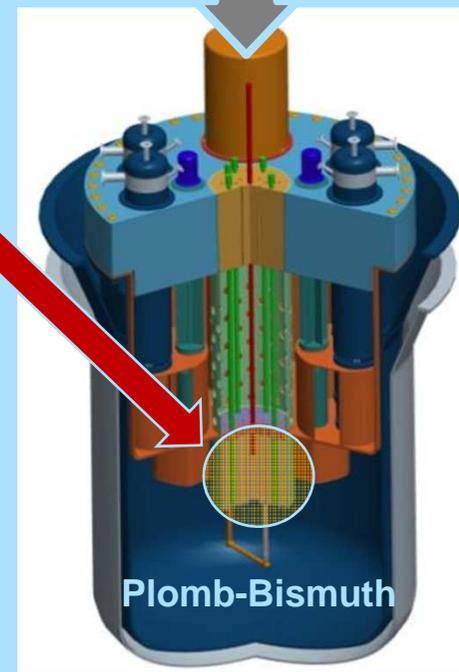
- modes d'opération:
sous-critique ou critique
- 65 à 100 MWth

Innovant & Unique

Source de spallation

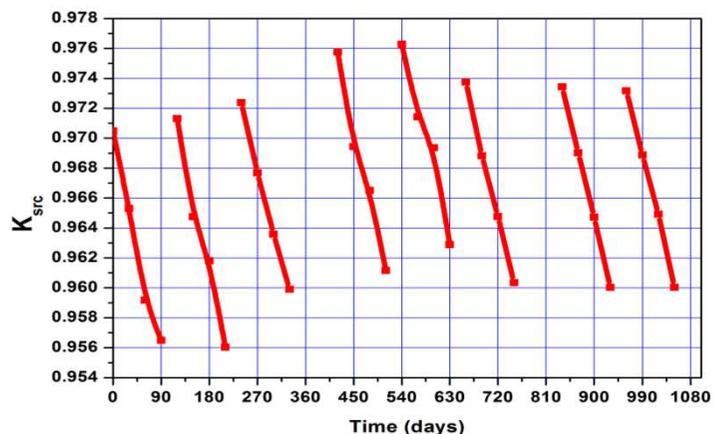
Source de neutrons rapides

**Polyvalent
Flexible
Irradiation**

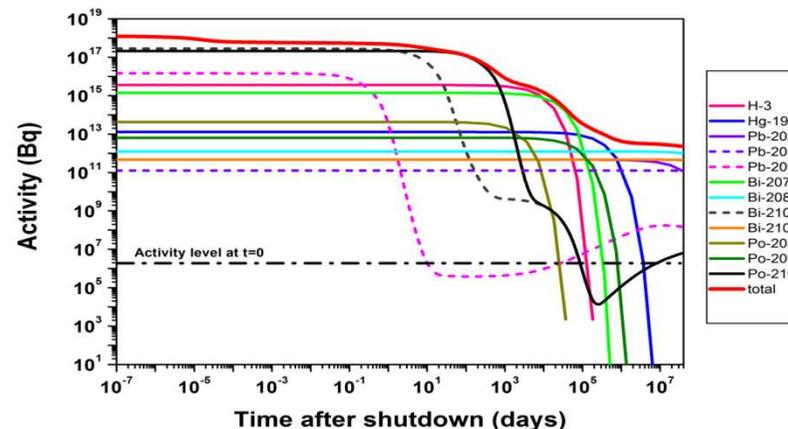


Calcul combiné de l'épuisement du cœur, de termes source et d'activation des matériaux de structure

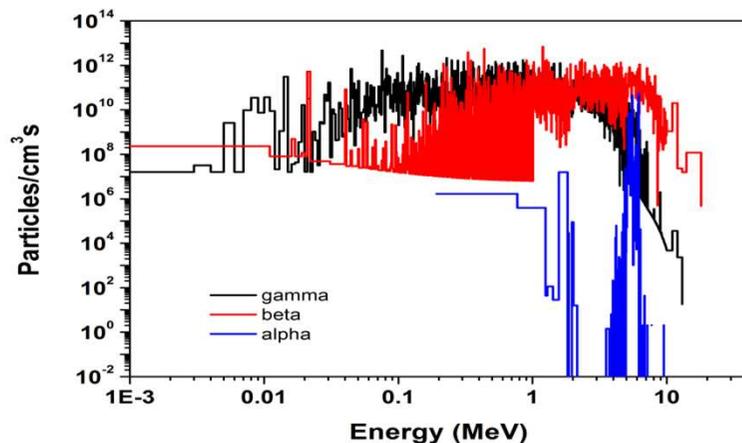
Epuisement du cœur



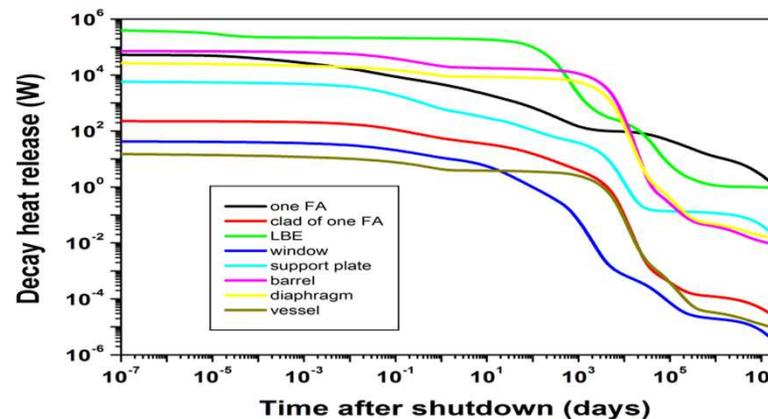
Activité de plomb-bismuth



Spectres alpha, beta, gamma



Echauffement des différents composants du réacteur



Les caractéristiques d'ALEPH :

- La consistance de jeux de données nucléaires à travers les modules d'ALEPH
- Haute précision du solveur du calcul d'épuisement
- Facilité d'utilisation
- Flexibilité et polyvalence:
 - Irradiation du combustible dans le réacteur à puissance donnée;
 - Irradiation du combustible ou de matériaux de structure à flux de neutrons donné;
 - Analyse post-irradiation (gestion des déchets);
 - Problèmes complexes tels que ADS MYRRHA (développé au SCK • CEN): calcul combiné de l'épuisement du cœur, de termes source et d'activation des matériaux de structure!!!

Copyright © 2014 - SCK•CEN

PLEASE NOTE!

This presentation contains data, information and formats for dedicated use ONLY and may not be copied, distributed or cited without the explicit permission of the SCK•CEN. If this has been obtained, please reference it as a "personal communication. By courtesy of SCK•CEN".

SCK•CEN

Studiecentrum voor Kernenergie
Centre d'Etude de l'Energie Nucléaire
Belgian Nuclear Research Centre

Stichting van Openbaar Nut
Fondation d'Utilité Publique
Foundation of Public Utility

Registered Office: Avenue Herrmann-Debrouxlaan 40 – BE-1160 BRUSSELS
Operational Office: Boeretang 200 – BE-2400 MOL



STUDIECENTRUM VOOR KERNENERGIE
CENTRE D'ETUDE DE L'ENERGIE NUCLEAIRE