





RAPPORT DE PROJET DE FIN D'ÉTUDES École des applications militaires de l'énergie atomique

Contribution à la modélisation d'un mini cœur VVER dans l'environnement DRAGON5 et validation avec le code stochastique Serpent2

Projet réalisé par :

Le lieutenant de vaisseau Pierre Fontaine pierre3.fontaine@intradef.gouv.fr

L'enseigne de vaisseau de 1^{ère} classe Philippe Panisi philippe.panisi@intradef.gouv.fr

Sous le tutorat de :

Alain Hébert alain.hebert@polymtl.ca

Septembre 2024



REMERCIEMENTS

Nous souhaitons témoigner notre reconnaissance envers l'ensemble des personnes ayant contribué à la réalisation de ce projet de fin d'études.

Tout d'abord, nous tenons à remercier Alain Hébert, professeur de neutronique à l'Ecole Polytechnique de Montréal et directeur de notre projet pour sa disponibilité et son aide tant technique que scientifique lors de la période passée à Montréal.

Nous souhaitons exprimer notre gratitude envers l'ensemble des cadres de l'EAMEA, civils et militaires, pour nous avoir, d'une part, fourni les connaissances requises pour mener à bien cette étude et, d'autre part, accordé leur confiance pour ce projet.

Ensuite, nous tenons à reconnaître le travail conséquent réalisé dans le cadre de ce projet par notre collègue de recherche, Nicolas Weisse, durant cinq des six mois du projet. Son travail de topologie sur les fichiers ALAMOS aura permis de concevoir la géométrie, élément indispensable dans l'exécution des calculs sur mini coeur dans Dragon5.

Nous tenons à remercier Raphaël Guasch, étudiant également sous le tutorat du professeur Alain Hébert, pour avoir partagé ses connaissances dans le domaine de la neutronique et des codes de calcul Dragon5 et Serpent2. Différentes difficultés ont été surmontées, notamment celles rencontrées avec la librairie PyNjoy2016 grâce à son aide.

Nous soulignons également la disponibilité des lieutenants de vaisseau Lucas Fede et Mathias François, nos prédécesseurs dans ce projet qui nous ont permis d'aborder plus sereinement cette étude en assurant une véritable continuité dans les travaux.

Enfin, nous remercions notre collègue de laboratoire Ivan Trancart, pour sa disponibilité quotidienne et son aide précieuse dans la réponse à nos diverses questions.

RÉSUMÉ

Bien que principalement composé de Réacteurs à Eau sous Pression (REP), le parc nucléaire européen comporte également des réacteurs de type Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor (VVER) de conception soviétique, concentrés en Europe de l'Est. À l'instar des REP, les réacteurs VVER déjà en fonctionnement sont destinés à dépasser leur durée de vie prévisionnelle; de nouveaux réacteurs du même type, dont les projets ont été annoncés, devraient venir s'y ajouter. Le marché ainsi constitué étant essentiellement occupé par la Russie, l'Agence d'Approvisionnement Euratom (ESA) identifie comme préoccupant l'exclusivité d'un seul fournisseur russe pour ces technologies.

La volonté de mettre fin à ce monopole en développant des capacités alternatives de simulation numérique et de connaissances sur les VVER a donné naissance au projet Codes And Methods Improvements for VVER comprehensive safety assessment (CAMIVVER), initié en 2020 et dirigé par Framatome. Ce projet vise à développer les connaissances européennes sur les VVER tout en améliorant la sûreté de ces réacteurs. Le projet CAMIVVER veut utiliser des méthodologies déterministes multidisciplinaires pour décrire l'interaction entre la neutronique et la thermohydraulique, et valider ces résultats à l'aide de méthodes stochastiques telles que Monte Carlo. En 2023, l'École Polytechnique de Montréal (EPM) lance le projet POLYVVER dont l'objectif principal est de déterminer si les calculs de neutronique du projet CAMIVVER peuvent être réalisés à l'aide de son code de réseau déterministe open-source : DRAGON5.

Ce projet s'inscrit dans la continuité de la validation du code DRAGON5 sur des cellules et assemblages VVER, à l'aide du code stochastique Serpent2, réalisée l'année précédente. L'objectif de la présente étude suit la même logique en se confrontant cette fois-ci à l'élaboration d'un schéma de calcul mini cœur sur DRAGON5.

Dans un premier temps, des travaux d'optimisation des assemblages, précurseurs à ceux réalisés sur le mini cœur, ont été conduits. Un changement de bibliothèque pour les sections efficaces a été réalisé au niveau de Serpent2. Cette nouvelle bibliothèque a pour objectif d'employer un modèle plus complet et plus cohérent avec la bibliothèque de Draglib de DRAGON5 pour mieux prendre en compte, spatialement et énergétiquement, l'énergie déposée suite aux réactions de capture neutronique favorisées par la présence d'isotopes du gadolinium. Cependant, cette nouvelle bibliothèque ne répond pas aux attentes et les erreurs mesurées sur les assemblages ne sont pas corrigées voire dégradées pour certains isotopes. La dilution, visant à modéliser des géométries natives DRAGON5 plus proches de la réalité, a également été expérimentée. Les résultats obtenus montrent un gain de précision sur les captures neutronique dans le groupe thermique sans pour autant généraliser ce gain aux autres types de réaction. La plus-value de la dilution reste alors anecdotique, suivant le contexte d'étude considéré.

Partant des travaux réalisés sur les assemblages, le schéma de calcul hybride a été adapté au mini cœur : l'autoprotection est réalisée par assemblage constituant le mini cœur, sur géométrie native DRAGON5, et le calcul de flux à un seul niveau est quant à lui réalisé sur une géométrie type ALAMOS. La première étude, réalisée à épuisement nul, a mis en évidence une répartition des erreurs suggérant la présence d'un biais physique au sein du schéma de calcul développé dans ce projet. Une deuxième étude, menée sur quelques pas d'épuisements démontre quant à elle la fonctionnalité du présent schéma en évolution. Enfin, les résultats ainsi obtenus permettent d'apprécier la limite et les points faibles du schéma de calcul, incitant alors des pistes d'amélioration, comme l'élaboration d'un schéma REL2005 mini cœur.

ABSTRACT

Although primarily composed of Pressurized Water Reactors (PWR), the European nuclear fleet also includes Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor (VVER) type reactors of Soviet design, concentrated in Eastern Europe. Like PWRs, the existing VVER reactors are expected to exceed their predicted lifespan, and new reactors of the same type, with announced projects, are expected to be added. The market thus constituted is predominantly occupied by Russia, and the Euratom Supply Agency (ESA) identifies the exclusivity of a single Russian supplier for these technologies as a cause for concern.

The desire to end this monopoly by developing alternative digital simulation capabilities and expertise on VVERs led to the creation of the Codes And Methods Improvements for VVER comprehensive safety assessment (CAMIVVER) project, initiated in 2020 and led by Framatome. This project aims to enhance European knowledge on VVERs while improving the safety of these reactors.

The CAMIVVER project aims to use multidisciplinary deterministic methodologies to describe the interaction between neutronics and thermal-hydraulics and validate these results using stochastic methods such as Monte Carlo. In 2023, the École Polytechnique de Montréal (EPM) launched the POLYVVER project, whose primary objective is to determine whether the neutronics calculations from the CAMIVVER project can be performed using its open-source deterministic lattice code : DRAGON5.

Initially, optimization work on the assemblies, precursors to those carried out on the mini core, was conducted. A change in the library for cross-sections was made at the Serpent2 level. This new library aims to use a more complete and consistent model with the Draglib library of DRAGON5 to better account for, spatially and energetically, the energy deposited following neutron capture reactions favored by the presence of gadolinium isotopes. However, this new library did not meet expectations, and the errors measured on the assemblies were not corrected and even worsened for certain isotopes. Dilution, aimed at modeling DRAGON5 native geometries closer to reality, was also tested. The results show an increase in accuracy for neutron capture in the thermal group, without generalizing this gain to other types of reactions. Thus, the benefit of dilution remains anecdotal, depending on the context of the study.

Building on the work carried out on the assemblies, the hybrid calculation scheme was adapted to the mini core : self-shielding is performed for each assembly constituting the mini core, on DRAGON5 native geometry, and the single-level flux calculation is performed on an ALAMOStype geometry. The first study, carried out with zero depletion, highlighted an error distribution suggesting the presence of a physical bias within the calculation scheme developed in this project. A second study, conducted over a few depletion steps, demonstrated the functionality of the current evolving scheme. Finally, the results obtained allow us to appreciate the limitations and weaknesses of the calculation scheme, prompting avenues for improvement, such as the development of a REL2005 mini core scheme.

Table des matières

R	EME	RCIEMENTS	i
R	ÉSU	MÉ	ii
A	BST	RACT	iii
T	ABLI	E DES MATIÈRES	ix
T	ABLI	E DES FIGURES	ix
T.	ABLI	E DES TABLES	ix
T.	ABLI	E DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	x
1	INT	TRODUCTION	1
	1.1	Le projet CAMIVVER	1
	1.2	Contribution de Polytechnique Montréal	2
	1.3	Notre etude	2
2	DO	MAINE D'ÉTUDE	3
	2.1	Introduction	3
	2.2	Codes de calcul	3
		2.2.1 Serpent2	3
		2.2.2 Dragon5	3
		2.2.3 Serveurs de calculs	3
	2.3	Présentation cellules et assemblages	4
		2.3.1 Description des cellules	4
		2.3.2 Description des assemblages	6
		2.3.3 Particularité des stiffeners	8
	2.4	Le mini coeur	8
		2.4.1 Description	8
		2.4.2 Concentration en bore	8
	2.5	Conclusion partielle	8
3	OP'	TIMISATION DES ASSEMBLAGES	10
	3.1	Introduction	10
	3.2	Prise en main et validation des assemblages	10
		3.2.1 Présentation des assemblages d'études	10
		3.2.2 Schéma de calcul DRAGON5	11
		3.2.3 Grandeurs globales	13
		3.2.3.1 Assemblage 390GO	13
		3.2.3.2 Assemblage 30AV5	15
		3.2.3.3 Synthèse	17
		3.2.4 Grandeurs locales	17
		3.2.4.1 Assemblage 390GO	18
		3.2.4.2 Assemblage 30AV5	19

		$3.2.4.3$ Synthèse \ldots 20)
	3.3	Changement de bibliothèque sur Serpent2)
		3.3.1 Objectif et réalisation)
		3.3.2 Analyse des résultats sur une cellule	1
		3.3.3 Analyse des résultats sur un assemblage	3
		3.3.4 Synthèse des résultats sur le changement de bibliothèque 24	1
	3.4	Dilution sur Dragon5	5
		3.4.1 Expression du besoin	5
		3.4.2 Principe physique	5
		3.4.3 Réalisation dans Dragon5	3
		3.4.4 Résultats	7
		3.4.4.1 L'expérimentation : assemblage 40AU	7
		3.4.4.2 L'exploitation : assemblage 390GO	7
		3.4.5 Bilan de la dilution	3
	3.5	Conclusion partielle	9
4	ÉTU	UDE DU MINI COEUR 30)
	4.1	Introduction)
	4.2	Choix et évolution du mini coeur	1
		4.2.1 Le développement	1
		4.2.2 L'exploitation	1
	4.3	Parallélisation	2
		4.3.1 Diviser pour mieux régner	2
		4.3.2 Principe de fonctionnement	3
		4.3.3 Application à DRAGON5 et Serpent2 34	4
		4.3.4 Les limites de la parallélisation	4
	4.4	Schéma de calcul D5	5
		4.4.1 Itérations et convergence vers un schéma de calcul	5
		4.4.2 Bibliothèques et raccordement des géométries	7
		4.4.3 Autoprotection et géométries natives	3
		4.4.4 Calcul de flux)
		4.4.5 Bilan du schéma	2
	4.5	Dimensionalité 42	2
	4.6	Schéma de calcul Serpent2	4
	1.0	4 6 1 Paramètres de calculs Serpent2	4
		4.6.2 Représentation du mini coeur	5
		4.6.2 Modification des pas d'évolution	6
		4.6.4 Les croix de contrôles	6
		4.6.5 Influence des paramètres de simulations sur le temps de calcul	7
	47	Analyza dog régultate	7
	4.1	4.71 Étude stationnaire à équisement nul	2
		$4.7.1$ Didde stationnane a epuisement nu $\dots \dots \dots$	2
		$4.7.1.1$ Les grandeurs grobales \dots 40	ູ
		4.7.1.2 Grandeurs locales	5
		4.7.1.5 Farametres de tracking et impact sur la precision	ן 7
	18	Conclusion partialle	n D
	4.0		1
5	AV	ENIRS DU PROJET 61	1
	5.1	Livrables assemblage et mini coeur	1
		5.1.1 Mise à jour du livrable assemblage	1
		5.1.2 Création du livrable mini coeur	1
	5.2	Axes d'approfondissement	2
		5.2.1 Géométrie mini cœur MoC	2
		5.2.2 Géométrie native raffinée et autoprotection	3
		5.2.3 Recherche sur les sources d'erreurs en début d'évolution	4
		5.2.4 Optimum de parallélisation	4
			-

		5.2.5 Étude en évolution complète mini coeur sur DRAGON5	65
	53	Futur du projet	65
	0.0	5.3.1 Étude d'insertion de graix de contrôle sous DRACON5	65
		5.3.1 Etude d'insertion de cloix de controle sous DIAGOND	60
		5.3.2 Moth elementaire ALAMOS	00
		5.3.3 Schema REL2005 pour mini coeur	67
		5.3.4 Etude de cœur complet	67
	5.4	Conclusion partielle	68
6	CO	NCLUSION	69
	6.1	Reprise du projet	69
	6.2	Un saut d'échelle	70
	6.3	Interprétation des résultats	70
	6.4	Une étude qui appelle une suite	71
	0.1		
A	ÉTU	UDE DU POIDS DES CROIX DE CONTRÔLE SUR SERPENT2	72
	A.1	Croix de contrôle en carbure de bore	72
		A.1.1 Présentation des résultats	72
		A.1.2 Analyse physique	73
	A.2	Croix de contrôle en titanate de dysprosium	75
	Δ 3	Synthèse des résultats	75
	11.0	Synthese des resultats	10
B	BLI	OGRAPHIE	78

Table des figures

2.1	Géométrie d'une cellule KML2
2.2	Géométrie d'une cellule KML2 dans un assemblage
2.3	Tube guide
2.4	Tube d'instrumentation.
2.5	Assemblage KML2 22AU
2.6	Assemblage KML2 40AU
2.7	Assemblage KML2 398GO
2.8	Assemblage KML2 39AWU
2.9	Stiffeners
3.1	Assemblage KML2 390GO
3.2	Assemblage KML2 30AV5 11
3.3	Architecture du schéma REL 2005
3.4	Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj/t
3.5	Évolution du Δk_{eff} de 0 à 60 GWj/t
3.6	Évolution de $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t
3.7	Évolution de l'erreur relative sur le $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t
3.8	Évolution de $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWj/t
3.9	Évolution de l'erreur relative sur le $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWj/t
3.10	Évolution de $\begin{bmatrix} 157 Gd \end{bmatrix}$ de 0 à 60 GWj/t
3.11	Évolution de l'erreur relative sur le $[^{157}Gd]$ de 0 à 60 GWj/t
3.12	Évolution de $\begin{bmatrix} 135 \\ Xe \end{bmatrix}$ de 0 à 60 GWi/t
3.13	Évolution de l'erreur relative sur le $[^{135}Xe]$ de 0 à 60 GWj/t
3.14	Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWi/t. 15
3.15	Évolution du Δk_{eff} de 0 à 60 GW_j/t

3.16	Évolution de $\begin{bmatrix} 235 \\ U \end{bmatrix}$ de 0 à 60 GWj/t
3.17	Évolution de l'erreur relative sur le $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t
3.18	Évolution de $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWi/t. 1
3 19	Évolution de l'erreur relative sur le $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWi/t 1
3 20	Évolution de l ¹⁵⁷ Gd de 0 à 60 GWi/t
2.01	Evolution de l'errour relative sur le $[^{157}Cd]$ de 0 à 60 CWi/t
0.21	Evolution de l'effeur felative sur le $\begin{bmatrix} 1 & Ga \end{bmatrix}$ de 0 à 00 Gw j/t
3.22	Evolution de $\begin{bmatrix} 100 & X & e \end{bmatrix}$ de 0 a 60 GW J/t 1
3.23	Evolution de l'erreur relative sur le $[^{133}Xe]$ de 0 à 60 GWj/t
3.24	Distribution des $\tau_{f,2,BU_0}$ D5-S2 390GO
3.25	Distribution des $\tau_{f,2,BU_{60}}$ D5-S2 390GO
3.26	Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 390GO
3.27	Distribution des τ_{c1} _{BUcc} D5-S2 390GO.
3 28	Distribution des $\tau_{c,a,BU_{60}}$ D5-S2 30AV5
3.20	Distribution des $\tau_{f,2,BU_0}$ D5-52 30AV5
0.29	Distribution des $T_{f,2,BU_{60}}$ DJ-SZ JOAV 5
3.30	Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-52 30AV5
3.31	Distribution des $\tau_{c,1,BU_{60}}$ D5-S2 30AV5
3.32	Écart relatif sur la cellule pour le ${}^{155}Gd$
3.33	Écart relatif sur la cellule pour le ${}^{157}Gd$
3.34	Écart relatif sur la cellule pour le k_{eff}
3.35	Écart relatif sur la cellule pour le 149 Sm
3 36	Écart relatif sur la cellule pour le ^{241}Py
3 37	Écart relatif sur la collule pour le ^{235}U
0.07	Exact relatified in the centre pour le 0
3.38	Ecart relatif sur l'assemblage pour le ^{100}Ga
3.39	Ecart relatif sur l'assemblage pour le ${}^{10}Gd$
3.40	Ecart relatif sur l'assemblage pour le k_{eff}
3.41	Écart relatif sur l'assemblage pour le ${}^{149}Sm$
3.42	Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{241}Pu
3.43	Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{235}U
3.44	Géométrie d'assemblage Serpent2 avec stiffeners.
3 45	Géométrie d'assemblage Dragon5 sans stiffeners
3.46	Beprésentation des volumes de dilution
9.40	Distribution des – DE C2 40 AU
0.41	Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D3-52 40AU.
3.48	Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 40AU dilue
3.49	Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 390GO dilué
3.50	Distribution des $\tau_{c,1,BU_{60}}$ D5-S2 390 dilué
4.1	Mini coeur sans réflecteur issu de Serpent2
4.2	Mini coeur issu de Serpent2
4.3	Parallélisation d'une tâche
4.4	Architecture à mémoire partagée.
4.5	Schéma mini coeur DRAGON5 initial
1.0	Schéma mini coeur DRACON5 sans autoprotection
4.0	Architesture du achérea mini acour DDACONE
4.7	Arcintecture du scienta mini coeur DRAGONO
4.8	Geometrie native initiale 390GO
4.9	Géométrie native initiale 30AV5
4.10	Géométrie native finale 390GO
4.11	Géométrie native finale 30AV5
4.12	Géométrie ALAMOS 390GO
4.13	Géométrie ALAMOS 30AV5
4.14	Mini coeur du KIT avec réflecteur tronqué et discrétisation du réflecteur [7] 4
4 15	Arborescence de la MULTICOMPO
4.10	Motif álámantaire du mini acour sens réflecteur
4.10	The set of the s
4.17	Leart relatifier les taux de capture radiative dans le groupe thermique 4
4.18	Ecart relatif sur les taux de capture radiative dans le groupe rapide 5
4.19	Ecart relatif sur les taux de fission dans le groupe thermique
1 00	

Distribution des écarts relatifs sur les taux de fission à deux groupes
Distribution des écarts relatifs sur les taux d'absorption à deux groupes 54
Distribution des écarts relatifs sur les taux de fission thermique avec 36 angles 56
Évolution du k_{eff} de 0 à 1000 MWj/t
Évolution du Δk_{eff} de 0 à 1000 MWj/t
Évolution de $\begin{bmatrix} 235U \end{bmatrix}$ de 0 à 1000 MWj/t
Évolution de l'erreur relative sur le ^{235}U de 0 à 1000 MWj/t
Évolution de $[^{239}Pu]$ de 0 à 1000 MWj/t
Évolution de l'erreur relative sur le ^{239}Pu de 0 à 1000 MWj/t
Évolution de $[^{157}Gd]$ de 0 à 1000 MWj/t
Évolution de l'erreur relative sur le ${}^{157}Gd$ de 0 à 1000 MWj/t
Géométrie mini coeur MoC agrandie
Schéma de calcul mini coeur avec insertion de croix de contrôle
Architecture REL2005 mini coeur DRAGON5 67
Évolution du k_{eff} avec réflecteur et croix en B_4C
Écart en réactivité Δk_{eff} avec réflecteur et croix en B_4C
Flux neutronique avec réflecteur et croix en B_4C insérées
Écart en réactivité Δk_{eff} avec réflecteur et croix en DyO_3

Liste des tableaux

tation.	4 5 6 6 8
tation	5 5 6 8 17
e KML2	5 6 8 17
e KML2	6 6 8
férence	6 8 17
ges 390GO et 30AV5	8 17
ges 390GO et 30AV5	17
	- 1
$ O et 30 AV5. \dots \dots$	20
s locales sur les assemblages 390GO	
	24
ur les assemblages 40AU et 390GO.	28
	38
	A2
	-14
	43
	43 44
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	43 44 46
••••••••••••••••••••••••••••••••••••••	43 44 46 47
t	43 44 46 47 47
t	43 44 46 47 47 48
t	42 43 44 46 47 47 48 49
t	43 44 46 47 47 48 49 51
t	42 43 44 46 47 47 48 49 51 52
t	42 43 44 46 47 47 47 48 49 51 52 53
ir 01	urs locales sur les assemblages 390GO our les assemblages 40AU et 390GO.

4.14	Grandeurs d'intérêts sur les taux d'absorption à deux groupes.	55
4.15	Comparaison des paramètres de tracking par rapport à la référence pour les taux de	
	fission thermique.	56
4.16	Comparaison des paramètres de tracking par rapport à la référence pour les taux de capture radiative rapide.	56
4.17	Liste des pas d'épuisement pour l'étude en évolution en $GWj/t.$	57
A.1	Écart en réactivité lors de l'insertion des croix de contrôle	76

Table des sigles et abréviations

AIEA	Agence Internationale de l'Énergie Atomique
$\mathbf{CAMIVVER} \ \ \mathbf{Codes} \ \ \mathbf{And} \ \ \mathbf{Methods} \ \ \mathbf{Improvements} \ \ \mathbf{for} \ \ \mathbf{VVER} \ \ \mathbf{Comprehensive} \ \ \mathbf{Safety} \ .$	
CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives
D5 Dragon5	
ESA	Agence d'Approvisionnement Euratom
EAMEA	École des Applications Militaires de l'Énergie Atomique
EPM	École Polytechnique de Montréal
\mathbf{Gd}	Gadolinium
KIT	Karlsruhe Institute of Technology
KML2	Khmelnitsky-2
KEFF	Coefficient de multiplication effectif
MoC	Method of Characteristics
N_i	Concentrations isotopiques
P_{ij}	Méthode des probabilités de première collision
pcm	Pour cent mille
REP	Réacteur à Eau sous Pression
S2	Serpent2
UOx	Oxyde d'Uranium
VVER	Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor

Chapitre 1 INTRODUCTION

Depuis le début du conflit russo-ukrainien en février 2022, la question de la sécurité énergétique de l'Europe est devenue une préoccupation majeure, illustrée en particulier par les VVER. Ces réacteurs, de conception soviétique, occupent une partie du paysage de l'Europe de l'Est et constituent pour certains pays l'ensemble de leur production d'énergie d'origine nucléaire. Plusieurs pays européens ont des accords avec ROSATOM, la société russe d'énergie nucléaire, pour la construction et l'exploitation des centrales nucléaires sur leur territoire. Cependant, l'offensive russe a remis en question la fiabilité de ces partenariats. En effet, certains réacteurs sont situés dans des pays frontaliers de l'Ukraine et/ou utilisent des combustibles nucléaires fournis par la Russie. La crise en Ukraine a soulevé des préoccupations concernant la sécurité des installations nucléaires dans la région : la centrale de Zaporijia, sous contrôle de la Russie depuis plus de deux ans, qui a subi des attaques de drones le 7 avril 2024 en est l'exemple. L'Agence Internationale de l'Energie Atomique (AIEA), a condamné ces actes et affirme que le prochain accident nucléaire approche. La question de la dépendance de l'Europe à l'égard de la technologie nucléaire russe est devenue un sujet de débat suscitant diverses réactions de la part des nombreux pays dotés ou souhaitant se doter de VVER. Ainsi, certains pays cherchent à diversifier leurs sources d'approvisionnement en énergie et combustible nucléaires, tandis que d'autres continuent de commercer avec la Russie.

1.1 Le projet CAMIVVER

C'est dans ce contexte que naît le projet CAMIVVER le 1^{er} septembre 2020 pour une durée de trois ans. Issu d'un consortium composé de 7 partenaires de 5 pays sous la coordination de Framatome en France, il mobilise à la fois l'industrie, des organismes de recherche et des universités. Ces acteurs possèdent, outre une forte culture de sûreté, une solide expérience dans la conception et l'exploitation des réacteurs de génération II et III, apportant ainsi une expertise précieuse dans le développement et la validation de codes et méthodes de calcul. Le parc nucléaire européen est composé de réacteurs de génération II et III dont environ 70% de types REP, le reste étant couvert par les types BWR, AGR et VVER, à hauteur de 10% pour ces derniers. Les VVER constituent donc une composante non négligeable du parc européen, en particulier pour les pays qui s'appuient sur cette technologie pour leur approvisionnement en énergie électrique.

Sachant que la durée de vie opérationnelle des réacteurs du type VVER peut être prolongée jusqu'à 60 ans, il est envisageable que ceux-ci continuent à occuper une place dans le paysage nucléaire européen à long terme, considérant également les réacteurs de ce type en construction ou annoncés. Dans le but de favoriser le développement, la qualification des combustibles et de fournir les éléments requis pour le rapport de sûreté; le développement, l'amélioration, la vérification et la validation des codes et méthodes utilisées vont occuper une place importante dans l'analyse de sûreté des VVER. La mise à jour continue des codes et des méthodes nécessaires pour répondre aux exigences réglementaires des réacteurs sujets à des mises à niveau à long terme est le fondement de la proposition du projet CAMIVVER.

1.2 Contribution de Polytechnique Montréal

Le projet CAMIVVER compte utiliser des méthodologies déterministes multidisciplinaires pour décrire l'interaction entre la neutronique et la thermohydraulique et valider ces résultats à l'aide de méthodes stochastiques telles que Monte Carlo. Cependant, pour rendre accessible au plus grand nombre ces outils de calcul, il est parfois nécessaire d'acquérir des licences ou des droits d'utilisation sur certains codes, en neutronique notamment. Posséder ces outils permettrait aux exploitants de réacteurs de type VVER d'être plus autonomes au niveau de l'exploitation et de l'analyse de sûreté de leurs réacteurs.

En 2023, l'EPM lance le projet POLYVVER dont l'objectif principal est de déterminer si des calculs de neutronique sur les réacteurs de type VVER-1000 peuvent être réalisés à l'aide de son code de réseau déterministe open-source : DRAGON5 avec une validation par le code stochastique Serpent2. Après une validation du code DRAGON5 sur des cellules et des assemblages du projet CAMIVVER, il est maintenant question de se pencher sur un mini-cœur, étape intermédiaire avant le calcul de cœur entier.

1.3 Notre étude

L'objectif de cette étude est d'étudier la faisabilité d'un outil de calcul sur mini coeur et identifier les performances et problématiques liées au calcul numérique. Pour y parvenir, un mini coeur a été implémenté dans le code Serpent2 puis évalué, afin de servir de référence au code déterministe DRAGON5. Après une validation à l'échelle de la cellule et de l'assemblage, des travaux de combinaison des assemblages du projet CAMIVVER ont eu lieu pour créer un schéma de calcul mini coeur. La finalité du projet est l'ajout de programmes au livrable Python [8] créé en 2023 dont le but est de fournir aux exploitants un outil de calcul de mini coeur par le code déterministe DRAGON5.

Ce rapport présente uniquement les résultats permettant de mettre en exergue les conclusions issues des recherches conduites durant le stage. Toutefois, l'ensemble des résultats obtenus et des figures tracées au cours du projet sont accessibles sur la page de l'EPM [5].

Chapitre 2 DOMAINE D'ÉTUDE

2.1 Introduction

Ce chapitre présente la démarche utilisée pour la création du mini coeur à partir des cellules et assemblages d'étude afin de valider les calculs effectués avec DRAGON5. Comme évoqué dans la section 1.3, les calculs seront réalisés en deux temps : d'abord sur les assemblages puis sur le mini coeur. Travailler sur les assemblages constitue donc une étape intermédiaire permettant de réaliser de potentiels ajustements avant de passer à un calcul plus lourd sur le mini coeur.

2.2 Codes de calcul

2.2.1 Serpent2

Le code stochastique Serpent2 est un code tridimensionnel de transport de neutrons et de photons, continu en énergie, développé au Centre de recherche technique VTT de Finlande depuis 2012. Cette année l'EPM s'est dotée de nouveaux serveurs de calculs présentés en section 2.2.3 . Cette acquisition offre la possibilité de paralléliser le calcul, c'est-à-dire d'effectuer les calculs sur plusieurs processeurs, ce qui permet un gain de temps précieux sur la réalisation de ce projet sans pour autant dégrader la très grande précision des résultats obtenus. En effet, la parallélisation permet d'effectuer le suivi individuel des neutrons caractéristique de la méthode de Monte Carlo sur plusieurs processeurs ce qui permet un gain de temps conséquent sur le procédé. Ainsi, les calculs stochastiques ont pu être effectués à l'échelle de quelques heures voire quelques jours et non quelques semaines à quelques mois, permettant ainsi de pouvoir lancer de nombreuses simulations sans attendre que le premier calcul d'échelle soit réalisé sur le mini coeur.

2.2.2 Dragon5

Le code déterministe DRAGON5 est un code de transport open-source développé et maintenu par l'EPM depuis 2014 dont la fonction principale est l'analyse des phénomènes neutroniques se déroulant au sein d'une cellule, d'un assemblage, voire d'un mini coeur. Constitué de modules s'organisant en un ensemble cohérent à l'aide du langage CLE2000, le code de calcul Dragon5 offre une grande flexibilité dans la résolution; aussi bien dans la méthode utilisée (MoC, P_{ij}) que dans l'optimisation du temps de calcul et des paramètres retenus pour le post-traitement. Le calcul de flux neutronique par les méthodes MoC et P_{ij} a été parallélisé par l'équipe de développement du code pendant cette étude.

2.2.3 Serveurs de calculs

Peu de temps avant le début du projet, l'EPM a fait l'acquisition de deux nouveaux serveurs, plus performants, qui ont été les supports de nos recherches. Leurs caractéristiques sont présentées dans le tableau 2.1 ci-dessous.

Corpetáristiques	Serveur		
Caracteristiques	Planck	Bateman	
Nom	planck.recherche.polymtl.ca	bateman.recherche.polymtl.ca	
	Système d'exploitation		
Version	20.04.6 LTS	(Focal Fossa)	
Matériel	aarch64		
Machine	aarch64		
Distribution	Ubuntu		
Version	20.04		
Nom code	focal		
	Processeur et mémoire		
Modèle CPU	Neoverse-N1		
CPU MHz	3000.0000		
Nombre de processeur	256		
Mémoire totale	2.0 То		

TABLE 2.1 – Caractéristiques des serveurs Planck et Bateman.

Présentation cellules et assemblages $\mathbf{2.3}$

Cette étude s'inscrit dans le projet CAMIVVER et dans la continuité des travaux menés l'année précédente [2]. Ainsi, les assemblages et cellules modélisés proviennent du réacteur Khmelnitski-2 (KML2), qui est le deuxième réacteur de la centrale nucléaire de Khmelnitski, située à Netichyn, en Ukraine. Les assemblages et les cellules présentent une géométrie hexagonale.

2.3.1Description des cellules

Il existe trois types de cellules au sein des assemblages :

- les cellules combustibles;
- les tubes guides;
- le tube d'instrumentation central.

Les données géométriques des cellules combustibles sont rassemblées dans le tableau 2.2 ci-dessous.

Caractéristique	Valeur
Pas du réseau (cm)	1.275
Rayon pastille combustible (mm)	3.785
Matériau pastille combustible	UO_2 ou $UO_2 + Gd_2O_3$
Rayon trou central (mm)	0.750
Matériau trou central	Hélium
Rayon interne gaine (mm)	3.865
Rayon externe gaine (mm)	4.550
Matériau gaine	Alliage de zirconium E110
Matériau gap	Hélium

TABLE 2.2 – Caractéristiques du combustible nucléaire.

La cellule combustible est représentée sur la figure 2.1 à l'aide de la légende suivante, utilisée pour les figures 2.1 à 2.4:



: Hélium







FIGURE 2.1 – Géométrie d'une cellule KML2.

FIGURE 2.2 – Géométrie d'une cellule KML2 dans un assemblage.

Pour réduire le temps de calcul une fois passé à l'assemblage, le choix a été fait de supprimer l'espace d'hélium entre le combustible et la gaine, comme l'illustre la figure 2.2.

Les caractéristiques pour les tubes guide et d'instrumentation central sont présentées dans le tableau 2.3 suivant :

Caractéristique	Tube guide	Tube d'instrumentation
Rayon interne gaine (mm)	5.450	$\frac{5.500}{5.350}$
Rayon externe gaine (mm)	6.300	$\frac{6.500}{6.374}$
Matériau gaine	Alliage zirconium E635	Alliage zirconium E635

TABLE 2.3 – Caractéristiques des tubes guide et d'instrumentation.

Les figures 2.3 et 2.4 représentent les tubes guides et d'instrumentation central. Le rayon initial du tube d'instrumentation central est supérieur au rayon du cercle inscrit dans la cellule. DRAGON5 ne pouvant cependant pas simuler une telle géométrie, il a été décidé de fixer le rayon du tube central égal à celui du cercle inscrit dans la cellule hexagonale tout en conservant le rapport ce modération; ce qui correspond aux valeurs dans la dernière colonne du tableau 2.3.

Le tableau 2.4 recense les différentes cellules de référence associées à leur enrichissement en ^{235}U et leur teneur en Gd_2O_3 :

Nom de cellule	Enrichissement en ^{235}U	w% en Gd_2O_3	
22AU_22UOx	2.2%	Ø	
40AU_40UOx	4.0%	Ø	
39AWU_40UOx	4.0%	Ø	
398GO_40UOx	4.070		
39AWU_36UOx	3.6%	Ø	
39AWU_33Gd	3 30%	5.0%	
398GO_33Gd	3.370	5.070	

TABLE 2.4 – Caractéristiques des cellules de référence.



FIGURE 2.3 – Tube guide.



FIGURE 2.4 – Tube d'instrumentation.

2.3.2 Description des assemblages

Les assemblages peuvent être composés :

- de cellules UOx avec une seule valeur d'enrichissement en ^{235}U ;
- de cellules UOx avec des valeurs d'enrichissement en ^{235}U différentes pour limiter les fuites neutroniques et les pics de puissance aux limites des assemblages;
- de cellules UOx dites empoisonnées, contenant du Gd_2O_3 , pour abaisser la réactivité de l'assemblage sur la première partie de son irradiation en réacteur.

Le tableau 2.5 présente les caractéristiques géométriques des assemblages de référence KML2 :

Caractéristique	Valeur
Nombre de cellules combustible	312
Nombre de tube d'instrumentation central	1
Nombre de tubes guides	18
Pas du réseau (cm)	23.6
Largeur de l'assemblage (cm)	23.48

TABLE 2.5 – Caractéristiques des assemblages de référence de KML2.

Les assemblages de référence KML2 ont des compositions isotopiques différentes suivant les cellules qui les composent. Les différentes compositions isotopiques sont listées dans le tableau 2.6.

Assemblage	Cellules UO_2		Cellules $UO_2 + Gd_2O_3$			
	Nombre	$e_5 { m en} {}^{235}U$	Nombre	$e_5 { m en} {}^{235}U$	w% en Gd_2O_3	
22AU	312	2.2%	0	Ø	Ø	
40AU	312	4.0%	0	Ø	Ø	
398GO	306	4.0%	6	3.3%	5.0%	
39AWU	243	4.0%	0	3 30%	5.0%	
	60	3.6%	3	J.J /0	5.070	
30AV5	303	3.0%	9	2.4%	5.0%	
390GO	240	4.4%	6	3.6%	5.0%	
	66	4.0%		J.U /0		

TABLE 2.6 – Compositions isotopiques des assemblages de référence.

Les quatre assemblages d'études [2] sont représentés à l'aide du code Serpent2 sur les figures 2.5 à 2.8 suivantes :



FIGURE 2.5 – Assemblage KML2 22AU.



FIGURE 2.7 – Assemblage KML2 398GO.

FIGURE 2.6 – Assemblage KML2 40AU.



FIGURE 2.8 – Assemblage KML2 39AWU.

Ainsi, l'étude [2] a été réalisée à l'aide de

- deux assemblages sans gadolinium (les 22AU et 40AU) très homogènes ce qui simplifie les calculs;
- un assemblage avec deux enrichissements en UOx et du gadolinium (le 39AWU) qui représente le cas le plus complexe à étudier;
- un assemblage d'UOx avec un seul enrichessement en UOx et du gadolinium (le 398GO) qui se situe à un niveau médian de complexité par rapport aux précédents assemblages.

Les assemblages étudiés l'année précédente [2] ont permis de prendre en main le projet voire de tester certaines optimisations qui seront évoquées par la suite dans ce rapport. Les travaux de la présente étude portent sur les assemblages 390GO et 30AV5, constituants le mini coeur de référence, réalisé par le Karlsruhe Institute of Technology (KIT). Les modélisations et résultats de ces deux assemblages seront développés ultérieurement en section 3.2.

2.3.3 Particularité des stiffeners

Éléments caractéristiques des assemblages KML2, les stiffeners sont constitués de deux demiplaques latérales de renfort disposées sur chaque sommet de l'assemblage, comme représenté sur la figure 2.5, et composés d'un alliage de zirconium E635. La figure 2.9 illustre cette caractéristique, représentant la jonction entre trois assemblages au niveau des sommets séparés par ces deux demi-plaques.



FIGURE 2.9 - Stiffeners.

2.4 Le mini coeur

2.4.1 Description

Le mini coeur de référence est fourni par le KIT [7] et se compose d'un assemblage 30AV5 central, de six assemblages 390GO en périphérie avec des hexagones d'eau légère borée qui constituent le réflecteur autour de ces derniers. La concentration en bore sera abordée dans la section 2.4.2. Le mini coeur est représenté en figure 4.14 en section 4.4.4.

2.4.2 Concentration en bore

Afin de rester au plus proche du mini coeur de KIT [7], la concentration en bore du mini coeur est fixée à 403 ppm, ce qui donne les concentrations isotopiques du tableau suivant.

Modérateur			
Isotopes	densité atomique (at/cm^3)		
^{10}B	3.34487×10^{-6}		
^{11}B	1.35484×10^{-5}		
^{16}O	2.51494×10^{-2}		
^{1}H	5.02988×10^{-2}		

TABLE 2.7 – Densité atomique du modérateur.

2.5 Conclusion partielle

La présentation du domaine d'étude permet d'exposer l'ensemble des éléments implémentés dans les codes de calcul et de contextualiser cette étude, décomposée en deux temps. En premier lieu, le projet est ainsi axé sur les assemblages, selon une problématique d'optimisation et de précision dans l'optique de calculs plus lourds, réalisés dans un second temps, sur le mini coeur. Bien que la finalité de ce projet soit la modélisation d'un mini coeur, l'étude d'assemblages apparaît comme primordiale, constituant une étape intermédiaire permettant d'éluder de potentiels écueils sur une structure plus complexe, et assurer une continuité avec les travaux réalisés l'année précédente. De plus, les travaux de parallélisation des méthodes MoC et P_{ij} réalisés simultanément ont été validés lors de cette étude préliminaire.

Chapitre 3 OPTIMISATION DES ASSEM-BLAGES

3.1 Introduction

Comme évoqué précédemment, l'enjeu est dans un premier temps de s'approprier les travaux déjà réalisés pour assurer une continuité satisfaisante dans le projet. Au-delà de reproduire des calculs validés par le passé, l'objectif de cette prise en main est aussi de modéliser les assemblages 390GO et 30AV5, constituant le mini coeur objet de cette étude.

Cette familiarisation aura également conduit à l'exploration de pistes d'améliorations identifiées l'année précédente. Ainsi, deux axes d'optimisation : le changement de bibliothèque de sections efficaces de référence et la dilution des stiffeners et lames d'eau ont été étudiés.

Toujours dans un souci de continuité avec l'étude en référence [2], le code DRAGON5 sera validé par comparaison avec les résultats issus de Serpent2. Ainsi, les grandeurs globales : le coefficient de multiplication effectif (KEFF) k_{eff} et les concentrations isotopiques notées N_i , et les grandeurs locales : taux de fission et de capture radiative au sein des cellules, seront confrontées. Enfin, les calculs sont réalisés à l'aide de librairies constituées à partir de la bibliothèque de données nucléaires JEFF 3.1.1 et les seuils de validation des comparaisons entre les grandeurs globales et locales de DRAGON5 et de Serpent2 du document [2] ont été conservés et sont rappelés ci-dessous :

- valeur absolue de l'écart en réactivité : $|\Delta k_{\rm eff}| < 300~{\rm pcm}$
- valeur absolue de l'écart relatif sur les concentration isotopiques : $|\Delta N_i| < 2.0~\%$
- valeur absolue de l'écart relatif moyen : $|\Delta \tau_{i,moy}| < 1.0 \%$
- valeur absolue de l'écart relatif pour un assemblage Gd : $|\Delta \tau_{i,\text{max}}| < 4.0 \%$

3.2 Prise en main et validation des assemblages

Afin d'éviter toute redondance avec les travaux passés, les résultats issus des simulations réalisées sur les assemblages étudiés dans le document [2] ne seront pas détaillés ici. Il est simplement à noter que des résultats similaires ont été obtenus, confirmant ainsi des bases d'étude saines. Le développement ci-dessous se concentre donc sur les assemblages 390GO et 30AV5, non traités l'année précédente, permettant ainsi de balayer l'ensemble des travaux réalisés sur les assemblages VVER et anticiper certaines étapes en vue du calcul mini coeur. Il est toutefois important de remarquer que les deux assemblages étudiés présentent de fortes similitudes avec les 39AWU et 398GO, traités dans le document [2]. Ce dernier point offre donc un point de comparaison supplémentaire.

3.2.1 Présentation des assemblages d'études

Au-delà des concentrations isotopiques détaillées précédemment dans le tableau 2.6, les deux assemblages étudiés ici se différencient par leur géométrie. Le 390GO présente une symétrie en triangle, c'est-à-dire un motif élémentaire triangulaire permettant de reconstituer l'assemblage en répétant

six fois une rotation de 60° . Le 30AV5 présente quant à lui une symétrie en losange. Les figures 3.1 et 3.2 illustrent les symétries de ces deux assemblages.



FIGURE 3.1 – Assemblage KML2 390GO.



FIGURE 3.2 – Assemblage KML2 30AV5.

3.2.2 Schéma de calcul DRAGON5

Le schéma de calcul utilisé pour produire la totalité des résultats sous DRAGON5 figurant cidessous est le REL 2005 [13]. Ce schéma présente la particularité de calculer le flux en deux temps : un premier niveau sur géométrie native DRAGON5 et un deuxième sur géométrie ALAMOS, davantage raffinée. Les géométries natives sont celles produites par le module GEO: de DRAGON5. Les géométries non-natives sont produites par un outil externe, nommé ALAMOS, et basé sur la plateforme SALOME [12] décrite plus loin dans ce rapport. L'autoprotection est réalisée lors du premier niveau sur une géométrie native différente de celle employée pour le calcul de flux de premier niveau. La figure 3.3 présente l'architecture globale du schéma REL 2005.

Les encadrés correspondent à une opération au sein du schéma de calcul :

- En orange, ce qui modifie une bibliothèque de mixtures;
- En bleu, la génération et la condensation des mixtures, caractéristique d'un schéma de calcul hybride;
- En vert, les calculs de flux.

Les objets créés suivent également un code couleur :

- En gris, les données d'initialisation comme les « trackings », générés en amont à l'aide d'une géométrie native ou ALAMOS, ou la bibliothèque de mixtures, également générée en amont.
- En vert, les flux;
- En rouge, les bibliothèques de mixtures;
- En noir, la MULTICOMPO, objet stockant toutes les données nécessaires au post-traitement telles que les concentrations isotopiques et les taux de réactions par cellule.



FIGURE 3.3 – Architecture du schéma REL 2005

Ce type de calcul de flux à deux niveaux a été initialement proposé par le CEA Cadarache [13] :

- 1. au premier niveau, le flux neutronique est calculé avec un maillage spatial grossier et une discrétisation fine en énergie (295 groupes). Les calculs d'autoprotection et de flux sont réalisés par la méthode à courant d'interface.
- 2. au second niveau, le flux neutronique est calcul avec un maillage raffiné et une condensation à 26 groupes d'énergie. Le calcul de flux est réalisé par la méthode MoC.

L'intérêt de ce schéma réside ainsi sur la faculté à réévaluer les sections efficaces à l'issue du calcul de flux de premier niveau, générant ainsi LIBEQ, la bibliothèque de sections efficaces utilisée pour le calcul de flux de deuxième niveau. Ce procédé offre ainsi une bonne précision sur les résultats tout en limitant le temps de calcul.

Le schéma de calcul REL2005 utilisé ici est également qualifié d'hybride. En effet, trois géométries interviennent, deux géométries natives, produites à partir de DRAGON5, et une géométrie ALAMOS, davantage raffinée que les deux précédentes, sur laquelle le flux de deuxième niveau est calculé. Les deux origines, ALAMOS et DRAGON5, des géométries utilisées ici permettent de qualifier le schéma de calcul utilisé d'hybride. La conséquence directe de la différence fondamentale des géométries est la nécessité d'adapter les bibliothèques de mixtures, LIBRARY_2 et LIBEQ_2L, contenant un nombre de mixtures différent. Cette particularité se traduit par la génération et la condensation des bibliothèques mentionnées dans la figure 3.3.

Enfin, la pertinence du choix de ce schéma de calcul est double. Premièrement en terme d'efficience : une bonne précision en un temps de calcul raisonnable, en comparaison du schéma 100% ALAMOS qui s'avère bien plus coûteux. Deuxièmement, en anticipation de la création d'un schéma de calcul mini coeur, basé sur le schéma REL 2005 nécessitant donc une bonne maîtrise de l'architecture de ce dernier.

3.2.3 Grandeurs globales

Avant de discuter de la cohérence des grandeurs locales, la validation des assemblages passe d'abord par la comparaison de grandeurs à l'échelle macroscopique. Le KEFF et les concentrations isotopiques N_i sont donc analysés pour chaque assemblage, les écarts entre DRAGON5 et Serpent2 sont également examinés afin de répondre aux exigences de précision définies précédemment.

3.2.3.1 Assemblage 390GO

Les résultats obtenus sur l'assemblage 390GO sont présentés dans cette section. Seuls certains isotopes jugés pertinents sont présentés ci-dessous, les autres données étant rassemblées sur le site internet contenant les archives de l'EPM [5].

La figure 3.4, illustrant les résultats obtenus sur le KEFF, montre une évolution cohérente du combustible : décroissance continue du KEFF avec notamment une rupture de pente aux alentours des 8 GWj/t, correspondant au pic de disparition des poisons consommables ^{155}Gd et ^{157}Gd , et à la croissance des autres isotopes capturant ^{240}Pu , ^{242}Pu et ^{236}U .

D'après la figure 3.5, l'écart entre les deux codes reste dans les limites fixées dans la section 3.1, hormis entre 32 et 45 GWj/t. Cette dérive était déjà présente sur l'assemblage 398GO en REL2005 et peut s'expliquer par l'augmentation de l'écart sur l'²³⁵U illustré par la figure 3.7.



FIGURE 3.4 – Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.6 – Évolution de $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.5 – Évolution du Δk_{eff} de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.7 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.8 – Évolution de $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWj/t.

FIGURE 3.9 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWj/t.

Plus précisément, les figures 3.6 et 3.8, représentant l'évolution des concentrations en ^{235}U et ^{239}Pu , montrent une évolution de ces deux isotopes conforme à la logique d'un réacteur à neutrons thermiques. En effet, en parallèle d'une diminution de la concentration en ^{235}U , il est observé une augmentation de la concentration en ^{239}Pu , ce dernier étant formé à partir d'une capture neutronique et décroissances successives sur l'²³⁸U. Concernant les erreurs relatives, la figure 3.7 montre une variation dans les limites de validation pour l'²³⁵U. D'après la figure 3.9, l'erreur relative du ^{239}Pu présente un pic à 14% en début de cycle, avant de se stabiliser autour de 2%. Cet écart entre les deux codes de calculs entraîne une série d'erreur qui vont se reproduire sur l'ensemble des isotopes du plutonium. Ces résultats sont similaires à ceux obtenus dans le cadre de l'étude [2] pour l'assemblage KML2 398GO et restent globalement satisfaisants.

Au-delà des isotopes fissiles, il est important d'étudier les isotopes qui ont un effet neutrophage afin d'y confronter les résultats obtenus sur le KEFF.



FIGURE 3.10 – Évolution de $[^{157}Gd]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.12 – Évolution de $[^{135}Xe]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.11 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{157}Gd]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.13 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{135}Xe]$ de 0 à 60 GWj/t.

Un écart très important entre 5 et 10 GWj/t sur le ${}^{157}Gd$ est observé sur la figure 3.11 correspondant à la disparition totale de cet isotope, comme l'illustre la figure 3.10. Cependant, en dehors de ce pic, l'erreur relative reste dans la limite acceptable fixée. Concernant le ${}^{135}Xe$, l'erreur relative reste dans les valeurs acceptables d'après la figure 3.13, tout en observant une diminution de la quantité de ${}^{135}Xe$. Cette évolution est cohérente avec les prévisions de la neutronique : la disparition quasitotale du ${}^{155}Gd$ et du ${}^{157}Gd$ entraîne une augmentation des captures pour le ${}^{135}Xe$. Le ${}^{149}Sm$ suivant une évolution analogue à celle du ${}^{135}Xe$, les résultats obtenus sur cet isotope ne sont pas présentés ici.

3.2.3.2 Assemblage 30AV5

De même que pour l'assemblage précédemment traité, seuls les certains résultats seront présentés pour le 30AV5. Les données concernant les autres isotopes étant disponibles sur le site internet contenant les archives de l'EPM [5].

Concernant le KEFF et en comparaison des résultats sur le 390GO, il est cohérent d'observer une translation vers le bas des valeurs observées sur la figure 3.14. En effet l'enrichissement en ^{235}U étant plus faible, la disparition des poisons consommables en gadolinium est accélérée, expliquant ainsi le palier stable entre 0 et 10 GWj/t. De plus, l'écart observé sur la figure 3.15 est au-delà des limites fixées entre 25 et 38 GWj/t, mais aussi en début d'évolution, contrairement à l'étude en référence [2] où le 39AWU présentait ce pic à épuisement nul sans pour autant dépasser les tolérances. La différence en évolution s'explique probablement par l'écart sur la concentration ^{235}U , particulièrement important sur la plage d'épuisement considéré.



FIGURE 3.14 – Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.16 – Évolution de $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.15 – Évolution du Δk_{eff} de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.17 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{235}U]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.18 – Évolution de $[^{239}Pu]$ de 0 à 60 GWj/t.

FIGURE 3.19 - Évolution de l'erreur relative sur le [²³⁹*Pu*] de 0 à 60 GWj/t.

L'évolution des isotopes ^{235}U et ^{239}Pu illustrée par les figures 3.16 et 3.18 est similaire à celle du 390GO, particulièrement pour le ^{239}Pu . Le 30AV5 présentant une concentration moindre en ^{235}U , il est cohérent d'observer la même tendance que sur la courbe d'évolution du 39AWU, mais avec des valeurs plus faibles.

Les erreurs relatives illustrées par les figures 3.17 et 3.19 subissent des variations plus marquées en comparaison du 390GO mais restent dans les limites pour l'²³⁵U, avec un minimum à -1,8%. En comparaison du 390GO, l'erreur relative du ²³⁹Pu présente toujours un pic initial à 14%, puis une croissance de l'écart de 1,8 à 2,5% contre une stabilisation à 2% observée précédemment sur le 390GO.



FIGURE 3.20 – Évolution de $[^{157}Gd]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.22 – Évolution de $[^{135}Xe]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.21 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{157}Gd]$ de 0 à 60 GWj/t.



FIGURE 3.23 – Évolution de l'erreur relative sur le $[^{135}Xe]$ de 0 à 60 GWj/t.

Le comportement des poisons est similaire à celui observé sur le 390GO : un écart significatif entre 5 et 10 GWj/t pour le ${}^{157}Gd$, puis une stabilisation dans la limite acceptable fixée d'après la figure

3.21. Comme évoqué précédemment, la disparition du ${}^{155}Gd$ et du ${}^{157}Gd$ est plus rapide sur cet assemblage. L'erreur relative sur le ${}^{135}Xe$ subit plus de variations que pour le 390GO, mais demeure dans les valeurs acceptables. Les concentrations isotopiques en ${}^{135}Xe$ et en ${}^{149}Sm$ sont plus faibles pour le 30AV5 que pour le 390GO, conformément aux prévisions de la neutronique.

3.2.3.3 Synthèse

Le tableau 3.1 suivant synthétise l'évaluation des différents paramètres étudiés : le KEFF et les différentes concentrations isotopiques. L'ensemble des courbes pour ces isotopes étant disponible sur la page internet contenant les archives de l'EPM [5].

Catégorie	Paramètres	Résultats			
	390GO				
Δk_{eff}	<300 pcm	x			
Accord	$ \Delta Ni < 2.0\%$	$2^{35}U,^{236}U,^{238}U,^{135}Xe$			
Disparité	$ \Delta Ni > 2.0\%$	$\left \ ^{155}Gd, ^{157}Gd, ^{239}Pu, ^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, ^{149}Sm \right. \right.$			
30AV5					
Δk_{eff}	<300 pcm	x			
Accord	$\Delta Ni < 2.0\%$	$^{235}U,^{236}U,^{238}U,^{135}Xe$			
Disparité	$ \Delta Ni > 2.0\%$	$\left \ ^{155}Gd, ^{157}Gd, ^{239}Pu, ^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, ^{149}Sm \right. \right.$			

TABLE 3.1 – Synthèse des grandeurs locales sur les assemblages 390GO et 30AV5.

Finalement, les valeurs de KEFF obtenues sur les deux assemblages étudiés sont très satisfaisantes. Elles sont similaires à celles obtenues sur les 398GO et 39AWU l'année précédente. Bien que la plupart des concentrations isotopiques ne respectent pas les critères de validation fixés, l'ensemble des résultats obtenus sur les grandeurs globales reste concluant pour des assemblages comportant du gadolinium. A l'image des conclusions de l'année précédente, les mêmes écarts caractéristiques à épuisement nuls ont été observés. L'hypothèse alors avancée se tournait vers le dépôt d'énergie. Afin de confirmer ou réfuter cette théorie, un changement de bibliothèque sur Serpent2 a été réalisé et est développé en section 3.3.

3.2.4 Grandeurs locales

Une fois les paramètres globaux traitées, il s'agit de s'intéresser à la répartition des grandeurs au sein des assemblages. Les sections suivantes présentent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission et de capture pour les assemblages 390GO et 30AV5.

Les résultats présentés ci-dessous concernent Les fissions dans le groupe 2 (thermique) et les captures radiatives dans le groupe 1 (rapide), à épuisement nul et final (0 et 60 GWj/t). Les résultats obtenus pour ces réactions dans les autres groupes d'énergie et autres pas d'épuisement sont disponibles sur le site internet contenant les archives de l'EPM [5].

Les taux de fission sont calculés à partir des isotopes suivants : ${}^{235}U$, ${}^{238}U$, ${}^{239}Pu$ et ${}^{241}Pu$ tandis que les taux de capture radiative sont calculés à partir des isotopes suivants : ${}^{235}U$, ${}^{238}U$, ${}^{239}Pu$, ${}^{241}Pu$, ${}^{155}Gd$, ${}^{157}Gd$, ${}^{157}Gd$, ${}^{155}Xe$ et ${}^{149}Sm$.

Les critères de validation des écarts relatifs entre DRAGON5 et Serpent2 pour les grandeurs locales sont rappelés en section 3.1.

Pour davantage de lisibilité, les assemblages seront représentés selon leur symétrie : par un triangle pour le 390GO, et par un losange pour le 30AV5; chaque hexagone représentant une cellule de l'assemblage. Un code couleur a également été adopté, les valeurs positives sont représentées en rouge, les valeurs négatives en bleu. Plus la valeur est proche de zéro plus la cellule aura une teinte pâle. Le tube d'instrumentation central est représenté en noir et les tubes guides sont colorés en gris. Enfin, les cellules avec du gadolinium sont hachurées.

3.2.4.1 Assemblage 390GO

Les figures 3.24 et 3.25 suivantes illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe 2, à épuisement nul et final, pour l'assemblage 390GO.





FIGURE 3.24 – Distribution des $\tau_{f,2,BU_0}$ D5-S2 390GO.

FIGURE 3.25 – Distribution des $\tau_{f,2,BU_{60}}$ D5-S2 390GO.

Les résultats obtenus sur les taux de fissions à épuisement nul sont très bons sur l'assemblage, affichant un écart relatif moyen de 0.07%. Cependant, la cellule contenant du gadolinium affiche un écart relatif de -6.2%, l'écart relatif maximal observé sur les autres cellules étant de 0.8%, au niveau de la lame d'eau. À épuisement final, l'écart relatif moyen est de 0.12%, toujours inférieur à 1.0%. La cellule affichant l'écart relatif maximal est toujours celle contenant du gadolinium, avec un écart atteignant les 2.4%. Le même écart est observé sur une cellule en périphérie de l'assemblage, probablement du à l'absence de modélisation de la lame d'eau et des stiffeners.

Les figures 3.26 et 3.27 ci-dessous représentent la distribution des écarts relatifs sur les taux de capture radiative dans le groupe 1, à épuisement nul et final pour l'assemblage 390GO.





FIGURE 3.26 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 390GO.

FIGURE 3.27 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_{60}}$ D5-S2 390GO.

À épuisement nul, le critère de validation est atteint sur la totalité des cellules avec un écart relatif maximal observé sur une cellule au niveau de la lame d'eau avec une valeur de -2.4%, et un écart relatif moyen de 0.02% sur l'ensemble de l'assemblage. En fin d'épuisement, l'ensemble des cellules respecte le critère de validation avec un écart maximal atteint pour la cellule contenant du gadolinium, et les deux cellules angulaires des stiffeners, avec une valeur de 3.4%. L'écart relatif moyen reste sous les 1%, mais atteint cette fois-ci une valeur de 0,49%.

Au-delà de la validation de tous les critères énoncés précédemment, les figures 3.25 à 3.27 permettent de mettre en évidence l'influence de la lame d'eau sur les résultats. Ce phénomène, et la mise en oeuvre d'une solution pour palier ce dernier, seront développés ultérieurement dans cette étude.

3.2.4.2 Assemblage 30AV5

Les figures 3.28 et 3.29 suivantes illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fissions thermiques, à épuisement nul et final, pour l'assemblage 30AV5.



FIGURE 3.28 – Distribution des $\tau_{f,2,BU_0}$ D5-S2 30AV5.

FIGURE 3.29 – Distribution des $\tau_{f,2,BU_{60}}$ D5-S2 30AV5.

Les résultats obtenus sur les taux de fissions à épuisement nul respectent les critères de validation sur l'ensemble de l'assemblage, affichant un écart relatif moyen de 0.06%. Les cellules contenant du gadolinium affichent un écart relatif entre -6.2% et -8.1%, ce qui contraste avec l'écart relatif maximal observé sur les autres cellules qui est de 1.4%. Pour l'épuisement final, l'écart relatif moyen est de 0.08%, toujours inférieur à 1.0%. La cellule affichant l'écart relatif maximal est une cellule contenant du gadolinium, dont l'écart atteint 3.3%. Comme pour le 390GO, les figures précédentes montrent que l'estimation des fissions est assez fidèle à épuisement nul et final, hormis pour les cellules contenant du gadolinium, présentant davantage d'erreur à épuisement nul.

Les figures 3.30 et 3.31 ci-dessous représentent la distribution des écarts relatifs sur les taux de captures radiatives rapides, à épuisement nul et final pour l'assemblage 30AV5.



FIGURE 3.30 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 30AV5.

FIGURE 3.31 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_{60}}$ D5-S2 30AV5.

Encore une fois, les critères de validation sur l'ensemble de l'assemblage sont respectés sur les taux

de captures radiatives à épuisement nul, affichant un écart moyen de 0.06%. Les cellules contenant du gadolinium affichent un écart relatif entre 1.6% et 2.9%, l'écart relatif maximal observé sur les autres cellules est de -3.2% au niveau de la lame d'eau. À épuisement final, l'écart relatif moyen est de 0.70%, toujours inférieur à 1.0%. Les cellules affichant l'écart relatif maximal sont situés au niveau de la lame d'eau, dont la valeur est de -3.9%, tandis que celles contenant du gadolinium présentent un écart entre 2.6% et 3.3%.

De même que pour le 390GO, l'ensemble des critères sont validés. De plus, les figures 3.29 à 3.31 permettent de mettre en évidence encore une fois l'influence de la lame d'eau sur les résultats.

3.2.4.3 Synthèse

Le tableau 3.2 ci-dessous résume les résultats obtenus sur les grandeurs locales pour les deux assemblages 390GO et 30AV5. Il est important de noter que la majorité des critères de validation sont respectés à épuisement nul et final.

Assemblage	390GO			30AV5				
Critère	$ au_{f,2}$		$ au_{c,1}$		$ au_{f,2}$		$ au_{c,1}$	
	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60
$ \Delta \tau_{i,\min} $ (%)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$ \Delta \tau_{i,\max} $ (%)	6.2	2.4	2.4	3.4	8.1	3.3	3.2	3.9
Type cellule	Gd	Gd/UOx	UOx	Gd/UOx	Gd	Gd	UOx	UOx
$ \Delta \tau_i \ (\%)$	0.07	0.12	0.02	0.49	0.06	0.08	0.06	0.70
$ \Delta \tau_{i,\max} < 4.0\%$	х	v	V	v	х	V	V	V
$ \Delta \tau_{i,moy} < 1.0\%$	V	v	V	v	V	V	V	V
Validation critères	х	v	v	v	х	V	v	V

TABLE 3.2 – Synthèse des données pour les assemblages 390GO et 30AV5.

Finalement, les résultats obtenus sur les grandeurs locales des assemblages étudiés ici sont analogues à ceux observés l'année précédente. Plus particulièrement, de meilleurs résultats ont été obtenus sur le 30AV5 en comparaison du 39AWU, pour lequel les écarts à épuisement final étaient trop importants. Au-delà de la quantification de ces écarts, la même localisation des erreurs sur les cellules en périphérie des assemblages correspondant à la lame d'eau et aux stiffeners a été observé. Ainsi, il apparaît pertinent d'approfondir ce phénomène dans la section 3.4.

3.3 Changement de bibliothèque sur Serpent2

3.3.1 Objectif et réalisation

L'étude des grandeurs globales sur les assemblages 390GO et 30AV5 a révélé la présence d'écarts localisés, déjà observés l'année précédente. Afin d'expliquer ce phénomène, l'hypothèse émise dans l'étude en référence [2] se tournait vers la différence du dépôt d'énergie entre Serpent2 et DRA-GON5. En effet, dans Serpent2 seules les fissions sont prises en compte, alors que DRAGON5 intègre également les captures radiatives dans son calcul de dépôt d'énergie. Ainsi, travaillant dans une optique de constante amélioration de la précision et de la cohérence des résultats, il a été jugé pertinent de confronter cette théorie.

La mise à jour de la bibliothèque de données nucléaires JEFF3.1.1 de référence avait pour objectif de prendre en compte le dépôt d'énergie par capture radiative en plus de l'énergie libérée par le phénomène de fission dans Serpent2. Cette nouvelle bibliothèque, nommée PyNjoy2016 et objet de l'étude en référence [11], a servi de base de comparaison afin de conclure sur l'implication du dépôt d'énergie dans les écarts constatés.

Des calculs Serpent2 avec la nouvelle bibliothèque PyNjoy2016 ont donc été réalisés, dans les mêmes conditions que ceux effectués par le passé afin de permettre une analyse pertinente. La

modification du dépôt d'énergie portant principalement sur la capture radiative, le choix des composants d'étude s'est porté sur la présence de gadolinium, à deux échelles différentes : la cellule, avec la KML2 39AWU 33Gd, et l'assemblage, avec le KML2 30AV5. Finalement, ce sont les écarts DRAGON5/Serpent2-PyNjoy2016 et DRAGON5/Serpent2-JEFF3.1.1 obtenus sur la cellule KML2 39AWU 33Gd et l'assemblage KML2 30AV5 qui seront comparés afin de statuer sur la question de l'impact du dépôt d'énergie dans les écarts observés.

3.3.2 Analyse des résultats sur une cellule

L'objectif de cette partie est d'exposer les premiers résultats obtenus sur une cellule contenant du gadolinium et d'évaluer l'impact du changement de bibliothèque.

Les figures 3.32 et 3.33 ci-dessous illustrent les résultats obtenus sur deux isotopes du gadolinium pour une comparaison DRAGON5/Serpent2 avec la nouvelle et l'ancienne bibliothèque de Serpent2.





FIGURE 3.32 – Écart relatif sur la cellule pour le ^{155}Gd

FIGURE 3.33 – Écart relatif sur la cellule pour le ^{157}Gd

Bien que présentant toujours des pics hors tolérance, les résultats du changement de bibliothèque sur ces deux isotopes sont satisfaisants. En effet, à partir de 15 GWj/t, les écarts sur le ^{155}Gd et le ^{157}Gd sont inférieurs à 2% et ce jusqu'en fin d'évolution. Suite au changement de bibliothèque, la courbe d'évolution de l'écart sur le ^{155}Gd présente un maximum plus faible, moins de 10%, et la forte augmentation de l'écart entre 10 et 15 GWj/t est atténuée, rentrant alors dans la plage de tolérance. Concernant le ^{157}Gd , la valeur maximale est cette fois plus importante : plus de 20% à 10 GWj/t. Sur la suite de l'évolution, la courbe des résultats avec la nouvelle bibliothèque suit la même tendance avec une erreur moindre de 5%, permettant encore une fois de valider le critère d'erreur maximale.

Au-delà du gadolinium, les résultats sont également satisfaisants sur le KEFF, grandeur de référence. D'après la figure 3.34, les écarts sont réduits : le pic à 7 GWj/t est atténué d'une centaine de pcm et le pic à 13 GWj/t est diminué de 500 pcm, faisant ainsi rentrer l'écart dans les tolérances fixées jusqu'en fin d'évolution.



FIGURE 3.34 – Écart relatif sur la cellule pour le k_{eff}

FIGURE 3.35 – Écart relatif sur la cellule pour le ^{149}Sm

60000

Ces premiers retours sur le changement de bibliothèque poussent à étudier davantage d'isotopes, notamment le ^{149}Sm , ayant la particularité de présenter un pic d'erreur extrêmement bref et très important, 40%, dès le début d'évolution. La figure 3.35 permet de constater que le changement de bibliothèque ne corrige pas ce pic d'erreur, et réduit légèrement l'erreur globale sans pour autant valider les critères précédemment définis. Ainsi, la prise en compte du dépôt d'énergie ne semble pas être la justification des écarts observés précédemment. Cette dernière conjecture est renforcée par des observations supplémentaires sur d'autres isotopes, comme le ^{241}Pu , dont l'écart illustré sur la figure 3.36 montre également un très faible, voire négligeable, impact du changement de bibliothèque.



old lib new lib 2 Erreur relative (%) 1 0 $^{-1}$ -2 10000 20000 40000 50000 60000 ò 30000 BU (MWj/t)

FIGURE 3.36 – Écart relatif sur la cellule pour le ^{241}Pu

FIGURE 3.37 – Écart relatif sur la cellule pour le ^{235}U

Un phénomène davantage problématique a été observé : la figure 3.37 montre qu'avec la nouvelle bibliothèque, l'écart relatif sur la concentration en ^{235}U augmente au cours de l'évolution jusqu'à sortir du domaine de validation à partir de 42 GWj/t.

Enfin, les résultats obtenus sur la cellule avec la nouvelle bibliothèque sont mitigés. Les écarts DRAGON5/Serpent2 ont diminué pour de nombreux isotopes comme le ^{155}Gd et le ^{157}Gd , qui présentaient des pics d'erreur particulièrement importants. Cependant, les différents écarts marqués sur certains isotopes, comme le ${}^{149}Sm$ et le ${}^{241}Pu$, qui pouvaient potentiellement s'expliquer par une prise en compte différente du dépôt d'énergie entre DRAGON5 et Serpent2 n'ont que très peu voire pas du tout évolué. Plus dommageable, l'erreur sur le ^{235}U , isotope source de fissions par excellence dans un réacteur à neutrons thermiques, augmente avec la nouvelle bibliothèque. Afin de juger de la pertinence de PyNjoy2016 comme nouvelle bibliothèque de référence, il apparaît légitime de confirmer ces observations à l'échelle de l'assemblage.

3.3.3 Analyse des résultats sur un assemblage

Les résultats sur la cellule s'étant révélés peu concluants, l'objectif de cette partie est de statuer définitivement sur la plus value de la nouvelle bibliothèque PyNjoy2016. Afin de discuter les observations précédentes, les mêmes grandeurs sont étudiées, à l'échelle de l'assemblage cette fois-ci.

Les figures 3.38 et 3.39 ci-dessous illustrent les écarts relatifs obtenus sur les isotopes du gadolinium à l'échelle de l'assemblage pour les deux bibliothèques.



FIGURE 3.38 – Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{155}Gd

FIGURE 3.39 – Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{157}Gd

Contrairement à la cellule, l'écart sur le ^{155}Gd avec la nouvelle bibliothèque ne diminue pas significativement. Le pic à 8 GWj/t est translaté de 5% vers les valeurs positives, tout comme le reste de la courbe d'évolution. Ce phénomène est également présent pour le ^{157}Gd . Les résultats obtenus pour l'assemblage ne sont donc pas satisfaisants sur le gadolinium, la diminution de l'écart maximal est contrebalancée par le non-respect du domaine de validation sur le reste de l'évolution.

Les effets de la nouvelle bibliothèque sur le KEFF et le ${}^{149}Sm$ ne sont pas davantage convaincants d'après les figures 3.40 et 3.41.

L'écart sur le KEFF subit également des perturbations : un effacement du pic initial, mais les valeurs obtenues sont hors limites sur une plus grande partie de l'évolution avec une valeur extrême plus importante à 32 GWj/t. Quant au ^{149}Sm , le changement de bibliothèque ne permet pas de gommer le pic observé à épuisement nul qui dépasse ici les 60%, les courbes ne se différencient que très faiblement pour la suite de l'évolution.



FIGURE 3.40 – Écart relatif sur l'assemblage FIGURE pour le k_{eff} pour le

FIGURE 3.41 – Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{149}Sm

40000

50000

60000

old lib

new lib

Les figures 3.42 et 3.43 suivantes sur les isotopes fissiles permettent d'illustrer une détérioration de la précision des résultats avec la nouvelle bibliothèque.





FIGURE 3.42 – Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{241}Pu

FIGURE 3.43 – Écart relatif sur l'assemblage pour le ^{235}U

Tout comme pour les isotopes précédents, la figure 3.42 montre que le principal pic d'erreur du ^{241}Pu , observé pour un épuisement nul, n'est pas diminué. De plus, la courbe converge plus lentement dans les plages de tolérance sans pour autant en ressortir à 32 GWj/t, contrairement aux résultats obtenus avec l'ancienne bibliothèque. Les observations sur le ^{235}U à l'échelle de l'assemblage et de la cellule sont semblables. La figure 3.43 montre que l'écart s'amplifie entre les deux bibliothèques tout au long de l'évolution.

Ainsi, les résultats obtenus sur l'assemblage confirment les observations à l'échelle de la cellule. Les écarts initialement observés ne sont que peu réduits, voire augmentés sur certains isotopes pour lesquels la bibliothèque initiale fournissait des résultats déjà satisfaisants.

3.3.4 Synthèse des résultats sur le changement de bibliothèque

Le tableau suivant synthétise l'évaluation des différents paramètres étudiés pour comparer les deux bibliothèques. Des calculs ont également été réalisés sur le 390GO en vue d'une potentielle utilisation sur le mini coeur et sont disponibles sur la page internet de l'EPM [5].

Catégorie	Paramètres	Résultats		
390GO				
Δk_{eff}	<300 pcm	X		
Accord	$\Delta Ni < 2.0\%$	^{238}U		
Disparité	$\Delta Ni > 2.0\%$	$^{155}Gd, ^{157}Gd, ^{235}U, ^{236}U, ^{239}Pu, ^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, ^{149}Sm, ^{135}Xe$		
30AV5				
Δk_{eff}	<300 pcm	X		
Accord	$\Delta Ni < 2.0\%$	$^{236}U,^{238}U,^{135}Xe$		
Disparité	$\Delta Ni > 2.0\%$	$^{155}Gd, ^{157}Gd, ^{235}U, ^{239}Pu, ^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, ^{149}Sm$		

TABLE 3.3 – Influence de la nouvelle librairie sur les grandeurs locales sur les assemblages 390GO et 30AV5.

Finalement, bien qu'une amélioration des écarts sur le gadolinium ait été constatée à l'échelle de la cellule, certains isotopes qui respectaient les critères de validation ne les respectent plus avec la nouvelle bibliothèque. Ce changement n'apporte donc pas de plus value, a fortiori au niveau des assemblages. Cependant, le changement de bibliothèque permet d'écarter la prise en compte du dépôt d'énergie comme possible justification des écarts observés entre DRAGON5 et Serpent2.

3.4 Dilution sur Dragon5

3.4.1 Expression du besoin

Réaliser des calculs nécessite de définir une géométrie en amont, avec des degrés variables de flexibilité sur le paramétrage de celle-ci suivant le code employé. Serpent2 offre de grandes libertés sur les géométries programmables, tandis que Dragon5 se révèle plus rigide sur les géométries natives.

Avant de développer le principe de dilution, il est au préalable important de remarquer que les assemblages présentent les particularités géométriques suivantes :

- les stiffeners, structures métalliques placées dans les angles servant au maintien de l'assemblage, dont la géométrie est illustrée sur la figure 2.9 de la section 2.3.3;
- une lame d'eau, quantité de matière située entre les différents assemblages.

Lors des comparaisons de résultats entre Serpent2 et Dragon5 en schéma de calcul REL2005, des écarts plus importants que la moyenne ont été remarqués en périphérie des assemblages, particulièrement sur les taux de capture dans le groupe des neutrons thermiques, en accord avec les observations énoncées dans la précédente étude en référence [2]. Ces écarts seraient dus à l'absence de modélisation de la lame d'eau et des stiffeners sur les géométries natives, impossible dans Dragon5, contrairement à Serpent2 comme illustré par les figures 3.44 et 3.45.

En effet, la paramétrisation des géométries natives de Dragon5 ne permet pas de définir physiquement des régions correspondant aux stiffeners et lame d'eau. Il faut donc trouver une alternative afin que ces structures soient tout de même prises en compte dans le calcul, particulièrement pour l'autoprotection, qui est réalisée exclusivement sur géométrie native, contrairement au flux. L'enjeu est donc d'intégrer cette matière dans la géométrie native de Dragon5.



FIGURE 3.44 – Géométrie d'assemblage Serpent2 avec stiffeners.



FIGURE 3.45 – Géométrie d'assemblage Dragon
5 sans stiffeners. $% \left({{{\rm{S}}_{\rm{B}}} \right)$

3.4.2 Principe physique

L'option ici considérée est la dilution : c'est-à-dire homogénéiser puis condenser la matière de la dernière couronne modérateur, du stiffener, et de la lame d'eau dans la dernière couronne modérateur ; la matière est ainsi « diluée » dans le modérateur.

Trois types de cellules sont alors à considérer :
- les cellules dites « d'angles », situées dans les angles des assemblages comme leur nom l'indique devant intégrer la matière de l'angle du stiffener et de la lame d'eau;
- les cellules « intermédiaires », directement adjacentes aux cellules d'angles qui prenent en compte la deuxième partie du stiffener et la lame d'eau;
- les cellules « extérieures », qui représentent toutes les autres cellules de la couronne extérieure qui quant à elles doivent intégrer uniquement la lame d'eau.

Ces différentes cellules sont représentées sur la figure 3.46, avec de gauche à droite : la cellule d'angle, intermédiaire, et extérieure.



FIGURE 3.46 – Représentation des volumes de dilution.

Finalement, pour obtenir la nouvelle concentration de chaque isotope, il suffit d'appliquer la formule suivante :

$$N_1 = C_i N_0$$

Où N_0 est la concentration initiale de l'isotope considéré, N_1 la nouvelle concentration dite "diluée", et C_i le rapport des volumes; l'expression de ce dernier coefficient varie suivant la cellule concernée. A titre d'exemple, pour la cellule "extérieure", C_i s'exprime comme suit :

$$C_i = \frac{\frac{\sqrt{3}}{8}H^2 + V_0}{V_0}$$

Avec H le côté de la cellule hexagonale.

Les nouvelles concentrations établies, l'enjeu est maintenant de les implémenter dans les différentes géométries Dragon5.

3.4.3 Réalisation dans Dragon5

L'implémentation de la dilution dans le schéma de calcul REL2005 a consisté dans un premier temps à créer de nouvelles cellules intégrant la matière de la lame d'eau et des stiffeners dans les géométries natives.

Les cellules étant déjà sectorisées dans la géométrie de calcul de flux, de nouvelles mixtures ont été créées et attribuées aux secteurs de la dernière couronne modérateur concernés. Pour la géométrie d'autoprotection, les cellules de la dernière couronne de l'assemblage ont été sectorisées puis se sont vues attribuer de nouvelles mixtures, de façon analogue à la méthode employée pour la géométrie de calcul de flux.

Dans un second temps, il a fallu s'assurer de la cohérence du schéma de calcul hybride REL2005, notamment entre les différentes géométries. En effet, la lame d'eau et les stiffeners étant déjà définis dans la géométrie ALAMOS, les mixtures précédemment définies ne sont pas utilisées dans le calcul de flux de deuxième niveau. Cette absence de prise en compte présente un impact négligeable dans la cohérence du schéma de calcul, étant donné que le modérateur ne subit pas d'évolution isotopique, contrairement au combustible.

3.4.4 Résultats

3.4.4.1 L'expérimentation : assemblage 40AU

La dilution a été expérimentée sur deux assemblages différents. Dans un premier temps sur le 40AU, assemblage constitué uniquement de cellules UOx.

Ce choix a été orienté par la simplicité de l'assemblage : nombre de familles de cellules réduit par rapport à un assemblage gadoliné; et par la localisation des erreurs locales, très franche sur cet assemblage, illustrée par la figure 3.47 ci-dessous.





FIGURE 3.47 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 40AU.

FIGURE 3.48 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 40AU dilué.

Les premiers résultats de la dilution en évolution, présentés ci-dessous sur la figure 3.48, sont concluants : un gain d'en moyenne 1,5% d'erreur est observé sur les captures dans le groupe rapide. Ces dernières observations corroborent l'hypothèse selon laquelle les erreurs en périphérie de l'assemblage seraient essentiellement dues à la non modélisation des stiffeners et de la lame d'eau.

Après l'obtention de ces résultats, il a été décidé d'appliquer la dilution à un assemblage gadoliné, le 390GO.

3.4.4.2 L'exploitation : assemblage 390GO

La dilution a ainsi été appliquée dans un second temps à l'assemblage 390GO. Au vu des résultats satisfaisants obtenus précédemment, la dilution apparaît comme un facteur de précision des calculs sur mini coeur réalisés par la suite; ce dernier étant composé de six assemblages 390GO.

Les figures 3.49 et 3.50 présentent les taux de réactions de capture pour le groupe rapide. Les résultats observés sont analogues à ceux obtenus sur le 40AU : un gain en précision de 1.5% en moyenne sur les taux de réactions de capture dans le groupe thermique des cellules en périphérie. Cependant, les résultats sur les autres taux de réactions ne présentent pas de gain de précision par rapport à un assemblage "non dilué". Cette dernière observation questionnant la pertinence de la dilution du point de vue de la précision globale sur toutes les réactions.

Outre la précision, un autre paramètre clé des calculs numériques est le temps de réalisation de ceux-ci. Le coût temporel de la dilution a pu être estimé empiriquement : il faut compter 50% de temps de calcul de plus pour un assemblage.



FIGURE 3.49 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_0}$ D5-S2 390GO dilué.



FIGURE 3.50 – Distribution des $\tau_{c,1,BU_{60}}$ D5-S2 390 dilué.

3.4.5 Bilan de la dilution

Finalement, le bilan de la dilution est en demie teinte.

Dans un cas particulier, la dilution offre un gain en précision non négligeable d'après les résultats obtenus précédemment. En moyenne 2% sur les captures pour le groupe rapide, ce qui est expliqué par le "rajout" de capacité modératrice représenté par la lame d'eau et, dans une moindre mesure, les stiffeners. Ainsi, d'une part les neutrons sont davantage modérés, d'autre part il y a une plus forte densité d'atomes cibles pour la réaction de capture neutronique. Les résultats du code de calcul sont donc cohérents avec les prévisions de la neutronique.

Toutefois, en étudiant les autres types de réactions aux différents épuisements, le bilan est davantage mitigé. En confrontant les moyennes et écart-types à l'échelle de l'assemblage du tableau 3.4 cidessous, la dilution n'apparaît pas comme une plus value absolue : le gain en précision globale n'est pas avéré.

Assemblage	Groupe	Réaction	Épuisement (GWj/t)	Moyen	ne	Écart-t	ype
				Non dilué	Dilué	Non dilué	Dilué
		D::	0	-0,47	-0,53	$0,\!27$	0,24
40AU -	1	1 1551011	60	0,53	$0,\!56$	$1,\!15$	1,06
	1	Capturo	0	0,06	$0,\!45$	$0,\!90$	0,48
		Capture	60	-0,62	-0,39	1,09	$0,\!61$
		Fission	0	0,11	0,14	0,78	$0,\!85$
	2	F ISSION	60	-0,21	-0,24	$1,\!19$	$1,\!12$
		Capture	0	-0,14	-0,13	$0,\!83$	$0,\!87$
			60	-0,51	-0,74	$0,\!85$	$0,\!87$
	1	Fission	0	-0,74	-0,78	0,31	0,25
390GO -			60	0,40	$0,\!40$	$0,\!69$	$0,\!67$
		Capture	0	-0,02	$0,\!38$	0,94	0,49
			60	-0,53	-0,31	$1,\!15$	$0,\!67$
		Fission	0	0,07	$0,\!08$	$0,\!87$	$0,\!97$
	2	1 1551011	60	-0,12	-0,14	0,92	0,75
		Canture	0	-0,11	-0,11	0,59	0,51
		Capture	60	-0,49	-0,72	$0,\!62$	$0,\!54$

TABLE 3.4 – Moyenne et écart-type des taux de réactions pour les assemblages 40AU et 390GO.

De plus, en extrapolant l'estimation du coût temporel de la dilution au mini coeur, le temps de calcul additionnel devient non négligeable. Ainsi, la question du bénéfice précision/temps de calcul reste présente, bien que les calculs déterministes réalisés sur DRAGON5 restent beaucoup

plus rapides que les calculs stochastiques de Serpent2. En vue d'une application à un processus industriel, cette question du temps de calcul, même sur un outil déterministe comme DRAGON5 beaucoup plus rapide qu'un code stochastique, doit rester une préoccupation, modulable suivant les objectifs recherchés.

Enfin, la dilution reste donc une méthode intéressante dans un certain contexte, où la recherche de la précision sur les captures dans le groupe rapide prime sur les autres réactions et le temps de calcul n'est pas une préoccupation majeure.

3.5 Conclusion partielle

L'objectif de ce travail préliminaire sur les assemblages est atteint. La modélisation du 390GO et du 30AV5 a permis une bonne prise en main des codes DRAGON5 et Serpent2. Les résultats obtenus sur les assemblages étudiés sont conformes aux attentes, certaines grandeurs globales sont hors tolérances mais la précision sur les taux de réactions reste très satisfaisante. Le bilan est donc similaire à celui dressé l'année précédente sur les 398GO et 39AWU, assemblages similaires à ceux étudiés ici.

Au-delà d'une simple amorce au projet, cette étude des assemblages a également permis d'approfondir des axes de recherche énoncés par le passé, en quête d'une précision accrue à toutes les échelles : cellule, assemblage, et mini coeur.

Ainsi, la dilution, qui visait une meilleure prise en compte de l'environnement proche des assemblages, reste circonstancielle : un gain de précision peut être observé sur les taux de capture dans le groupe rapide, au détriment des autres réactions, et à un coût de calcul supérieur du à un maillage davantage raffiné de la géométrie native DRAGON5.

De même, le changement de bibliothèque vers PyNjoy2016 ne fait pas l'unanimité. A l'échelle de la cellule les écarts sur le gadolinium sont réduits, mais cette plus value disparaît à l'échelle de l'assemblage. A cela s'additionne la détérioration de la précision sur certains isotopes, notamment l'²³⁵U, isotope fissile primordial dans un réacteur à neutrons thermiques. Actuellement, ces multiples facteurs font de PyNjoy2016 une alternative non judicieuse à la bibliothèque de référence.

Ce travail de recherche d'amélioration s'inscrit dans une logique d'optimisation pour le mini coeur. Les simulations sur assemblage ou cellule étant bien moins coûteuses en temps de calculs, ces pistes de recherche ont pu être explorées plus rapidement et auraient pu être portées à l'échelle supérieure en cas de résultats concluants, offrant une précision accrue sur le mini coeur.

Finalement, l'étude des assemblages constitue une base de comparaison et de travail. Pour rappel, le mini coeur étudié est constitué des assemblages 30AV5 et 390GO. Ainsi, grâce à la modélisation de ces deux assemblages, des données de comparaison sont maintenant disponibles et constituent alors un premier garde fou dans la détection de potentielles erreurs sur le mini coeur. Il est toutefois important de souligner que ces données concernent l'assemblage, individuellement, les grandeurs devant donc être discutées et recontextualisées.

Enfin, ce travail de modélisation des assemblages 30AV5 et 390GO était nécessaire. La modélisation du mini coeur objet de cette étude reprend des parties entières du schéma de calcul DRAGON5 utilisé pour les assemblages, à commencer par la modélisation des géométries d'autoprotection, natives. L'exploitation des différents modules au sein du schéma de calcul est également similaire entre les deux structures d'étude. Ces derniers points permettent alors de se tourner sereinement vers l'étude du mini coeur, pierre angulaire de cette étude.

Chapitre 4 ÉTUDE DU MINI COEUR

4.1 Introduction

L'objectif fixé dans cette étude est ambitieux. Si des modélisations de mini cœurs ont déjà été réalisées sur Serpent2, cela relève de l'innovation pour DRAGON5. Au-delà de permettre une analyse physique, réaliser un schéma de calcul fonctionnel sur un mini cœur de VVER en évolution est une démonstration technologique sur un code tel que DRAGON5, initialement prévu pour les cellules et assemblages. L'ambition concernant Serpent2 est également à souligner, les travaux précédemment réalisés avec le code stochastique n'ont jamais traité une étude en évolution de mini cœur, offrant alors un axe d'exploration sur les capacités de ce dernier. Il est donc important de contextualiser cette étude comme une expérimentation : pousser DRAGON5, et dans une moindre mesure Serpent2, au-delà de ce qui avait été réalisé par le passé avec un saut d'échelle : de l'assemblage au mini cœur VVER.

Les résultats visés ont subi de nombreux compromis. La marche technologique représentée par cette étude pousse DRAGON5 dans ses limites : la taille des données manipulées, comme les bibliothèques de sections efficaces ou encore les concentrations isotopiques, est sept fois supérieure à ce qui était précédemment calculé sur assemblage. Il a donc fallu impérativement réaliser un travail d'optimisation, au détriment parfois de la précision des résultats produits. L'ensemble des points d'arrêt et des limitations technologiques sur DRAGON5, et leurs conséquences, sont détaillés ultérieurement, dans la section 4.4.

Comme évoqué précédemment, les travaux sur les assemblages 30AV5 et 390GO dépassent le stade de prise en main. Il était nécessaire de modéliser dans un premier temps ces structures individuellement, le schéma de calcul mini cœur reprenant des pans entiers du code initial. La recherche d'optimisation comme la dilution et le changement de bibliothèque de référence a également joué un rôle important, dépassant l'application aux assemblages initialement envisagée dans le document en référence [2]. Le but était bien de discuter de la pertinence des paramètres et la précision attenante, pour une application au mini cœur, toujours dans une optique de réduction du temps de calcul.

Ce dernier point de temps de calcul permet d'aborder la parallélisation. Devant ce saut d'échelle, il était crucial d'augmenter la vitesse de calcul. DRAGON5 possède ainsi depuis juin 2024 la capacité d'effectuer le calcul de flux sur plusieurs processeurs. Le fonctionnement de la parallélisation est détaillé en section 4.3. Cette nouvelle capacité permet de réduire le temps de calcul, mais présente toutefois des limites. L'élaboration de l'objet contenant les données exploitables, la MULTICOMPO, comme le KEFF et les concentrations isotopique ne bénéficie pas de cette nouvelle fonction. Le temps de calcul présente donc un minimum irréductible. Cependant, le gain de temps offert par la parallélisation représente une avancée majeure, indispensable au vu des échéances de ce projet.

Le protocole retenu pour discuter des résultats obtenus sur le mini cœur est analogue à celui employé pour les assemblages. L'étude sur Serpent2 constitue la référence, quand DRAGON5 est mis à l'épreuve. Deux études ont ainsi été réalisées sur DRAGON5 : une première en statique à épuisement nul, et une seconde en évolution à de faibles épuisements. Une troisième étude, uniquement réalisée sur Serpent2 compte tenu des contraintes de ce projet, est présentée en annexe

A en vue d'une future comparaison avec DRAGON5. Des propositions d'études supplémentaires sont détaillées dans la section 5.2.

Enfin, il est encore une fois nécessaire de souligner que les données DRAGON5 présentées ci-dessous sont le fruit d'une simplification contrainte de certains paramètres. La discussion des résultats doit impérativement prendre en compte cette particularité de l'étude.

4.2 Choix et évolution du mini coeur

Le choix du mini cœur objet de cette expérimentation s'est rapidement orienté vers celui retenu par le KIT, dont l'étude figure en référence [7]. Plusieurs facteurs ont été considérés. Tout d'abord la récence de l'étude, parue courant 2024, permet d'analyser les résultats obtenus à partir du même ensemble de données nucléaires. De plus, le code utilisé est Serpent2, ce qui assure une cohérence dans les comparaisons entre les deux études. Il est toutefois à porter à la connaissance du lecteur que les travaux précédemment cités traitent d'une éjection de grappe d'absorbant de contrôle, et non d'un cycle en évolution, d'où le caractère innovant de l'analyse présentée ci-dessous. Enfin, le mini cœur traité ci-après reste bien dans le périmètre du projet CAMIVVER.

4.2.1 Le développement

La composante Serpent2 n'a pas été source de grandes modifications quant à la géométrie d'étude. En revanche, les verrous technologiques rencontrés lors de la phase de développement sur DRA-GON5 ont poussé à simplifier itérativement le mini cœur d'étude. Initialement et conformément à l'étude du KIT, le mini cœur devait être constitué de réflecteurs en eau légère borée. Cependant, la taille des fichiers manipulés par DRAGON5 lors du calcul impliquait systématiquement un échec de ce dernier. Il a donc été décidé d'abandonner ces structures au profit d'un mini cœur plus simple sans réflecteurs, moins onéreux en ressources de calcul.

La figure 4.1 représente la géométrie Serpent2 choisie pour la phase de développement du projet, sans réflecteurs.



FIGURE 4.1 – Mini coeur sans réflecteur issu de Serpent2.

4.2.2 L'exploitation

Les modifications apportées à DRAGON5 au cours du projet ont permis de complexifier étape par étape la géométrie et le schéma de calcul. Finalement, les capacités du code déterministe en fin de

projet ont permis de réaliser des simulations sur mini coeur avec réflecteurs.

Ainsi, les résultats présentés en section 4.7 ont été obtenus à partir du mini coeur présenté cidessous, conforme à celui ambitionné avant la phase de développement et retenu par le KIT dans les travaux en référence [7], à l'exception du réflecteur. Afin de réduire le temps de calcul, une partie des hexagones en eau légère borée a été réduite de moitié pour obtenir une géométrie de mini coeur strictement hexagonale, contrairement à celle employée par le KIT. L'assemblage central 30AV5 est entouré de six assemblages 390GO, avec des hexagones de réflecteurs représentés en rose. L'extérieur du domaine d'étude est représenté en noir.



FIGURE 4.2 – Mini coeur issu de Serpent2.

Les différentes géométries utilisés dans le schéma de calcul mini coeur DRAGON5 ainsi que les modifications qu'elles ont subies sont détaillées en section 4.4.4.

4.3 Parallélisation

Il a brièvement été fait mention en introduction du gain de temps apporté par la parallélisation. Compte tenu de l'avancée majeure que celle-ci représente, la section suivante vise à détailler le processus de parallélisation des calculs réalisés dans cette étude, OPEN MP, afin d'en maîtriser les enjeux.

4.3.1 Diviser pour mieux régner

Il est de l'ordre de la vérité générale que la résolution numérique d'équations de neutronique nécessite un temps de calcul conséquent, croissant avec la précision recherchée et la complexité de la structure étudiée. Cette conjecture, vérifiée sur DRAGON5, est exacerbée sur des codes stochastiques tels que Serpent2. Si les temps de calculs étaient raisonnables sur les assemblages, il en est autrement sur le mini cœur. En effet, il n'est plus question d'une à deux heures pour le calcul d'un pas d'évolution sur DRAGON5, mais bien de la journée.

Le calendrier imposé par ce projet ne permettait pas de tels temps de calculs, d'autant plus dans un contexte de développement où les erreurs doivent être identifiées au plus vite. Paralléliser DRA-GON5 et Serpent2 permet alors d'exploiter la ressource de processeurs disponibles afin d'optimiser le temps de calcul, et ainsi respecter les échéances de cette étude.

4.3.2 Principe de fonctionnement

La parallélisation est un processus informatique qui vise à découper une tâche conséquente, ici l'opération de tracking et le calcul de flux, en un ensemble de petites tâches pouvant être traitées simultanément sur plusieurs processeurs.

Open MP, Open Multi-Processing, est une interface de programmation, API, pour le calcul en parallèle reposant sur une architecture à mémoire partagée. Elle se compose d'un ensemble de directives, d'une bibliothèque de fonctions et de variables d'environnement.

Les directives sont des procédures qui paramètrent la parallélisation. Elles définissent la synchronisation entre les processeurs, et l'exécution du programme parallélisé, selon le modèle "fork-join", illustré ci-dessous.



FIGURE 4.3 – Parallélisation d'une tâche.

Lorsque l'exécution du programme arrive à l'entrée d'une région parallèle (fork), c'est-à-dire une tâche parallélisée, le fil conducteur, ici assimilé à un processeur, dit "maître" créé des fils conducteurs travailleurs qui vont exécuter chacun une sous-tâche au sein de la région parallèle. Une fois toutes les sous tâches exécutées, la région parallèle est terminée (join) et le fil conducteur maître reprend son exécution, sur un seul processeur. Il est donc impératif que tous les fils conducteurs travailleurs soient terminés pour que le fil conducteur maître, c'est-à-dire l'exécution du programme principal, reprenne.

Enfin, la bibliothèque contient des fonctions liées à l'environnement d'exécution, comme la politique d'ordonnancement des fils conducteurs, et des fonctions utilitaires d'intérêt général comme la mesure du temps. Les variables d'environnement servent quant à elles à piloter le processus, par exemple avec des variables dynamiques utilisées par les processeurs afin de communiquer entre eux.

Il a été mentionné plus haut la particularité de la parallélisation Open MP : l'architecture à mémoire partagée. Chaque fil conducteur travailleur dispose d'un accès à deux mémoires distinctes, représentées ci-dessous.

La mémoire privée, propre à chaque processeur, est utilisée par ce dernier dans l'exécution de la sous tâche qui lui est confiée. Une fois cette exécution terminée, les données produites sont stockées en zone temporaire avant d'être écrites dans la mémoire partagée. L'écriture dans cette mémoire est gérée par le processeur maître, qui synchronise les différents processeurs travailleurs afin de stocker les informations dans le bon ordre. Il y a donc une "barrière" en fin de région parallèle : toutes les sous tâches doivent être achevées avant que le processeur maître reprenne l'exécution de la tâche principale, avec les informations stockées dans la mémoire partagée.



FIGURE 4.4 – Architecture à mémoire partagée.

4.3.3 Application à DRAGON5 et Serpent2

L'application concrète d'Open MP varie suivant le code considéré.

Pour Serpent2, c'est le calcul de flux qui est directement impacté. Un nombre défini de processeurs va être dédié au calcul lors de son lancement. Il y aura alors autant de fils conducteurs travailleurs dans la région parallèle que de processeurs alloués au calcul, chacun résolvant l'équation de transport par "paquet" de neutrons, le nombre de neutrons par paquet étant directement renseigné par l'utilisateur dans les paramètres Serpent2. Une fois tous les calculs de flux par paquet réalisés, les résultats sont stockés dans des zones tampons produites par les processeurs travailleurs, et l'exécution du code continue sur un seul processeur. À chaque itération, ces étapes seront répétées.

Dans le cas de DRAGON5 en méthode des caractéristiques, le procédé est analogue à celui employé pour Serpent2. C'est maintenant en paquets de caractéristiques qu'il faut raisonner et non plus en paquets de neutrons. Durant l'opération de tracking, des paquets de caractéristiques vont être définis. Chaque paquet de caractéristiques est utilisé par tous les fils, mais chacun pour un groupe d'énergie différent. Le nombre de caractéristiques par paquet est également fixé par l'utilisateur dans le script de tracking.

Lors du calcul de flux, chaque processeur calcule alors le flux pour toutes les caractéristiques du paquet, avant de passer au suivant. Une fois le calcul de flux pour plusieurs groupes d'énergie terminé, l'exécution reprend sur le processeur maître.

4.3.4 Les limites de la parallélisation

La parallélisation permet donc de mettre à profit la ressource en CPU disponible afin de calculer le flux sur plusieurs processeurs et ainsi réduire le temps de calcul. Toutefois, il a été fait mention précédemment d'une étape de synchronisation en fin de régions parallèles, join, nécessaire afin d'ordonner toutes les informations issues des sous taches dans la mémoire partagée et former un ensemble cohérent. En effet, cette étape évite d'avoir un mauvais ordonnancement des données, crucial dans un processus itératif tel que le calcul d'un flux neutronique.

La synchronisation se traduit par l'action du processeur maître, qui interroge les processeurs travailleurs sur l'exécution de la sous tache attribuée, et les autorise à écrire dans la mémoire partagée. En d'autres termes, les zones tampon produites par les processeurs travailleurs se retrouvent dans une zone d'attente de la mémoire partagée appelée zone de réduction avant d'être finalement écrits dans la mémoire partagée après autorisation du processeur maître. Cette synchronisation est une opération nécessaire, qui représente un certain coût en termes de ressource et de temps. De trop petits paquets de caractéristiques, ou de neutrons dans le cas de Serpent2, vont augmenter de façon non négligeable le temps de calcul. Le même phénomène est observé avec un nombre trop important de processeurs, qui impliquera également des synchronisations plus fréquentes.

Ce temps additionnel doit être considéré afin de préserver une plus-value : le gain de temps de calcul engendré par la parallélisation doit être supérieur au temps de synchronisation des différents

processeurs. La combinaison nombre de processeurs et nombre de caractéristiques / neutrons par paquet peut donc être optimisée. Ce point est davantage détaillé dans la section 5.2.4.

4.4 Schéma de calcul D5

La construction du schéma de calcul mini cœur sous DRAGON5 s'est inspirée en premier lieu du schéma REL2005, initialement appliqué aux assemblages et présenté précédemment en section 3.2.2. Devant la taille des fichiers manipulés, l'étape de calcul de deuxième niveau a rapidement été abandonnée, jugée trop coûteuse compte tenu du raffinement élevé de la géométrie MoC. Ainsi, le développement s'est finalement orienté vers un schéma plus simple contenant une étape d'autoprotection et une étape de calcul de flux.

4.4.1 Itérations et convergence vers un schéma de calcul

Pour davantage de clarté dans la section qui suit, les schémas de calcul mini cœur DRAGON5 développés dans cette étude bénéficient de la même légende qu'en section 3.2.2 rappelée ci-dessous.

Les encadrés correspondent toujours à une opération :

- En orange, la modification d'une bibliothèque de mixtures;
- En bleu, la génération ou la condensation des mixtures entre géométries natives et ALA-MOS;
- En vert, l'unique calcul de flux.

Les objets créés suivent également un code couleur :

- En gris, les données d'initialisation comme les "trackings", générés en amont à l'aide des deux géométries natives et de la géométrie ALAMOS, ou la bibliothèque de mixtures, également générée en amont.
- En vert, le flux;
- En rouge, les bibliothèques de mixtures;
- En noir, la MULTICOMPO, objet stockant toutes les données nécessaires au post-traitement.

Comme évoqué précédemment, la ligne directrice de l'élaboration du schéma de calcul mini coeur a rapidement été arrêtée : une étape d'autoprotection et une étape de calcul de flux. L'enjeu était alors de construire, à travers les modules et les paramètres choisis, une structure supportée par DRAGON5 vis-à-vis de ses capacités.

La première version considérée, illustrée ci-dessous, reprenait l'architecture du schéma hybride REL2005 assemblage développé dans l'étude en référence [2]. Bien que l'étape de calcul de flux de deuxième niveau, caractéristique du schéma REL2005 ait été abandonnée, les étapes de génération et de condensation des mixtures étaient conservées afin de passer d'une géométrie à l'autre, entre l'autoprotection et le calcul de flux.



FIGURE 4.5 – Schéma mini coeur DRAGON5 initial.

L'étape ayant poussé à modifier ce schéma est la condensation des mixtures, qui génère la bibliothèque des géométries natives utilisées dans le cadre de l'autoprotection au cours de l'évolution. En effet, si la génération de la bibliothèque de mixtures pour la géométrie de calcul de flux demande un effort considérable à DRAGON5, l'étape de condensation est quant à elle impossible au vu de la taille des fichiers manipulés. Ce verrou technologique a ainsi poussé à considérer un deuxième schéma de calcul présenté ci-après.



FIGURE 4.6 – Schéma mini coeur DRAGON5 sans autoprotection.

La problématique immédiate de ce schéma de calcul est l'absence d'autoprotection en évolution. En effet, un seul calcul d'autoprotection est réalisé à l'initialisation car il est impossible à DRAGON5, en l'état actuel, de procéder à la condensation des 9060 mixtures du mini coeur. Cette étape particulièrement critique est davantage détaillée dans la section suivante.

Ainsi, ce qui était tout à fait possible sur assemblage ne l'est plus à l'échelle supérieure. Cette dernière conjecture appelle donc à penser différemment la définition et la gestion des objets manipulés par DRAGON5 dans le schéma de calcul. Des réflexions ont alors été entreprises afin de gérer au mieux les variables et ne pas surcharger inutilement DRAGON5.

Jugée inacceptable vis-à-vis des conséquences sur la précision des résultats, il a fallu remédier à l'absence d'autoprotection en évolution. Grâce à une refonte du script d'autoprotection, et l'ajout d'un nouveau module utilitaire dans DRAGON5, ERASE:, permettant d'effacer un objet au lieu de le supprimer définitivement, l'autoprotection en évolution a été implémentée dans le schéma de calcul. La "condensation" des mixtures a été supprimée, remplacée par une nouvelle méthode détaillée en section 4.4.2. Finalement, les évolutions successives d'architecture ont abouti au schéma de calcul présenté ci-dessous.



FIGURE 4.7 – Architecture du schéma mini coeur DRAGON5

Ce dernier schéma de calcul a été retenu pour produire les résultats présentés en section 4.7 à partir du mini coeur objet de cette étude. Fonctionnel, il a toutefois été la source de multiples compromis détaillés dans les sections suivantes, expliquant certaines erreurs observées sur les grandeurs analysées. Précurseur parmi les schémas de calcul mini coeur sur DRAGON5, ce premier modèle est sur divers points perfectibles. Ces axes d'approfondissement sont abordés en section 5.2. Enfin, les sections suivantes reviennent davantage en détail sur les différentes étapes et problématiques du schéma de calcul élaboré.

4.4.2 Bibliothèques et raccordement des géométries

Tout comme pour le schéma REL2005 employé dans les calculs assemblages développés précédemment, deux étapes dites de "génération" et de "condensation" des mixtures figurent dans le schéma de calcul en figure 4.5. Ces opérations, conséquentes à l'échelle du mini cœur, méritent d'être développées afin d'en saisir la sensibilité.

Il a déjà été évoqué dans la section 3.2.2 la nécessité de ces étapes, il en va de même dans ce cadre-ci. Dans le cas du mini cœur, la taille de la bibliothèque de la géométrie ALAMOS est bien supérieure à celle employée dans un calcul assemblage : il faut passer de 177 à 9060 mixtures, et inversement. A titre comparatif, dans le cas des calculs sur assemblages, les deux bibliothèques contiennent respectivement 75 et 486 mixtures pour le 30AV5. Au-delà du temps important pour générer les 9060 mixtures à partir des 177 provenant des géométries natives, c'est l'opération inverse qui soulève une problématique de taille.

En effet, un obstacle technologique de plus se dresse. DRAGON5 n'est physiquement pas capable de trier et regrouper des mixtures à partir d'une bibliothèque aussi importante. La conséquence directe de cette observation a été une évolution du schéma, évoquée dans la section précédente. Initialement, avant chaque étape d'autoprotection en évolution, la bibliothèque de calcul de flux devait être condensée pour correspondre à la bibliothèque des géométries natives. Plutôt que de condenser les 9060 mixtures en 177, une copie des mixtures utilisées pour l'autoprotection est réalisée à partir de la bibliothèque de la géométrie ALAMOS. Ces mixtures sont directement intégrées dans la bibliothèque d'autoprotection, persistante, qui n'est jamais supprimée au cours du calcul mais simplement modifiée. Une fois ces mixtures autoprotégées, la bibliothèque de calcul de flux est à nouveau générée à partir de la bibliothèque récemment autoprotégée. Ainsi, l'opération problématique, à savoir la condensation des mixtures, n'est plus nécessaire. Il est maintenant possible d'autoproteger en évolution.

4.4.3 Autoprotection et géométries natives

Le module retenu pour l'autoprotection est USS:, Universal Self Shielding. Ce module se base sur le formalisme de Livolant-Jeanpierre et des tables de probabilité Calendf établies à partir de quadratures d'intégrales, permettant ainsi d'évaluer des sections efficaces microscopiques multigroupes autoprotégées. Deux options de ce module sont particulièrement intéressantes :

- REGI ALL, pour autoprotéger un isotope de la même façon pour toutes les mixtures;
- REGI MIX, qui permet d'autoprotéger selon certaines mixtures, seules ou bien regroupées.

Les paramètres retenus suivants les isotopes considérés sont détaillés dans le tableau 4.1.

Isotope	Paramètre d'autoprotection
^{235}U	REGI ALL
^{238}U	REGI MIX, par couronne combustible
^{239}Pu	REGI MIX, par couronne combustible
$^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu$	REGI ALL
$^{154}Gd, ^{155}Gd, ^{156}Gd, ^{157}Gd, ^{158}Gd$	REGI MIX, par couronne combustible
90Zr, 91Zr, 92Zr, 94Zr, 96Zr	REGI ALL

TABLE 4.1 – Paramètres retenus pour l'autoprotection.

L'autoprotection par couronne pour l'²³⁸U et le ²³⁹Pu a été retenue afin de traduire la réalité spatiale du phénomène. En effet, la couronne périphérique des pastilles de combustible étant plus exposée au flux de neutrons incidents, l'autoprotection doit prendre en compte cet effet de bord, d'où le besoin d'une section efficace multigroupe par couronne pour ces deux isotopes. Les isotopes du gadolinium suivent le même procédé d'autoprotection au vu des erreurs déjà rencontrées par le passé avec cet élément. Autoprotéger par couronne permet de limiter l'erreur dans ce cas.

L'autoprotection du mini cœur est réalisée sur une géométrie différente de celle employée pour le calcul de flux afin d'optimiser le temps de calcul. En effet, traiter non pas un mini cœur composé de sept assemblages mais seulement deux représente un gain de temps considérable, incitant à se tourner vers cette méthode.

Les géométries d'autoprotection employées se basent sur celles définies pour les calculs assemblages, à la différence près de la discrétisation des cellules en périphérie. Afin de prendre en compte la différence de voisinage entre les différents assemblages, les cellules concernées ont donc été discrétisées par côté, les cellules d'angles étant quant à elles en familles uniques. Les figures 4.8 à 4.11 représentent les géométries natives d'autoprotection utilisée dans le schéma de calcul.

Initialement similaires à celles employées dans le cadre des calculs assemblages, les géométries natives d'autoprotection du 30AV5 et 390GO se sont vues également simplifiées, une fois de plus afin de faciliter le développement du schéma de calcul. En effet, l'application à un mini cœur étant inédite, il était important de disposer d'un cas d'étude simple afin de cibler plus efficacement les problèmes rencontrés dans le code.



FIGURE 4.8 – Géométrie native initiale 390GO.



FIGURE 4.10 – Géométrie native finale 390GO.



FIGURE 4.9 – Géométrie native initiale 30AV5.



FIGURE 4.11 – Géométrie native finale 30AV5.

Les premiers résultats obtenus avec les géométries natives d'autoprotection dites de "développement" illustrées en figures 4.10 et 4.11 ci-dessus ont montrés des écarts avec Serpent2 particulièrement importants et ont ainsi suscité un questionnement sur l'impact des familles de cellules physiques d'autoprotection dans le schéma de calcul. Ces réflexions sont précisées ci-dessous.

Premièrement, les géométries natives DRAGON5 sont employées uniquement dans le cadre de l'autoprotection, le calcul de flux étant effectué sur géométrie ALAMOS comme mentionné précédemment. De plus, l'option REGI ALL du module USS: autoprotège un isotope de la même manière pour toutes les mixtures. En d'autres termes, la discrétisation en plusieurs familles de cellules physiques, c'est-à-dire des mixtures différentes, donc des propriétés différentes, n'a que, en théorie, peu d'impact pour cet isotope. L'option REGI MIX permet quant à elle d'autoprotéger par mixture, seules ou regroupées. Cette configuration est d'ailleurs utilisée dans le calcul par assemblage pour traiter l'²³⁸U par couronne, pour toutes les cellules combustibles présentant les mêmes concentrations isotopiques. De ce fait, traiter les mêmes couronnes des cellules simultanément revient à considérer une section efficace microscopique autoprotégée unique pour toutes les mixtures en question. Dans le cadre d'une autoprotection par mixtures regroupées, ou en ALL, nécessaires vis-à-vis du point de vue du temps de calcul, le "manque de discrétisation" des géométries natives est "moins dommageable" que dans un cas parfait et hypothétique où chaque isotope de chaque mixture est autoprotégé individuellement.

Deuxièmement, si l'influence de la définition de la géométrie native DRAGON5 et des options dans USS: est avérée dans le processus d'autoprotection, il en est, dans une moindre mesure, de même pour le calcul de flux. Les mixtures utilisées dans le cadre du calcul de flux sur géométrie ALAMOS sont générées à partir de celles définies dans les géométries natives, comme expliqué dans la section précédente. A chaque pas d'épuisement en évolution pour lequel un calcul d'autoprotection est réalisé, les mixtures des géométries natives sont prélevées à partir de la bibliothèque des mixtures ALAMOS. L'autoprotection est réalisée sur ces mixtures, puis la bibliothèque ALAMOS est à nouveau générée à partir de ces dernières, pour réaliser le calcul de flux. Ceci implique donc une uniformisation des données comme les taux de réactions et les concentrations isotopiques par famille de cellules physiques. A chaque pas d'autoprotection la localisation précise, à la cellule près, de l'information au sein du mini cœur est alors perdue, suivant la discrétisation de la géométrie native en familles de cellules physiques.

Cette dernière observation soulève donc une interrogation sur l'impact de la discrétisation de la géométrie native d'autoprotection. Ce point sera davantage détaillé en section 5.2.

4.4.4 Calcul de flux

La géométrie utilisée dans le cadre du calcul de flux est une géométrie de type ALAMOS, c'està-dire non générée par DRAGON5 comme le sont les géométries d'autoprotection précédemment présentées. La géométrie dont il est question ici est produite à partir d'une procédure réalisée par un logiciel indépendant développé au cours du projet dans le cadre de travaux annexes [16]. Tout d'abord, les assemblages sont générés dans leur entièreté à partir de leur géométrie ALAMOS, représentant uniquement le motif élémentaire de ceux-ci comme illustré par les figures 4.12 et 4.13.



FIGURE 4.12 – Géométrie ALAMOS 390GO.



FIGURE 4.13 – Géométrie ALAMOS 30AV5.

A la suite de cette étape, le 390GO, présent en périphérie du mini cœur, est copié cinq fois avant de procéder au "collage" des différents assemblages pour constituer le mini cœur, le réflecteur est alors ajouté. Enfin, une indexion des régions est réalisée, correspondant à une numérotation de mixtures dans ce cas présent. Finalement, la géométrie ci-dessous représentée en figure 4.14 est produite et directement employable sous DRAGON5.



FIGURE 4.14 – Mini coeur du KIT avec réflecteur tronqué et discrétisation du réflecteur [7].

Contrairement aux géométries MoC sectorisées, les géométries ALAMOS utilisées pour générer le mini cœur sont initialement prévues pour l'autoprotection dans le cas des calculs sur assemblage. Moins raffinées, ces géométries entraînent inévitablement une perte de précision sur le calcul de flux, mais sont bien plus simples à traiter pour générer un mini cœur. Ce nouveau compromis a été motivé par deux raisons : une géométrie plus simple à la fois dans sa création et son exploitation, ainsi que des fichiers de taille moins importante, compte tenu du nombre réduit de régions.

Il est à noter qu'à l'image de ce qui est réalisé dans le cadre des calculs sur assemblage, il est envisageable de générer une géométrie ALAMOS mini cœur ne le représentant pas en entier, mais par motif élémentaire en jouant sur les symétries de ce dernier. Cette opération permettrait de diviser par trois le nombre de mixtures pour le mini cœur objet de cette étude, allégeant ainsi d'autant la taille des bibliothèques et MULTICOMPO, problématique dans ce projet. De même, si les capacités de DRAGON5 le permettent à l'avenir, il serait intéressant d'utiliser une géométrie ALAMOS MoC sectorisée pour réaliser le calcul de flux. Ces deux propositions sont davantage détaillées dans la section 5.2.

Le calcul de flux est réalisé à l'aide du module FLU: par méthode des caractéristiques. Cette méthode a été retenue car adapté au cas d'étude : le solveur MoC est actuellement le seul capable de traiter un mini coeur, en un temps de calcul raisonnable. A partir du tracking et de la bibliothèque de mixtures, FLU: calcule le flux neutronique dans le mini cœur en se ramenant à un problème aux valeurs propres dans l'équation du transport : le terme de fissions est divisé par le KEFF, ce qui correspond à l'option "type K" dans le module. La solution fondamentale est la valeur propre maximale : le KEFF, seule valeur propre ayant un sens physique ici.

Cette dernière option, contrairement au "type B", n'intègre pas de modèle de fuite dans le but de correspondre aux calculs réalisés avec Serpent2. L'objectif des calculs réalisés est bien d'évaluer la précision de DRAGON5 par rapport à Serpent2 et non de fournir des données se rapprochant au plus de la réalité.

4.4.5 Bilan du schéma

Ainsi, le schéma de calcul retenu pour l'étude du mini cœur sous DRAGON5 développé précédemment reflète les multiples obstacles rencontrés au cours de son élaboration. Les différents compromis faits, comme le deuxième niveau de calcul de flux, impacte inévitablement la précision des résultats, mais sont nécessaires compte tenu des verrous technologiques évoqués dans cette section.

Ce schéma de calcul est finalement une démonstration technologique. L'objectif de cette étude est bien d'étudier la faisabilité de calculs mini cœur sur DRAGON5, et non la recherche de précision, bien que cette dernière ne soit pas écartée des travaux.

Il faut également rappeler que des modifications futures de DRAGON5 sont envisageables, levant alors des restrictions comme la taille de certains fichiers. Cette dernière perspective offrirait alors de nouvelles possibilités comme l'élaboration d'un schéma REL2005 mini cœur ou davantage de données exploitables dans les résultats. Ces propositions sont développées en section 5.2.

4.5 Dimensionalité

Afin d'illustrer davantage les difficultés relatives aux volumes des données mentionnées précédemment, les chiffres clefs du projet sont regroupées dans le tableau ci-dessous.

Étape	Donnée	Quantité
	Régions	291
Autoprotection	Mixtures	177
	Isotopes	50502
	Régions	
Calcul de flux	Mixtures	9060
	Isotopes	2715402
	Tracks	93726

TABLE 4.2 – Volume de données mini coeur DRAGON5.

A titre comparatif, pour un assemblage unique comme le 30AV5, il fallait compter 486 mixtures, et 1662 tracks pour le calcul de flux de deuxième niveau. Une attention particulière est à porter au nombre d'isotopes évoluants, supérieurs à 2,7 millions.

Un détail de la MULTICOMPO, objet phare de l'analyse des calculs DRAGON5, est présenté ci-dessous.

Produite à l'aide du module COMPO: de DRAGON5, la MULTICOMPO regroupe l'ensemble des données exploitées en post traitement des simulations numériques réalisées. Il s'agit d'un objet écrit en ASCII, ou en binaire pour réduire l'espace mémoire de ce dernier, regroupant toutes les informations sélectionnées en amont pour chaque pas d'épuisement sur lequel est réalisé le calcul. Les éléments constituant la MULTICOMPO produite dans le cadre de cette étude sont explicités ci-après.

- ISOTOPESLIST : la liste des isotopes, au nombre de six pour cette étude ;
- ISOTOPESDENS : les densités isotopiques;
- ISOTOPESVOL : le volume associé à chaque isotope ;
- ISOTOPESTEMP : la température des isotopes;
- MIXTURESVOL : le volume des mixtures qui forment la cellule;
- K-EFFECTIVE : le KEFF;
- K-INFINITY : le coefficient de multiplication infini (KINF);
- ENERGIE : la séparation en groupe d'énergie : deux groupes dans le cas présent ;
- DELTAU : la largeur en léthargie de chaque groupe.

De plus, des données spécifiques à chaque isotope sont éditées pour chacune des 2184 cellules, correspondant ici aux mixtures de la MULTICOMPO.

- AWR : Ratio de la masse de l'isotope divisé par la masse du neutron ;
- MEVF : Énergie en MeV produite par fission ;
- MEVG : Énergie en MeV produite par capture radiative;
- NWTO : le flux neutronique pour chaque groupe d'énergie;
- NFTOT : la section efficace microscopique de fission pour chaque groupe d'énergie ;
- NG : la section efficace microscopique de capture radiative pour chaque groupe d'énergie.

La figure 4.15 reprend l'architecture globale de la MULTICOMPO.



FIGURE 4.15 – Arborescence de la MULTICOMPO.

Il est à noter que le volume des données de sortie a été considérablement réduit pour l'étude du mini coeur. En effet, un travail d'optimisation sur les données écrites dans la MULTICOMPO a été réalisé afin de s'accorder avec les capacités de DRAGON5.

Enfin, le temps d'exécution des principaux modules dans le schéma de calcul mini coeur DRAGON5 présenté en section 4.4 est mentionné dans le tableau ci-après. Le calcul de flux a été réalisé avec 15 processeurs et avec un estimé initial plat.

Étape	Génération des mixtures	Calcul de flux		Édition des grandeurs
Module	LIB:	ASM:	FLU:	EDI:
Temps de calcul	2,7 heures	30 minutes	14 heures	23 minutes

TABLE 4.3 – Temps d'exécution des modules DRAGON5.

Les modules GEO:, USS:, LIB: pour la génération des bibliothèques des géométries natives d'autoprotection, EVO: et COMPO: ne figurent pas dans le tableau ci-dessus, leur temps d'exécution étant de l'ordre de la minute, voire de la seconde pour GEO: et COMPO:.

Il est impératif de rappeler que ces temps d'exécution ont été obtenus pour une simulation à épuisement nul sur 15 processeurs, et une MULTICOMPO comportant uniquement des valeurs globales, à savoir le KEFF et les différentes concentrations isotopiques sélectionnées, au nombre de 6 dans ce cas. Pour des grandeurs locales comme les taux de réactions, il faut compter 2 heures

pour l'édition de la MULTICOMPO. Dans le cas d'un calcul en évolution, le temps d'exécution moyen observé du module EVO: est de 30 minutes.

4.6 Schéma de calcul Serpent2

4.6.1 Paramètres de calculs Serpent2

Le tableau 4.4 ci-dessous rassemble les paramètres utilisés dans le cadre des calculs de référence sur le code Serpent2. Ainsi, le code de calcul Serpent2 n'a pas été soumis à de grandes modifications par rapport à l'étude précédente [2] afin de réaliser les simulations sur le mini coeur. Les calculs d'optimisation du code Serpent2 à l'échelle de la cellule et de l'assemblage ayant été mené dans l'étude précédente [2], aucune étude supplémentaire n'a été menée sur les paramètres de calculs, la seule modification à prendre en compte est celle sur les pas d'évolution afin d'obtenir une précision plus fine des résultats lors de l'étude sur le poids des barres de contrôle. Cet ajout de pas d'évolution demande un temps de calcul plus important mais la parallélisation de Serpent2 permet de réduire cette contrainte temporelle supplémentaire avec seulement un ajout de quelque heures sur le temps total de simulation.

Propriété	Description
Température modérateur	560.0K
Température : Doppler broadening	300.0 K (.03c) Interpolation type MC
Température : Thermal scattering	573.6 K (lwj3.11t) Interpolation type makxsf code
Puissance massique	$36.8577 \mathrm{~W/g} \mathrm{~[10]}$
Energy grid : 2 groups	0 à 625 meV & 625 meV à 19.64 MeV
Few-group structure	$2 \text{ groups (set nfg } 0 \ 0.625)}$
Résolution des équations d'évolution	Méthode de CRAM à l'ordre 14 (set bumode 2)
Conditions aux limites	black (set bc 1)
Population neutronique	16000 neutrons par cycle avec 500 cycles (20 inactifs)
Méthode d'intégration temporelle	CELI (set pcc 1)
Nombre de cellules génératrices	728 (312 par hexagone et 104 pour le losange)

TABLE 4.4 – Paramètres de calculs Serpent2.

Le code Serpent2 est un code stochastique, permettant l'étude du transport des neutrons, continu en énergie. Cette continuité en énergie pousse à l'étude de la "vie" du neutron de sa naissance, suite à une réaction nucléaire ou à partir de source externe, à sa disparition, par capture nucléaire ou fuite hors du domaine d'étude, lors de son ralentissement du aux différentes réactions nucléaires qu'il va subir. Cette étude précise du comportement neutronique étant plus détaillée qu'un code déterministe, elle est source d'un rallongement conséquent du temps de calcul que la parallélisation de Serpent2 permet de compenser dans une moindre mesure : les simulations sur la "vie" des neutrons ont lieu en parallèle.

Ainsi, afin d'obtenir des données permettant la validation du code DRAGON5, il est nécessaire de procéder à une séparation en deux groupes d'énergie pour obtenir les grandeurs de référence sur les plages d'énergie utilisées lors des simulations numériques sur DRAGON5. Dans ce sens, une séparation énergétique a été réalisé avec une frontière entre le domaine rapide et thermique fixée à 625 meV afin d'être conforme au domaine d'étude en référence [10].

Contrairement à ce qui a été fait pour les cellules et les assemblages, la condition aux limites définie pour le mini coeur est une condition de vide, **black** sur l'implémentation de Serpent2, et non plus périodique. Ainsi, un neutron dont la trajectoire mène vers la frontière du domaine d'étude, définie en noir sur la figure 4.2, sera considéré comme perdu ce qui entraîne sa disparition et la fin de l'étude de sa "vie" par Serpent2. Cette condition aux limites est conforme au modèle étudié sur DRAGON5 avec le module SALT: TISO avec l'étude d'un mini coeur dans un milieu fini et défini.

Le code Serpent2 comme tous les codes stochastiques utilise une population neutronique conséquente répartie au sein de différents cycles, 500 dans cette étude, pour pouvoir donner une estimation la plus fidèle de la réalité des grandeurs calculées. Ainsi, les neutrons vont évoluer dans le mini coeur et provoquer différentes réactions nucléaires qui vont mener, à terme, à leur disparition. Chaque neutron étant traité de la même façon et indépendamment des autres, son parcours est unique ce qui implique une répartition étendue des résultats. La taille de l'échantillon de neutrons de référence, huit millions dans l'étude, permet d'obtenir une estimation fiable du phénomène neutronique au sein du mini coeur. Afin d'obtenir une valeur représentative des phénomènes physiques rencontrés chaque calcul d'évolution est effectué en deux étapes en se référant à la méthode CELI : *constant extrapolation linear interpolation*.

Tout d'abord, une étape prédictive, qui consiste à faire une extrapolation constante des concentrations isotopiques. En effet, lors de l'étape i du calcul, les concentrations isotopiques de l'étape correctrice précédente i - 1 ou initiale i = 0 sont récupérées et considérées comme constante. Le flux de l'étape i est récupéré grâce aux équations de Boltzmann ce qui permet à terme d'obtenir des taux de réactions. A partir de ces taux de réactions et des équations d'évolutions, de nouvelles concentrations isotopiques sont déterminées et seront utilisées lors de l'étape correctrice i.

Lors de l'étape correctrice, les concentrations isotopiques ainsi obtenues permettent à l'aide d'un nouveau calcul de flux, différent de celui réalisé à l'étape prédictive, d'obtenir de nouveaux taux de réactions. Une interpolation linéaire entre les deux taux de réactions déterminés permet d'obtenir une valeur plus fidèle de la réalité des taux de réactions et des concentrations isotopiques avec les équations de Bateman.

Pour obtenir des données de référence exploitables dans des programmes de post traitement, il est nécessaire de définir de nombreux détecteurs. Ces détecteurs vont permettre de sélectionner pour différents matériaux, un isotope et la réaction nucléaire à récupérer. Le choix a été fait de conserver une analyse par cellule comme pour les assemblages, ainsi les couronnes combustibles sont regroupées et les résultats obtenus correspondent aux matériaux composants les différentes couronnes.

Dans cette étude, les fissions et captures radiatives sont les seules réactions analysées en post traitement ce qui nécessite la récupération des sections efficaces associées. Dans le but de réduire le temps de calcul, l'adoption de la symétrie du motif élémentaire a permis de déterminer le nombre exact de détecteurs nécessaires qui correspond à un tiers du nombre de cellules du mini coeur comme l'illustre le motif élémentaire. Le gain obtenu en minimisant le nombre de détecteur permet de réduire le temps de calcul et d'écriture des fichiers de sortie pour chaque pas d'évolution ce qui n'est pas négligeable pour une étape du processus qui n'est pas parallélisée.

4.6.2 Représentation du mini coeur

En raison de la symétrie des assemblages composants le mini coeur, triangulaire pour le 390GO et en losange pour le 30AV5, le motif élémentaire du mini coeur qui permettra une représentation simplifiée des grandeurs locales est composé d'un losange issu du 30AV5 joint avec deux assemblages complets de 390GO. Ce motif est représenté ci-dessous sur le mini coeur sans réflecteur.

Le motif élémentaire représente la matrice qui permet d'analyser la densité de puissance au sein des cellules du mini coeur. En effet, comme évoqué précédemment, obtenir des résultats sur ce motif est plus rapide et même si les calculs réalisés sur Serpent2 sont parallélisés sur 50 processeurs ce gain de temps est significatif.



FIGURE 4.16 – Motif élémentaire du mini coeur sans réflecteur.

4.6.3 Modification des pas d'évolution

Dans le but de réaliser des mesures de poids des absorbants de contrôle sur Serpent2 pour obtenir des résultats de référence qui seront à terme source de comparaison avec ceux issus de DRAGON5, il est important d'obtenir une plus grande précision au niveau des pas d'évolution proches des pas d'insertion de ces croix de contrôle. Dans ce but et grâce à l'utilisation de la parallélisation de Serpent2, l'ajout de 10 pas d'évolution entre 20 et 60 GWj/t permet d'améliorer la précision des calculs sans toutefois augmenter considérablement le temps de calcul. Le tableau suivant illustre la liste des pas d'épuisement utilisés dans l'étude du poids des croix de contrôle.

0.0	0.015	0.03	0.05	0.075	0.1125	0.15	0.2	0.25	0.375
0.5	0.625	0.75	0.875	1.0	1.25	1.5	1.75	2.0	2.25
2.5	2.75	3.0	3.25	3.5	3.75	4.0	4.25	4.5	4.75
5.0	5.25	5.5	5.75	6.0	6.25	6.5	6.75	7.0	7.25
7.5	7.75	8.0	8.25	8.5	8.75	9.0	9.25	9.5	9.75
10.0	10.25	10.5	10.75	11.0	11.25	11.5	11.75	12.0	12.5
13.0	13.5	14.0	14.5	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0
22.0	24.0	26.0	28.0	30.0	32.0	34.0	36.0	38.0	40.0
42.0	44.0	46.0	48.0	50.0	52.0	54.0	56.0	58.0	60.0

TABLE 4.5 – Liste des pas d'épuisement en GWj/t.

4.6.4 Les croix de contrôles

Les croix de contrôle étudiées sont composées soit d'un alliage de titane de disprosium Dy_2O_3 TiO_2 soit de carbure de bore B_4C . Les densités atomiques des isotopes composants ces croix de contrôles sont issues du projet CAMIVVER et disponibles en référence [10]. L'insertion des croix de contrôle est réalisée conformément à l'étude du KIT [7] au niveau de l'assemblage central du mini coeur.

L'objectif de l'étude étant de comparer ces deux types de croix pour déterminer leur fonction, il est nécessaire de comparer l'évolution du mini coeur avec plusieurs insertions de croix de contrôle à des pas d'épuisement précis. Le tableau 4.6 regroupe les différents pas d'études pour les évolutions sur le mini coeur.

10.0 20.0 30.0	40.0	50.0	60.0	
----------------	------	------	------	--

TABLE 4.6 – Liste des pas d'épuisement d'insertion en GWj/t.

Pour pouvoir avoir une situation de référence, le cas sans barre de contrôle servira de base pour la comparaison entre les deux types de croix de contrôles. Les principaux paramètres pour comparer les deux études de cas avec une insertion des croix de contrôles sont le KEFF et l'écart en réactivité Δk_{eff} .

Pour réaliser l'étude comparative entre les deux types de croix de contrôles, il faut modifier le code Serpent2 afin de pouvoir les insérer lors des pas d'épuisement définis précédemment. Il faut tout d'abord définir les cellules qui vont contenir les croix de contrôle comme elles le sont dans le document [10] du projet CAMIVVER. Le tableau 4.7 décrit la constitution d'une croix de contrôle, les caractéristiques de l'acier sont listées dans le document [10] et ne seront pas explicitées dans ce rapport.

Caractéristique	Valeur
Nombre de croix	18
Diamètre des absorbants	$0.70~{\rm cm}$
Diamètre extérieur de la gaine	$0.82~\mathrm{cm}$
Matériau de la gaine	Acier

TABLE 4.7 – Caractéristiques des croix de contrôle.

Une fois tous les matériaux définis, il faut utiliser le mot clé **branch** afin de définir le changement de matériau entre le tube guide vide et le tube guide avec la croix de contrôle insérée. Après cette étape, il faut utiliser le mot clé **coef** pour implémenter la liste des pas d'épuisement présentée dans le tableau 4.6. Après la réalisation de ces étapes, la simulation numérique de l'évolution du combustible peut débuter afin d'obtenir une évolution du mini coeur avec une insertion des croix de contrôles à des instants précis de l'évolution.

4.6.5 Influence des paramètres de simulations sur le temps de calcul

Lors des différents calculs réalisés sur Serpent2, les temps de simulations ont été influencés par l'utilisation de différents paramètres :

- le type de géométrie : cellules, assemblages, mini coeur avec et sans réflecteur ;
- le nombre de cellules combustibles : dépendant du type de géométrie ;
- le type d'informations recherchées : taux de fission, taux de capture radiative, spectre en énergie, grandeurs globales.

Ainsi, le cas le plus complexe représenté par l'obtention des taux de fission et de capture radiative pour chaque cellule du mini coeur nécessite un nombre de détecteurs conséquent, 728 dans le cas de cette étude. La partie calcul numérique étant parallélisée, son temps d'exécution pourra toujours être optimisée comme évoqué dans la section 5.2.4. La partie écriture des fichiers résultats comportant les résultats obtenus sur chaque détecteur pour chaque pas d'évolution n'étant pas parallélisée pour le moment, plus le nombre de détecteur ou le nombre d'information à récupérer augmente plus le temps d'écriture sera long et la simulation numérique s'étendra dans le temps. Il est donc important de déterminer le type d'information à obtenir en vue du post traitement pour optimiser le nombre des détecteurs et les données à récupérer depuis Serpent2.

4.7 Analyse des résultats

Les multiples difficultés rencontrées lors du développement ont pesé sur le calendrier des travaux : le schéma de calcul fonctionnel a été disponible tardivement dans l'étude. La contrainte temporelle dans la production de résultats a donc amené à minimiser le temps de calcul afin de pouvoir exploiter

les données produites. Il a donc été décidé de réaliser des calculs comportant un maximum de sept itérations, pas d'épuisements dans le cas présent, et respecter ainsi le calendrier fixé.

Deux études du mini coeur présenté en figure 4.14 ont alors été retenues. Un état stationnaire à épuisement nul, permettant de jauger les écarts initiaux au vu des approximations et simplifications de modèles au sein du schéma DRAGON5 déjà mentionnées précédemment. Une évolution jusqu'à 1 GWj/t, afin de démontrer la capacité du présent schéma à réaliser des calculs en évolution, et discuter de la cohérence des résultats ainsi obtenus au vu du comportement d'un réacteur à neutrons thermiques.

Bien que l'étude de poids des absorbants de contrôle n'ait pas été réalisée sur DRAGON5, les résultats obtenus sur Serpent2 sont tout de même présentés en annexe A dans une optique de future exploitation. La section 5.3.1 aborde les applications possibles de ces résultats.

4.7.1 Étude stationnaire à épuisement nul

4.7.1.1 Les grandeurs globales

La validation du schéma de calcul DRAGON5 se fait en premier lieu par l'examen des grandeurs à l'échelle macroscopique. Les écarts entre les deux codes sur le KEFF et les concentrations isotopiques en ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{135}Xe , ^{149}Sm et ^{157}Gd sont donc analysés pour le mini coeur. En toute logique, les valeurs présentées ci-dessous seront mises en perspective des critères de validation définis en section 3.1. Toutefois, il est impératif de souligner que ces critères sont définis pour un assemblage, et non un mini coeur.

Ainsi, le tableau 4.8 suivant regroupe les écarts obtenus entre DRAGON5 et Serpent2 pour les grandeurs globales à épuisement nul. Les écarts observés sur les concentrations isotopiques sont satisfaisants. Cependant, le KEFF obtenu avec DRAGON5 est de 0.99729 tandis que celui de Serpent2 est de 1.01071, générant ainsi un écart de 1342 pcm, bien supérieur aux écarts obtenus lors des études individuelles des assemblages 30AV5 et 390GO présentées en section 3.2.3. En effet, un écart de 300 pcm était accepté à l'échelle des assemblages, ici cet écart a presque quintuplé.

Cette augmentation certaine de l'écart sur le KEFF à l'échelle du mini coeur pourrait se justifier par les différents compromis réalisés dans l'élaboration du schéma de calcul DRAGON5. Ce dernier point sera davantage détaillé dans les sections suivantes.

Grandeur globale		Écart Serpent2/DRAGON5
k _{eff}		-1342 pcm
	^{235}U	0,28~%
Concentration isotopique	^{238}U	-0,005 %
Concentration isotopique	^{239}Pu	0~%
	^{157}Gd	-5,1 %
	^{135}Xe	0~%
	$149\overline{Sm}$	0 %

TABLE 4.8 – Écarts observés sur les grandeurs globales pour un épuisement nul.

4.7.1.2 Grandeurs locales

A l'image de l'étude menée en section 3.2.4, une analyse des taux de fissions et de capture radiative dans les deux groupes d'énergie thermique et rapide est réalisée sur le mini coeur. Au delà du processus de validation du schéma de calucl DRAGON5, l'objectif est ici de fournir une cartographie des erreur sur le motif élémentaire du mini coeur représentant l'écart relatif sur les réactions étudiées pour chaque cellule.

Afin de faciliter la lecture, les valeurs des écarts relatifs ne seront pas représentés sur les figures. Des moyennes algébrique et quadratique, écart-types, valeurs minimale et maximale seront donnés après chaque figure pour illustrer les différents écarts observés. Enfin, le nombre de cellules dont l'écart relatif sur l'erreur est inférieur à 4 % en valeur absolue sera aussi présenté afin d'obtenir un ordre de grandeur sur la proportion de cellules ne validant pas les critères précédemment évoqués.

Les isotopes retenus pour l'étude sont :

- ²³⁵U, ²³⁸U, ¹⁵⁷Gd, ²³⁹Pu, ¹⁴⁹Sm, ¹³⁵Xe

Étude des taux de capture radiative

Cette sous-partie fait l'objet d'une étude sur les écarts relatifs entre DRAGON5 et Serpent2 obtenus pour les taux de capture radiative dans les groupes thermiques et rapides.

Tout d'abord, la figure 4.17 représente les écarts sur les taux de capture radiative dans le groupe thermique.

Les écarts relatifs observés mettent en avant une forme de symétrie au niveau des assemblages 390GO en périphérie. En effet, les couronnes extérieures faisant directement face au réflecteur sans une proximité avec un autre assemblage 390GO ont une tendance à la surestimation, les erreurs les plus importantes ne sont pas au voisinage du réflecteur mais deux couronnes plus au centre du combustible pour des enrichissements en ^{235}U plus important. Au niveau des stiffeners à la jonction de deux assemblages 390GO et le réflecteur, une surestimation a lieu entre les deux assemblages et une sous estimation entre le réflecteur et le stiffeners. Les écarts relatifs pour les cellules empoisonnées au gadolinium ne font pas partie des plus importants tout comme leur proche voisinage. L'assemblage central est principalement sujet à des sous estimation en dehors des cellules avec du gadolinium et leur voisinage. Les écarts relatifs les plus faibles se trouvent proche du centre des assemblages périphériques.



FIGURE 4.17 – Écart relatif sur les taux de capture radiative dans le groupe thermique.

Le tableau 4.9 ci-dessous résume les différents écarts observables sur la figure précédente.

Grandeur (%)	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum	$ \acute{\rm e}{\rm cart} < 4~\%$
	0,77	$3,\!44$	3,36	10,1	-9,1	580 cellules

TABLE 4.9 – Grandeurs d'intérêts sur les taux de capture radiative dans le groupe thermique.

Ainsi, la moyenne des écarts relatifs est de 0,77 % avec une erreur relative maximale de 10,1 %,

les critères de validation utilisés à l'échelle de l'assemblage sont dépassés pour les extremum et ne semblent pas adaptés à l'analyse sur le mini coeur mais la valeur moyenne est satisfaisante. Cependant, compte tenu des modifications réalisées sur le schéma de calcul DRAGON5, ces critères serviront tout de même de référence en ayant un regard moins critique qu'à l'échelle des assemblages. Ainsi, la moyenne des écarts n'est pas très élevée par rapport aux critères des assemblages. De plus, avec plus de 78 % des cellules combustibles qui se trouvent sous les 4 % d'écart relatif en valeur absolue, les résultats mettent en avant une assez bonne estimation des captures radiatives dans le groupe thermique.

Ensuite, l'étude se poursuit avec les taux de capture radiative dans le groupe rapide afin d'observer le comportement des codes déterministe et stochastique dans les deux groupes d'énergie, la figure 4.18 illustre les écarts relatifs obtenus lors de cette étude.

La symétrie observée dans les écarts relatifs des taux de réactions pour le groupe thermique est atténuée dans le groupe rapide. Les tendances générales des estimations relevées dans le groupe thermique se prolongent dans le groupe rapide; cependant, l'observation faite concernant les écarts au niveau des stiffeners et du réflecteur se trouve réduite. En outre, les écarts relatifs les plus significatifs ne sont plus répartis sur plusieurs couronnes et sur la largeur de l'assemblage, mais se concentrent davantage près du réflecteur et sont moins nombreux, bien que leur valeur maximale ait augmenté. Le comportement des cellules avec du gadolinium n'a pas changé entre les deux groupes tout comme celui de leur voisinage.



FIGURE 4.18 – Écart relatif sur les taux de capture radiative dans le groupe rapide.

Le tableau 4.10 ci-dessous résume les différents écarts observables pour les captures radiatives dans le groupe rapide.

Grandeur (%)	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum	écart < 4 %
	0,51	$3,\!07$	3,03	11,5	-6,6	636 cellules

TABLE 4.10 – Grandeurs d'intérêts sur les taux de capture radiative dans le groupe rapide.

Ainsi, la moyenne des écarts relatifs s'établit à 0,51 %, ce qui garantit le respect des critères de validation des assemblages sans nécessiter une augmentation du degré de tolérance applicable pour le mini coeur. Les principales sources d'erreur sont situées dans les cellules de combustibles proches du réflecteur avec notamment l'erreur maximale qui se situe sur une cellule à la frontière entre l'assemblage 390GO et le réflecteur dont l'enrichissement en ^{235}U est plus faible qu'au centre de l'assemblage. La proportion de cellules dont l'écart relatif en valeur absolue est inférieure à 4 % a augmenté à 86 % ce qui est en accord avec l'écart relatif moyen et permet de se montrer satisfait des résultats obtenus.

Ainsi, l'étude des taux de captures radiatives sur le mini coeur fait l'objet de critique par rapport aux résultats obtenus sur les assemblages en début d'étude. Ainsi, l'interaction entre les assemblages et le réflecteur est source d'écart important au niveau des assemblages 390GO. De plus, l'interaction entre le réflecteur, les assemblages et les stiffeners provoque des écarts différents suivant l'environnement immédiat des différentes cellules : deux stifferners avec le réflecteur, un stiffeners et le réflecteur et deux stiffeners entre les assemblages 390GO c'est que l'on appelle un effet d'environnement. La prise en compte de cet élément spécifique au niveau du réflecteur suggère un problème de traitement de cette frontière entre trois milieux. A l'échelle du mini coeur, les disparités qui caractérisaient les cellules avec du gadolinium sur les assemblages par rapport aux autres cellules sont réduites en statique.

Étude des taux de fission

Après une étude sur les écarts relatifs des taux de captures radiatives, il est nécessaire de se concentrer sur les écarts relatifs entre DRAGON5 et Serpent2 obtenus pour les taux de fission dans les groupes thermique et rapide. Tout d'abord, la figure 4.19 représente les écarts sur les taux de fission dans le groupe thermique.



FIGURE 4.19 – Écart relatif sur les taux de fission dans le groupe thermique.

Cette figure rappelle celle des écarts relatifs des captures radiatives dans le groupe thermique. Cependant, les cellules empoisonnées au gadolinium montrent désormais une sous-estimation des valeurs par DRAGON5 par rapport à Serpent2. Le voisinage de ces cellules présente un comportement particulier, se traduisant principalement par une surestimation, similaire à ce qui a été observé dans l'étude des taux de capture radiative. L'effet d'environnement évoqué précédemment est toujours d'actualité et source d'écart suivant la position des cellules et leurs environnements. Le tableau 4.11 ci-dessous résume les différentes grandeurs caractéristiques de la figure précédente.

Grandour (%)	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum	écart < 4 %
Grandeur (70)	0,82	3,51	3,42	10,4	-8,9	569 cellules

TABLE 4.11 – Grandeurs d'intérêts sur les taux de fission dans le groupe thermique.

Ainsi, l'écart relatif moyen respecte toujours les critères de validation des assemblages avec une valeur de 0.82 % quand les extremums ne varient que très peu par rapport aux taux de capture radiative. Plus de trois quarts des cellules combustibles ont des valeurs d'écarts relatifs inférieur à 4 % ce qui permet de se satisfaire en partie des résultats obtenus sur le mini coeur.

Ensuite, il est intéressant de déterminer si les observations réalisées sur les écarts relatifs des taux de capture radiative du groupe rapide vont se retrouver comme pour le groupe thermique sur les taux de fission. La figure 4.20 représente la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe rapide.

Tout d'abord, les figures 4.18 et 4.20 ne sont pas similaires comme l'étaient celles des écarts relatifs sur le groupe thermique. En effet, la répartition des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe rapide conserve toujours une domination des surestimations en périphérie du combustible avec le réflecteur ainsi que des variations d'estimation à la frontière réflecteur - stiffeners assemblage 390GO suite aux effets d'environnement. Le comportement des cellules en gadolinium varie désormais selon leurs positions dans le mini coeur mais contrairement au groupe thermique, une cellule avec du gadolium qui sous estime les taux de fission possède un voisinage qui imite ce comportement. Certaines cellules au voisinage de ces poisons consommables présentent des valeurs plus importantes que sur les captures radiatives ou dans le groupe thermique ce qui constitue un phénomène nouveau par rapport à l'étude sur les assemblages.



FIGURE 4.20 – Écart relatif sur les taux de fission dans le groupe rapide.

Le tableau 4.12 ci-dessous résume les différentes grandeurs notables sur la figure précédente.

Grandeur (%)	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum	$ \acute{e}cart < 4 \%$
	-0,25	$2,\!25$	2,24	6,7	-5,0	690 cellules

TABLE 4.12 – Grandeurs d'intérêts sur les taux de fission dans le groupe rapide.

Ainsi, tout comme pour les écarts relatifs sur les taux de capture radiative dans le groupe rapide, l'écart relatif moyen est plus faible pour les taux de fission dans le groupe rapide et respecte les critères des assemblages. De plus, la diminution de la plage de variation des écarts relatifs permet de se montrer satisfait de la précision obtenue sur les résultats. En effet, ce ne sont plus que 6,5% des cellules combustibles qui présentent des écarts relatifs supérieurs à 4 % avec un écart relatif maximum de seulement 6,7%.

Les études précédentes ont permis d'appuyer les remarques réalisées sur le mini coeur pour les captures radiatives. En effet, la triple frontière présente également des écarts disparates pour les deux groupes d'énergie pour les fissions. L'influence du stiffeners et de la lame d'eau ainsi que du voisinage immédiat de ces éléments caractéristiques du combustible VVER est toujours présente à l'échelle du mini coeur.

Étude sur les taux de fission à deux groupes

Après une étude des taux de fission dans les groupes thermique et rapide, une étude des taux de fission sur la réunion des deux groupes est à mener. Ainsi, la figure 4.21 représente les écarts relatifs entre DRAGON5 et Serpent2 pour cette étude.



FIGURE 4.21 – Distribution des écarts relatifs sur les taux de fission à deux groupes.

Il est important de noter que la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission à deux groupes est très similaire à celle de la figure 4.19. En effet, les fissions dans un réacteur à neutrons thermiques comme les VVER ont lieu majoritairement dans le domaine thermique, c'est pour cette raison que la distribution des écarts sur les taux de réactions à deux groupes s'approche de celle dans le groupe thermique. Les cellules empoisonnées au gadolinium ne présentent pas d'écart relatif marqué comme dans les cas précédents. L'effet d'environnement entre le réflecteur, les stiffeners et les assemblages 390GO est toujours présent tout comme l'écart relatif maximal qui se trouve

toujours sur une cellule combustible dont l'enrichissement en ^{235}U est supérieur pour l'assemblage 390GO. Néanmoins, il est important de noter que l'écart relatif moyen diminue par rapport au groupe thermique comme l'illustre le tableau 4.13 suivant :

Grandeur (%)	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum	écart < 4 %
	0,60	3,16	3,11	9,2	-8,1	601 cellules

TABLE 4.13 – Grandeurs d'intérêts sur les taux de fission à deux groupes.

Cette étude est satisfaisante d'un point de vue écart relatif moyen puisque sa valeur respecte toujours les critères fixés lors de l'étude sur les assemblages. De plus, les extremum ont également diminué par rapport aux résultats du groupe thermique même si leur valeur demeure bien supérieure aux limites imposées sur les assemblages. En outre, le nombre de cellule dont l'écart relatif est inférieur à 4 % a augmenté. Pour aller plus loin et prendre également en compte les captures radiatives, une étude sur les taux d'absorption à deux groupes sera menée pour confirmer l'ensemble des observations précédentes.

Étude sur les taux d'absorptions à deux groupes

Dans le but de prendre en compte l'énergie issue des réactions de fission et de capture radiative dans les deux groupes au sein du mini coeur, une étude comparative a été réalisée en sommant les deux taux de réactions sur les deux groupes et en utilisant le flux de chaque groupe afin d'obtenir une image des taux d'absorption à deux groupes. Ainsi, la figure 4.22 représente les écarts relatifs obtenus entre DRAGON5 et Serpent2.



FIGURE 4.22 – Distribution des écarts relatifs sur les taux d'absorption à deux groupes.

Tout d'abord, la distribution des écarts relatifs sur les taux d'absorption reprend la même configuration que celles observées sur les taux de fission et de capture radiative à un groupe. Les principaux écarts observés se situent toujours dans la moitié d'assemblage 390GO qui se trouve face au réflecteur. Au niveau des cellules avec du gadolinium, les écarts relatifs font appel à des surestimations sur l'ensemble du mini coeur, mais les valeurs obtenues pour ces derniers sont plus faibles que les écarts générés entre le combustible et le réflecteur. Comme pour les taux de fission et de capture radiative dans le domaine thermique, les extremum sont obtenus sur les deuxième et troisième couronnes en périphérie du réflecteur et non directement au contact de celui-ci. Le tableau 4.14 apporte des précisions sur les différentes grandeurs obtenues pour les taux d'absorption à deux groupes.

Grandeur (%)	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum	écart < 4 %
	0,61	2,99	2,93	$_{9,0}$	-6,5	616 cellules

TABLE 4.14 – Grandeurs d'intérêts sur les taux d'absorption à deux groupes.

Ce tableau montre que l'écart relatif moyen est inférieur à la limite fixée sur les assemblages pour l'étude des différents taux de fission et capture radiative par groupe. Les écarts relatifs extrêmes sont moins importants que pour les études à un groupe d'énergie et pour une seule réaction à l'échelle du mini coeur. Ainsi, cette étude a permis de montrer que les phénomènes observés sur chaque réaction et chaque groupe se reproduisent aussi pour l'absorption.

En conclusion, après l'ensemble des études développées dans cette section, deux phénomènes observés sont à retenir :

- la génération d'erreur au niveau de l'interface stiffeners réflecteurs et assemblages voisins qui suggère l'apparition d'effet d'environnement au sein du mini coeur, non sans rappeler les précédentes conclusions sur les assemblages;
- la distribution ordonnée des erreurs avec une surestimation localisée sur les 390GO, principalement à proximité du réflecteur.

4.7.1.3 Paramètres de tracking et impact sur la précision

Devant les écarts observés sur les premiers résultats présentés précédemment, une démarche d'amélioration de la précision du schéma de calcul a été entreprise. Le calcul de flux étant réalisé sur géométrie non sectorisée, les efforts se sont rapidement concentrés sur les paramètres retenus pour le tracking de ladite géométrie.

Le tracking de la géométrie de calcul de flux est effectué à l'aide du module SALT: en condition isotrope, et non cyclique. A la manière de la méthode des caractéristiques, deux paramètres principaux interviennent dans la réalisation des tracks : le nombre de tracks par centimètre (en cm^{-1}) et le nombre d'angles, aussi appelé paramètre de quadrature angulaire, générant des angles équidistants selon lesquels les tracks seront établies.

Afin d'évaluer l'impact de ces paramètres sur la précision des résultats, des simulations à épuisement nul ont été lancées, avec différentes valeurs. Un seul paramètre a été modifié par calcul, la référence étant 25 points d'intégration par track et 18 angles, conformément aux simulations réalisées sur les assemblages. Les résultats obtenus sur les différentes simulations sont regroupés dans les tableaux ci-dessous.

Les écarts sont mesurés par rapport au cas de référence :

$$cas n - cas de référence$$

	Paramètres d'é	tude	Taux de fission thermique						
Cas	Nombre de track	Nombre d'angles	Moyenne	Moyenne quadratique	Écart-type	Maximum	Minimum		
Référence	25	18	0,82	3,51	3,41	10,43	-8,88		
1	40	18	0,00	-0,02	-0,02	-0,04	-0,03		
2	60	18	0,00	-0,02	-0,02	-0,04	-0,04		
3	80	18	0,00	-0,01	-0,01	-0,04	-0,03		
4	120	18	0,00	-0,01	-0,01	-0,03	-0,02		
5	25	36	-0,03	-0,03	-0,02	-0,09	-0,07		
6	25	54	-0,03	-0,03	-0,02	-0,07	-0,05		
7	124	54	-0,03	-0,02	-0,01	-0,06	-0,05		

TABLE 4.15 – Comparaison des paramètres de tracking par rapport à la référence pour les taux de fission thermique.

	Cas d'étude		Taux de capture radiative rapide						
Nom du cas	Nombre de track	Nombre d'angles	Moyenne	enne Moyenne quadratique É		Maximum	Minimum		
Référence	25	18	0,51	3,07	3,03	11,54	-6,62		
1	40	18	-0,05	-0,03	-0,02	-0,04	-0,03		
2	60	18	-0,06	-0,03	-0,03	-0,06	-0,03		
3	80	18	-0,06	-0,03	-0,02	-0,05	-0,04		
4	120	18	-0,05	-0,03	-0,02	-0,03	-0,03		
5	25	36	-0,07	-0,03	-0,02	-0,06	-0,04		
6	25	54	-0,07	-0,03	-0,02	-0,09	0,00		
7	120	54	-0,07	-0,03	-0,02	-0,07	-0,01		

TABLE 4.16 – Comparaison des paramètres de tracking par rapport à la référence pour les taux de capture radiative rapide.

La distribution des erreurs sur les taux de réactions reste identique à celle observée précédemment, comme le montre la figure 4.23.



FIGURE 4.23 – Distribution des écarts relatifs sur les taux de fission thermique avec 36 angles.

Le constat est immédiat : le changement de ces paramètres n'a pas, ou extrêmement peu, d'impact sur la précision des résultats. De plus, ce raffinement des paramètres de tracking représente un coût temporel quant à lui non négligeable, d'autant plus au vu du gain de précision apporté. Ainsi, le rapport gain de précision / augmentation du temps de calcul ne répond pas au cahier des charges d'un code déterministe. Les grandeurs globales obtenues lors de ces simulations ne sont pas présentées, les différences observées étant trop minimes.

Toutefois, ces dernières observations incitent à la réflexion. Il a été ici démontré que l'augmentation de tracks sur la géométrie de calcul de flux n'impliquait pas un gain de précision sur les résultats, contrairement à ce qui aurait pu être intuité. Ce constat peut donc laisser penser que la limite "physique" du présent schéma de calcul est atteinte : les résultats obtenus reflètent le maximum de ses capacités. Dans cette optique, chercher un gain de précision appelle alors à modifier ce

schéma de calcul, par exemple dans son autoprotection ou son calcul de flux. Des propositions d'amélioration sont détaillées dans le chapitre 5.

4.7.2 Étude en évolution

Le but de cette étude est double. Premièrement, démontrer la fonctionnalité en évolution du schéma de calcul mini coeur DRAGON5 développé dans ces travaux. Deuxièmement, comparer les résultats obtenus sur les grandeurs globales avec les tendances observées généralement sur les réacteurs à neutrons thermiques, et *a fortiori* les VVER. Dans cette optique ne nécessitant pas une étude à des épuisements particulièrement élevés, une liste restreinte présentée ci-dessous a été sélectionnée, répondant par la même occasion aux contraintes calendaires de fin de projet.

0.0	0.05	0.15	0.3	0.5	0.7	1.0

TABLE 4.17 – Liste des pas d'épuisement pour l'étude en évolution en GWj/t.

La figure 4.24, illustrant les résultats obtenus sur le KEFF, montre un début d'évolution cohérent : une décroissance brutale due à l'apparition des poisons neutroniques ^{135}Xe et ^{149}Sm , puis une pente plus douce une fois les concentrations à l'équilibre atteintes pour les deux poisons.

Une diminution modérée de l'écart relatif est également observable sur la figure 4.25 dès les premiers pas d'évolution après l'initialisation. Ce gain de précision n'est, actuellement, corrélé à aucun phénomène physique. Il pourrait résulter de compensations d'erreurs sur les écarts, comme la sous estimation par DRAGON5 des concentrations en ^{135}Xe et ^{149}Sm observée expérimentalement mais non présentée dans ce rapport. Malgré cette diminution, l'écart sur le KEFF reste hors des tolérances fixées sur les assemblages.



FIGURE 4.24 – Évolution du k_{eff} de 0 à 1000 MWj/t.

FIGURE 4.25 – Évolution du Δk_{eff} de 0 à 1000 MWj/t.

Concernant les isotopes fissiles, les résultats sont à mettre en perspective de différents phénomènes.

L'évolution de la concentration en ^{235}U représenté en figure 4.26 est conforme à celle observée dans un réacteur à neutrons thermiques, où les fissions sont principalement dues à l' ^{235}U .

L'écart observé sur la figure 4.27 est stable en évolution avec une légère tendance à la surestimation par DRAGON5, rappelant alors la compensation d'erreur évoquée précédemment comme justification de la diminution de l'écart sur le KEFF en évolution. Les résultats divergent des valeurs obtenues dans le cas des assemblages, où la tendance était à la sous estimation de la concentration par DRAGON5.





FIGURE 4.26 – Évolution de $[^{235}U]$ de 0 à 1000 MWj/t.

FIGURE 4.27 – Évolution de l'erreur relative sur le ${}^{235}U$ de 0 à 1000 MWj/t.

Le ^{239}Pu , produit par capture neutronique de l' ^{238}U montre également une évolution cohérente, mais avec des écarts entre les deux codes bien plus marqués. Dès le deuxième pas d'épuisement l'erreur dépasse les 3%, avant de se stabiliser en dessous du seuil de tolérance. Cette augmentation éphémère de l'erreur relève en réalité d'un artifice numérique. Pour autoprotéger un isotope sur DRAGON5, ce dernier doit exister dans une ou plusieurs mixtures de la bibliothèque concernée. Ce n'est pas le cas du ^{239}Pu à l'initialisation : aucune capture radiative par l' ^{238}U n'a encore eu lieu, il n'y a donc pas de ^{239}Pu , ou alors en quantité infinitésimale. C'est ce dernier point qui est exploité pour contourner la difficulté de l'autoprotection du ^{239}Pu à l'initialisation. La quantité de cet isotope est fixée dans les mixtures combustibles dans DRAGON5, à des valeurs extrêmement faibles afin de pouvoir l'autoprotéger dès l'épuisement nul, tout en s'approchant de la réalité physique décrite par Serpent2. Ainsi, l'écart observé à l'initialisation n'est pas représentatif des performances de DRAGON5, la quantité de ^{239}Pu étant fixée manuellement. Cette action peut alors biaiser les écarts observés en début d'évolution. De plus, le ^{239}Pu étant présent en très faible quantité en début d'évolution, la moindre difference de concentration entre les deux codes s'en voit exacerbée, d'où une erreur relative importante.





FIGURE 4.28 – Évolution de $[^{239}Pu]$ de 0 à 1000 MWj/t.

FIGURE 4.29 – Évolution de l'erreur relative sur le ^{239}Pu de 0 à 1000 MWj/t.

Pour compléter cette étude en évolution, les résultats obtenus sur le ${}^{157}Gd$ sont également présentés ci-dessous. Les erreurs sur le poison consommable sont toujours marquées : 5% dès l'initialisation avec une augmentation progressive de l'écart entre DRAGON5 et Serpent2, qui n'est pas sans rappeler la dérive observée sur les assemblages, atteignant plus de 40% aux alentours de 7 GWj/t. Non satisfaisants vis-à-vis des critères définis au niveau des assemblages, les résultats sur le ${}^{157}Gd$ restent conformes aux attentes, en perspective de la précision observée à épuisement nul sur cet isotope.





FIGURE 4.30 – Évolution de $[^{157}Gd]$ de 0 à 1000 MWj/t.

FIGURE 4.31 – Évolution de l'erreur relative sur le ${}^{157}Gd$ de 0 à 1000 MWj/t.

Cette étude aura finalement démontré la capacité du présent schéma DRAGON5 à réaliser des calculs en évolution. Bien que non satisfaisantes d'un point de vue précision d'après les critères définis pour les assemblages, les évolutions observées sur le KEFF ou les différentes concentrations isotopiques restent cohérentes avec les résultats obtenus à l'échelle inférieure. Conforme à la physique d'un réacteur à neutrons thermiques, les grandeurs globales présentées précédemment sont toutefois marquées par des erreurs importantes, dès l'initialisation. Ainsi, dans une recherche de précision supplémentaire, les travaux futurs devront se concentrer à l'état initial, la capacité de calcul mini coeur en évolution n'étant plus remise en question.

4.8 Conclusion partielle

Les évolutions du mini cœur objet de cette étude reflètent les difficultés rencontrées au cours du projet. Au même titre, le développement itératif du schéma de calcul rend compte des multiples obstacles engendrés par le volume de données à traiter, abordé en section 4.5. La montée en puissance progressive de DRAGON5 répond alors au défi du mini cœur déterministe. Cette validation se fait toutefois à un certain prix. L'architecture globale du schéma de calcul, ainsi que les méthodes avec lesquelles sont abordées certaines étapes comme l'autoprotection sont le résultat des multiples concessions au cours du développement.

En outre, une évolution de l'environnement de calcul est également à souligner. La parallélisation de DRAGON5, développée au cours de ce projet renforce la plus-value du code déterministe en diminuant encore le temps de calcul, nécessaire au vu du volume de données manipulé et des échéances calendaires des présents travaux.

Les résultats des différentes études menées appellent deux remarques principales. Tout d'abord, les valeurs obtenues, aussi bien sur les grandeurs globales que locales, sont cohérentes et décrivent bien le comportement d'un réacteur à neutrons thermiques. Cependant, les erreurs observées ne sont, selon les seuils de tolérance fixés sur les assemblages, pas satisfaisantes pour la plupart des grandeurs. Ce dernier point peut alors inciter à discuter de la pertinence de ces critères vis-à-vis du mini cœur.

De plus, les écarts observés au niveau des taux de réactions laissent penser à une cause physique, et non à une distribution purement statistique répartie sur l'ensemble du mini cœur.

Concernant les assemblages périphériques 390GO, la sous-estimation principalement localisée aux abords du 30AV5, et la surestimation située quant à elle à proximité du réflecteur sont présentes sur l'ensemble des réactions et des groupes étudiés. L'hypothèse d'un biais physique peut alors être avancée, probablement liée aux limitations du schéma développé dans cette étude : une autoprotection par assemblage, et un seul niveau de calcul de flux sur géométrie non sectorisée.

L'autoprotection réalisée par DRAGON5, assemblage par assemblage, comporte une condition aux frontières à souligner. L'estimation du flux servant à calculer les sections efficaces autoprotégées

est faite en milieu infini. Si cette hypothèse est tout à fait recevable pour le 30AV5, elle ne reflète cependant pas l'asymétrie du voisinage des 390GO et pourrait, potentiellement, être source d'erreur sur les sections efficaces calculées ici.

L'unique calcul de flux est réalisé sur une géométrie non sectorisée, contrairement aux géométries MoC, impliquant nécessairement une perte de précision. Les écarts observés sont donc à mettre en perspective de ce "point faible" du schéma. Enfin, au vu de la géométrie utilisée pour le calcul de flux, les résultats obtenus sur le mini cœur restent satisfaisants en comparaison des écarts sur les assemblages en schéma REL2005, avec deux niveaux de calcul de flux dont un sur géométrie MoC.

L'hypothèse d'un biais physique est renforcée par la discussion sur les paramètres de tracking : même en augmentant franchement le nombre d'angles et de tracks, les résultats ne gagnent pas, ou très peu, en précision. Cette dernière conjecture appelle alors à améliorer, ou même repenser, le présent schéma de calcul mini cœur. Des propositions d'approfondissement sont détaillées dans le chapitre suivant.

Chapitre 5 AVENIRS DU PROJET

Cette étude aura permis de compléter les travaux en référence [2]. Au-delà d'une simple extension aux assemblages 30AV5 et 390GO, le potentiel gain de la dilution et l'hypothèse sur le dépôt d'énergie ont pu être approfondis, renforçant ainsi la connaissance sur le calcul d'assemblages VVER sous DRAGON5 et Serpent2. Afin de capitaliser sur ces avancées annexes, le livrable de l'étude [8] a été mis à jour. De plus, dans le but de rendre accessible le fruit des travaux sur mini coeur présentés précédemment, un livrable spécifique a été créé. Compte tenu des nombreuses différences dans les objets manipulés ou l'architecture du schéma de calcul DRAGON5, le choix a été fait de développer un programme PYTHON3 directement inspiré mais distinct de ce qui avait été réalisé l'année précédente. Les détails concernant ces livrables sont présentés en section 5.1.1.

La mise à disposition d'un livrable mini cœur permet également l'approfondissement des travaux menés ou le départ d'une nouvelle étude. Les difficultés rencontrées ont donné lieu à des réflexions sur de potentiels axes d'approfondissement ou le futur de ce projet, évoqués au cours des sections précédentes. Ce chapitre revient davantage en détail sur ces propositions, en présentant le contexte de faisabilité et les ambitions de celles-ci. Une distinction est effectivement faite entre futur et axes d'approfondissement. Le premier se tourne davantage vers de nouvelles études et possibilités technologiques, lorsque le second se concentre sur des optimisations et expérimentations non explorées ici, mais réalisables au vu des observations effectuées au cours de ces travaux.

5.1 Livrables assemblage et mini coeur

5.1.1 Mise à jour du livrable assemblage

Le livrable issu de l'étude en référence [8] était déjà disponible sur le site de l'École Polytechnique de Montréal. Afin de bénéficier des dernières contributions de cette étude, à savoir la modélisation des assemblages 30AV5 et 390GO en schéma de calcul REL2005, le livrable à été mis à jour et est accessible depuis le site de l'EPM à la page de physique des réacteurs [5]. Hormis le programme VVER.py et les procédures attenantes, le reste de l'archive n'a souffert aucune modification.

Bien qu'ayant fait l'objet de discussions quant à sa plus value, la dilution a été conservée sur le 390GO. Cette décision se justifie par l'application détournée de cette géométrie "diluée" : la discrétisation plus fine de familles de cellules en périphérie d'assemblages permet de traiter la différence de voisinage au sein du mini coeur étudié ici.

5.1.2 Création du livrable mini coeur

Comme évoqué en introduction, un livrable spécifique au mini coeur a été créé afin de répondre au besoin d'accessibilité des résultats de cette étude.

Il a été jugé que les différences entre les objets manipulés dans le cas des assemblages et du mini coeur, ainsi que la densité du répertoire de procédures correspondantes, nuisaient à la compréhension et la prise en main d'un seul livrable. Toutefois, bien que peu confortable, il reste possible de regrouper les deux livrables pour en constituer un unique.

En l'état, le contenu de l'archive ainsi créée permet d'effectuer des calculs sur le mini coeur de
cette étude en choisissant différents paramètres d'autoprotection et de tracking ou encore la liste de pas d'épuisements à partir du programme VVER_MCORE.py.

L'architecture du livrable mini coeur reprend la même logique que dans le cas des assemblages. Son contenu est détaillé de manière non exhaustive ci-dessous :

- le programme VVER_MCORE.py, exécutable du schéma de calcul mini coeur DRAGON5, permettant de modifier les "macro paramètres de calcul" tels que les options d'autoprotection et de tracking;
- le répertoire VVER_MCORE_proc regroupant toutes les procédures du schéma de calcul appelées par le programme VVER_MCORE.py;
- la géométrie ALAMOS du mini coeur utilisée dans cette étude;
- le répertoire de résultats Serpent2 mini coeur ResultatSerpent2MCORE/;
- des programmes PYTHON3 de post traitement des données DRAGON5 et Serpent2.

Le livrable mini coeur est téléchargeable depuis le site de l'EPM à la page de physique des réacteurs [5]. Son contenu doit être installé dans l'arborescence suivante : /home/user/Version5_XX/PyGan/data.

5.2 Axes d'approfondissement

Des pistes d'améliorations ont également été développées lors de l'étude en référence [2]. Pour éviter toute redondance, la plupart d'entre elles ne seront pas mentionnées ici, bien que toujours d'actualité pour certaines.

Faute de temps ou de moyens technologiques, certaines problématiques de cette étude n'ont pu être pleinement explorées au cours de ce projet. Les axes d'approfondissement développés ci-dessous énoncent des possibilités jugées entreprenables dès à présent, à partir du livrable présenté précédemment.

5.2.1 Géométrie mini cœur MoC

Il a été précisé en section 4.4.4 que la géométrie mini cœur DRAGON5 de calcul de flux a été développée à partir d'une géométrie d'autoprotection. Une géométrie MoC, illustrée en figure 5.1, présentant une sectorisation et de ce fait davantage raffinée a également été développée au cours du projet. Les multiples difficultés rencontrées lors de l'avancement du schéma de calcul mini cœur DRAGON5 impactant le calendrier, cette géométrie n'a pas été exploitée.



FIGURE 5.1 – Géométrie mini coeur MoC agrandie

A l'image de ce qui avait été réalisé sur assemblage dans le cadre de l'étude en référence [2], une proposition d'approfondissement est d'utiliser cette géométrie MoC, aussi appelée "moulin à vent" dans le présent schéma de calcul mini cœur. La démarche envisagée est de conserver l'actuel schéma à un seul niveau de calcul de flux, et d'implémenter de nouveaux scripts d'autoprotection et d'édition de MULTICOMPO pour y intégrer les nouvelles mixtures de la géométrie MoC. Au-delà du potentiel gain en précision sur les résultats attendus, un point d'attention particulier est la faisabilité de cette proposition. Comme évoqué tout au long de ce rapport, les limites technologiques de DRAGON5 ont poussé à modifier itérativement le schéma de calcul afin de contourner ces difficultés. Bien que le schéma soit fonctionnel, des limitations sur les tailles d'objets sont encore présentes. Le nombre de régions augmentant considérablement en MoC, 224 301 contre 16 584 dans le cas de géométries sans réflecteur, la taille du fichier de calcul de flux constitue un point d'arrêt de cette démarche. Il apparaît alors pertinent de procéder à des essais, dans un premier temps à épuisement nul, afin d'éprouver DRAGON5 sur une géométrie MoC de mini cœur.

5.2.2 Géométrie native raffinée et autoprotection

Dans la section 4.4.3, il a été traité de l'autoprotection, plus spécifiquement de l'impact des différentes options "REGI", ainsi que de la constitution de la géométrie native sur laquelle se base l'autoprotection. La question qui se pose ici revient sur la possible plus value de la discrétisation de la géométrie native suivant les options considérées. Il est au préalable important de revenir sur le fonctionnement du module d'autoprotection. USS: calcule une estimation du flux par mixture sur la géométrie native et, à partir de ce flux et des options retenues, calcule les nouvelles sections efficaces autoprotégées multigroupes.

En considérant l'option la plus "restrictive", à savoir "REGI ALL", une seule et unique section efficace sera calculée pour l'isotope concerné. Ainsi, le flux sera moyenné sur l'ensemble de la géométrie pour déterminer la section efficace autoprotégée, qui sera partagée par toutes les mixtures.

En considérant maintenant une géométrie davantage discrétisée, comportant donc plus de mixtures, le flux calculé par USS: sera plus fin, déterminé à l'échelle de la mixture comme dans le cas précédent. Toujours avec l'option "REGI ALL", USS: va devoir déterminer une seule section efficace autoprotégée pour l'isotope en question. Le flux est alors ici aussi moyenné afin de déterminer la dite section efficace. Le même raisonnement est applicable à l'option "REGI MIX", dès lors que l'isotope est "partagé" par les mixtures en question.

C'est l'impact du flux moyenné en "REGI ALL" et "REGI MIX" sur une géométrie plus ou moins discrétisée qui suscite ici un questionnement. Une proposition d'approfondissement est donc d'étudier dans quelle mesure de l'information, et donc de la précision, est perdue en autoprotégeant un isotope sur plusieurs mixtures différentes.

La démarche ici pensée consiste à faire varier les options d'autoprotection d'un isotope afin de produire une ou plusieurs sections efficaces autoprotégées pour ce dernier. Par exemple pour l'²³⁸U, une première simulation avec des sections efficaces autoprotégées par couronne, comme effectué dans cette étude, puis une deuxième avec des sections efficaces différentes pour les couronnes combustibles des cellules en périphérie du mini coeur. Ce dernier cas retranscrit la composante spatiale de l'autoprotection en mettant davantage en évidence les effets de bord.

La comparaison des résultats de ces deux simulations avec la référence Serpent2 permettrait alors de statuer sur une possible perte de précision due à l'estimation du flux par USS: sur des sections efficaces "partagées". Répéter cette opération pour différents isotopes permettrait ainsi de cibler davantage ceux nécessitant une autoprotection fine par mixture, pour lesquels ce "partage" ne serait donc pas adapté.

Les résultats obtenus lors de l'étude à épuisement nul suggèrent une mauvaise prise en compte de l'asymétrie du voisinage des assemblages 390GO. L'autoprotection est, dans le schéma actuel, réalisée sur géométrie native, par assemblage. Il y a donc une symétrie de révolution par rapport au tube d'instrumentation, central, dans les sections efficaces autoprotégées, ne retranscrivant pas la réalité du mini coeur, comme explicité en section 4.8. L'axe d'amélioration développé dans les paragraphes précédents pourrait également être appliqué à cette problématique spécifique, par exemple en repensant la répartition des familles de cellules physiques au sein de l'assemblage périphérique du mini coeur.

5.2.3 Recherche sur les sources d'erreurs en début d'évolution

Des erreurs aux faibles épuisements avaient été remarquées lors de l'analyse des grandeurs globales dans l'étude en référence [2]. Les mêmes écarts ayant été constatés dans la première phase du projet, il avait été décidé de confronter l'hypothèse émise l'année précédente du dépôt d'énergie. Grâce à la récente disponibilité de la bibliothèque de données nucléaires PyNjoy2016, des investigations, détaillées en section 3.3, ont été menées et ont ainsi permis d'écarter cette piste comme source des erreurs observées. D'autres justifications restent à discuter et sont présentées ici.

Le pas de temps dans la résolution des équations de Bateman constitue une nouvelle piste. En effet, un pas trop important devant la période de décroissance d'un isotope amène à le considérer en saturation. Les écarts initiaux, avant stabilisation, pourraient alors être expliqués par un pas de temps inapproprié, forçant alors la saturation.

A l'instar des travaux en référence [2], il a été constaté dans la présente étude que le gadolinium est toujours marqué par des erreurs importantes sur les concentrations isotopiques. Le caractère neutrophage du gadolinium provoquerait alors une répercussion de l'erreur sur les autres isotopes. L'autoprotection du gadolinium, plus particulièrement une erreur générée lors du calcul par la méthode des sous groupes, pourrait potentiellement être à l'origine des écarts constatés en début d'évolution.

Ces deux pistes, encore au stade d'hypothèse, peuvent ainsi constituer de nouveaux axes de recherche, possiblement annexes en parallèle d'une autre étude.

5.2.4 Optimum de parallélisation

La parallélisation est la grande innovation de l'environnement de calcul de cette étude. Toutefois, les gains de temps ne sont pas les mêmes, à paramètres de parallélisation identiques, suivant les simulations considérées. Le choix "par défaut" dans cette étude était de 15 processeurs et 100 caractéristiques par paquet sur DRAGON5.

Les premières simulations bénéficiant de la parallélisation sous DRAGON5 ont montré que le calcul de flux sur le mini cœur était drastiquement plus rapide alors que l'assemblage ne semblait pas bénéficier de cette réduction de temps de calcul. En outre, il a été observé qu'avec ce choix de nombre de processeurs et de caractéristiques, le calcul sur assemblage était plus long que sans parallélisation. Contre intuitive, cette observation s'explique par la nécessité pour les processeurs de se resynchroniser afin de centraliser les données pour écrire un seul fichier flux. Le gain intrinsèque sur le calcul de flux est alors perdu, devant le temps additionnel de synchronisation des processeurs. Cette dernière conjecture montre qu'il existe bien un optimum de parallélisation, dépendant du cas considéré.

Ce dernier constat a donc amené à revoir l'architecture de la parallélisation développée sur DRA-GON5 afin de l'optimiser. Suite aux modifications effectuées, une série de simulations a été réalisée. Les premiers résultats semblent montrer une correction du phénomène précédemment cité. Les temps de calcul de flux diminuent avec un nombre de processeurs alloués croissant, comme illustré par la table 4.3. Toutefois, le plein potentiel de la parallelisation n'a pas encore ete explore. Actuellement, le calcul de préconditionnement des itérations internes du flux n'est pas parallélisé.

Le double paramétrage sur le nombre de processeurs et le nombre de caractéristiques par paquet pourrait donc être optimisé. Une proposition d'approfondissement de cette conjecture est de considérer un cadre d'étude dans un premier temps, assemblage ou mini cœur. Dans un second temps, des simulations seraient alors réalisées avec un nombre de processeurs fixe et les temps de calcul comparés pour différents nombres de caractéristiques par paquet. Une fois le nombre de caracteristiques optimal identifie, l'enjeu serait de correler ce dernier avec des donnees similaires pour des nombres de processeurs differents. Cette étude serait cependant à reprendre pour différentes géométries.

Serpent2 bénéficiant également de la parallélisation, un procédé analogue à celui précédemment énoncé est envisageable. Il sera alors question du nombre de processeurs uniquement pour déterminer un potentiel optimum de parallélisation, au vu des conjectures énoncées précédemment. Cette démarche, simple et empirique, permettrait d'apprécier les pleines capacités de la parallélisation mais représente un coût certain en temps, raison pour laquelle elle n'a pas été entreprise ici. Ainsi, elle pourrait être envisagée comme une étude annexe, menée en parallèle d'autres travaux. Enfin, dans une logique d'optimisation de temps de calcul, force et raison d'être des codes déterministes, cette proposition apparaît pertinente.

5.2.5 Étude en évolution complète mini coeur sur DRAGON5

Une étude en évolution a été présentée en section 4.7.2. Succincte et peu avancée en terme d'épuisement afin de répondre aux contraintes calendaires de ce projet, cette analyse mériterait d'être approfondie. En effet, une des ambitions premières des présents travaux était d'établir un schéma de calcul mini coeur en évolution et d'en analyser les résultats. Si le schéma de calcul DRAGON5 est fonctionnel en évolution, ses résultats n'ont pu être comparés à Serpent2 de façon pleinement satisfaisante.

La méthodologie ici proposée se déroule alors en deux phases. Dans un premier temps revenir sur l'étude à épuisement nul présentée précédemment pour statuer sur les origines des écarts observés entre DRAGON5 et Serpent2 afin de les palier. Dans un second temps, établir une liste de pas d'épuisements pour modéliser l'évolution. Ce dernier point présente un double enjeu : un raffinement suffisant pour limiter la dérive des écarts entre les deux codes, sans pour autant être trop important afin de pousser le calcul jusqu'à des épuisements élevés en un temps raisonnable pour un code déterministe.

La finalité est donc d'obtenir une dérive maîtrisée des erreurs en évolution jusqu'à des épuisements élevés, de l'ordre de 60 GWj/t à la manière de ce qui avait été fait sur les assemblages. Le temps de calcul reste dans cette perspective d'étude en évolution une préoccupation importante dans la mesure où la durée de calcul observée pour une étude stationnaire à épuisement nul est de plus de trois jours. Un volet optimisation, dont certaines pistes sont évoquées dans ce chapitre, se révélera probablement nécessaire afin de conserver un temps de calcul intéressant vis-à-vis d'un code stochastique tel que Serpent2.

5.3 Futur du projet

Il a déjà été fait mention du caractère précurseur et innovant de cette étude. La modélisation d'un mini coeur en évolution sur un code déterministe tel que DRAGON5 est une démonstration technologique qui ouvre sur des applications futures variées. Quelques propositions de travaux jugées pertinentes au regard des capacités de DRAGON5 et des ambitions initiales de ce projet sont présentées ci-dessous.

Contrairement aux axes d'approfondissement développés précédemment, ce qui figure ci-après nécessite des modifications conséquentes du schéma réalisé dans ce projet et appellent ainsi à être considéré comme des études à part entière. Enfin, ces propositions relèvent de l'expectative et ne reflètent en aucun cas un parti pris dans l'avenir de ce projet, mais bien des pistes de réflexions pour de futurs travaux.

5.3.1 Étude d'insertion de croix de contrôle sous DRAGON5

A la manière de l'étude du poids des croix de contrôle sur Serpent2 développée en annexe A, une analyse similaire sur DRAGON5 peut être envisagée à partir du schéma de calcul mini coeur développé au cours de ce projet. L'insertion des croix de contrôle serait modélisée ici en modifiant certains paramètres du schéma de calcul finalement retenu illustré en figure 5.2. Une proposition d'architecture est développée ci-dessous.



FIGURE 5.2 – Schéma de calcul mini coeur avec insertion de croix de contrôle

Le procédé proposé ici vise à modifier le pas d'itération entre deux calculs et la bibliothèque de mixtures. La composition isotopique des tubes guides serait modifiée pour adopter celle des absorbants de contrôle et simuler ainsi une extraction ou une insertion de barre.

Le choix du pas d'itération est alors particulièrement intéressant. Conserver un pas similaire à celui retenu lors de la présente étude permettrait de "peser" les barres de contrôle en cours d'évolution, tandis que s'orienter vers un pas de temps de l'ordre de la minute s'apparenterait davantage au cas étudié par le KIT dans le document en référence [7].

Cette étude, au-delà de fournir des données de comparaison, ouvrirait ainsi de nouvelles possibilités pour DRAGON5 en initiant les études incidentelles. Ainsi, de futurs travaux pourraient porter sur la modification du présent schéma de calcul afin de modéliser les cas précédemment cités.

5.3.2 Motif élémentaire ALAMOS

Il a été évoqué en section 4.4.4 que les calculs assemblages réalisés sur géométrie ALAMOS exploitaient la symétrie des assemblages en question. Ce procédé réduit le temps de calcul, mais aussi la taille des fichiers manipulés par DRAGON5. C'est ce second point qui est particulièrement intéressant dans le cadre du calcul sur mini coeur.

La section 4.4.2 discutait de la problématique de la taille de la bibliothèque de mixtures du mini coeur. La taille de la MULTICOMPO est directement impactée par cette dernière car éditée à partir de la dite bibliothèque. Il avait été ainsi mis en évidence que la MULTICOMPO, et donc la bibliothèque de mixtures ALAMOS, étaient les paramètres limitant de cette étude, compte tenu des capacités de DRAGON5.

Si l'augmentation des capacités de DRAGON5 est une solution, la réduction de la taille des fichiers l'est également. Ainsi, produire une géométrie ALAMOS reprenant uniquement la symétrie et non la totalité de la structure offrirait de nouvelles possibilités aux futures études de mini coeurs sur DRAGON5. En effet, réduire la géométrie complète à son motif élémentaire, c'est diminuer le nombre de mixtures, et donc la taille de la MULTICOMPO. A titre d'exemple, pour le mini coeur étudié ici, la taille des objets évoqués précédemment serait divisée par trois. A priori, il suffirait de remplacer le tracking TISO par un tracking TSPC et d'introduire des conditions de symétrie.

La pertinence de recherches dans ce domaine est à mettre en perspective de l'utilisation de géométries MoC, bien plus raffinées que celle utilisée ici, potentiellement à venir. Finalement, afin de prévenir un nouvel obstacle de taille de fichier, il serait opportun d'exploiter les motifs élémentaires de mini coeur à partir des travaux déjà réalisés et cités en référence [16].

5.3.3 Schéma REL2005 pour mini coeur

En début d'étude, la réalisation ambitionnée était un schéma REL2005 mini coeur semblable à celui utilisé dans les travaux en référence [2]. Les contraintes qui ont poussé à se tourner vers un schéma plus modeste ont été détaillées précédemment et faisaient état de problématiques de taille de fichiers.

A l'issue de ce projet, les capacités de DRAGON5 ont évoluées. Il est donc justifié de s'interroger à nouveau sur la faisabilité d'un schéma REL2005 mini coeur, dont une architecture est proposée en figure 5.3. Le gain en précision offert par l'ajout d'un calcul de flux de second niveau serait alors quantifiable, en comparaison des résultats obtenus dans cette étude.



FIGURE 5.3 – Architecture REL2005 mini coeur DRAGON5

Une difficulté probable est le support par DRAGON5 de deux géométries ALAMOS distinctes. En effet, il avait été précisé dans l'étude en référence [2] qu'il était difficile de construire un schéma de calcul assemblage avec deux géométries ALAMOS distinctes. Si cette contrainte est toujours d'actualité, la mise au point d'une géométrie native de mini coeur, basée sur les géométries gigognes pourrait potentiellement palier cette difficulté. Une proposition est d'exploiter l'outil GLOW, en cours de développement, afin de remplacer l'outil ALAMOS, non disponible à Polytechnique Montréal.

Enfin, à ce stade, le développement d'un schéma de type REL2005 pour le mini coeur parait indispensable.

5.3.4 Étude de cœur complet

Après avoir successivement porté sur la cellule, l'assemblage, et maintenant le mini coeur, la suite logique pour ce projet pourrait être d'étudier le coeur complet d'un VVER. Si les capacités de DRAGON5 ont pu être étendues au mini coeur, le défi du coeur entier représente un saut d'échelle inédit. Si le choix est fait de se tourner vers le coeur, la question du code déterministe se pose alors. Dans le cadre de cette étude, DRAGON5 a révélé un potentiel d'évolution suffisant pour fournir des résultats sur mini coeur, tandis que DONJON5 apparaît comme davantage approprié au vu de son périmètre d'emploi. Une réflexion est alors à initier, et un pari à faire suivant l'objectif fixé.

Dans une logique de développement de DRAGON5, il est pertinent de pousser à nouveau le code dans ses limites et de poursuivre son développement. Toutefois, ce projet à mis en exergue les difficultés à faire évoluer le code d'une échelle à une autre. Ce dernier point est à mettre en perspective de l'attente de résultats physiques, exploitables scientifiquement, à partir d'une étude de coeur complet sous DRAGON5. Il est nécessaire de garder en mémoire que ce saut dans l'inconnu ne garantit pas une réussite et peut ainsi interférer avec une potentielle obligation de résultats. Une étape intermédiaire sur un colorset pourrait alors se révéler judicieuse.

DONJON5 se présente alors comme une option plus sûre vis-à-vis de l'obtention de données physiques sur le coeur. Le calcul des données par assemblage réalisé par DRAGON5 pourrait être exploité par DONJON5 pour fournir des données à l'échelle du coeur. Une étude analytique sur la physique du coeur en évolution serait tout à fait appropriée à ce code, écartant cependant le versant de pur développement évoqué précédemment.

Ces quelques réflexions montrent ainsi différentes approches possibles pour l'étude du coeur. La pertinence de chacune dépendant de la finalité recherchée.

5.4 Conclusion partielle

Cette étude ne balaye pas l'ensemble des problématiques du mini coeur déterministe. C'est dans un contexte de transmission, et de potentielle exploitation lors de futurs travaux qu'un livrable mini coeur a été créé. Ce dernier contient l'ensemble des travaux développés ici, en particulier le schéma de calcul mini coeur.

Les axes d'approfondissement ont permis de revenir sur des ambitions avortées du projet, maintenant envisageables grâce aux modifications réalisées sur DRAGON5 au cours du développement. Ainsi, par le biais de certaines mises à jour, le présent schéma de calcul pourrait dépasser le stade de démonstrateur technologique et constituer un outil d'analyse de physique des réacteurs, exploitable dans des applications concrètes.

Au même titre, la section futur du projet mentionne des axes de recherches qui se veulent diversifiés. De l'étude spécifique sur mini coeur à l'application sur une autre structure, ces propositions montrent ainsi les multiples possibilités qu'offre le calcul déterministe sur mini coeur.

Chapitre 6 CONCLUSION

Afin de mieux peser les différents enjeux de ce projet, il est essentiel de recontextualiser la présente étude. Tout d'abord, la finalité du code de calcul déterministe est d'atteindre une précision pouvant rivaliser avec celle du code stochastique, mais en un temps drastiquement inférieur. En effet, le temps de calcul est un facteur clé dans une application industrielle où une multitude de simulations doivent être réalisées.

Toutefois, de par sa conception, le code stochastique constitue la référence des calculs neutroniques. Chercher la même précision sur un code déterministe revient à en oublier l'objectif de temps d'exécution réduit, et les méthodes de résolution employées. C'est pourquoi une discussion sur le rapport précision/temps de calcul devient l'évaluation la plus pertinente pour ce dernier. La confrontation se déroule alors sur plusieurs échelles : cellule, assemblage, mini coeur, voire coeur entier. C'est dans cette logique d'échelle croissante que s'inscrit la chronologie de ce projet.

6.1 Reprise du projet

Cette étude intervient au sein du projet CAMIVVER, à la suite de précédents travaux réalisés sur les cellules et assemblages. Afin d'assurer une cohérence, et donc une véritable continuité dans le projet, une phase préliminaire de travail sur les assemblages est donc apparue nécessaire.

Au-delà de la simple familiarisation, ces travaux ont permis de produire les assemblages constitutifs du mini coeur retenu pour l'étude, mais aussi d'explorer certaines des pistes d'amélioration énoncées par le passé. Cet approfondissement d'hypothèses justifie à lui seul la phase de travail préliminaire sur les assemblages. Faire évoluer les schémas déjà développés constitue un travail d'anticipation avant de passer à l'échelle supérieure. Ainsi, l'intérêt de ces travaux préliminaires est double.

Les résultats obtenus sur les assemblages 30AV5 et 390GO sont analogues à ceux observés l'année précédente sur des assemblages semblables dans leur constitution isotopique. Cette similarité dans les observations réalisées invite à se montrer satisfaits, mais permet aussi de dégager certains points d'autant plus remarquables.

La dérive du KEFF, dépassant les limites de validation, observée à 30 GWj/t reste présente. Cette dernière pourrait être exacerbée par l'écart en évolution sur l'²³⁵U aux mêmes épuisements, contributeur majoritaire des fissions dans un réacteur à neutrons thermiques, et de ce fait même, influençant le KEFF. Si une bonne précision en évolution est obtenue sur la plupart des isotopes, le gadolinium demeure la source d'erreurs majeure sur les concentrations. La présence récurrente d'un pic important à 10 GWj/t suscite toujours nombre de questionnements, certains s'orientant sur l'autoprotection de ce dernier. De même, les écarts à l'initialisation sur la plupart des isotopes restent encore inexpliqués, et au même titre que le gadolinium, invitent à de nouvelles recherches, certaines hypothèses s'étant révélées finalement non concluantes.

L'exploitation de la bibliothèque PyNjoy2016 sur Serpent2 a permis d'écarter la piste du dépôt d'énergie comme unique source des erreurs à l'initialisation. D'autres hypothèses, comme l'autoprotection du gadolinium ou les pas de temps dans la résolution des équations de Bateman, ont été avancées et restent à étayer. Une des conclusions sur les taux de réactions faisait état d'écarts plus importants sur les cellules en périphérie des assemblages. Si l'origine physique en a été clairement identifiée, à savoir l'absence de modélisation des stiffeners sur les géométries natives DRAGON5, le palliatif proposé s'est révélé discutable quant à sa plus value. L'étude menée à ce sujet révèle ainsi un gain situationnel, montrant alors par la même occasion un des multiples intérêts des géométries type ALAMOS.

Ces quelques travaux ont ainsi ouvert la voie vers le mini coeur. Se confronter à l'architecture du schéma assemblage existant et approfondir de potentielles pistes d'amélioration a permis de cibler plus aisément les besoins pour établir un schéma de calcul mini coeur fonctionnel sous DRAGON5.

6.2 Un saut d'échelle

Afin de capitaliser sur cette prise en main et assurer une pérennité aux outils déjà développés sous DRAGON5 dans le domaine du calcul déterministe sur VVER, tous les travaux entrepris sont directement inspirés de l'étude menée sur les assemblages. Ce parti pris s'illustre notamment par le livrable mini coeur produit, reprenant la même architecture que le schéma de calcul assemblage mais bien adapté aux spécificités propres de la structure étudiée ici.

Entreprendre la réalisation d'un schéma de calcul mini coeur sur DRAGON5 est avant tout un défi d'adaptation et d'évolution du code. Des modifications successives sur différentes fonctionnalités de DRAGON5 ont été nécessaires. Ainsi, la phase de développement a volontairement été décrite en détail dans ce rapport afin de rendre compte de toutes les contraintes technologiques rencontrées. Il est probable que l'étude d'un cas similaire puisse amener à être confronté aux mêmes difficultés, il a donc été jugé pertinent de mentionner les alternatives retenues pour les surmonter.

Le saut d'échelle que représente ce projet était un défi de taille. DRAGON5 n'était, dans sa conception initiale, pas prévu pour le calcul sur mini coeur, ce qui explique notamment les nombreuses contraintes de taille des fichiers rencontrées. Le temps de calcul, également impacté par le volume de données du mini coeur, a incité au développement de la parallélisation de la méthode des caractéristiques sur DRAGON5. OPEN MP a ainsi permis de se ramener à des durées raisonnables, une des priorités dans le cadre de simulations déterministes. Ces travaux répondent finalement à la question des mini coeurs déterministes : leur modélisation est possible, y compris pour une étude en évolution. Une fois de plus, DRAGON5 a montré un potentiel d'évolution certain. Après avoir démontré sa capacité à réaliser des calculs sur assemblage, le code déterministe rend aujourd'hui possible l'étude de mini coeurs.

Notre contribution démontre ainsi la faisabilité des mini coeurs sur code déterministe, mais n'exploite pas l'ensemble des possibilités ainsi rendues accessibles, comme le suggère la discussion des résultats obtenus.

6.3 Interprétation des résultats

Une fois le schéma de calcul mini cœur DRAGON5 fonctionnel, une première étude, à épuisement nul uniquement, a été menée afin d'évaluer ses performances. Plusieurs résultats sont à commenter.

Premièrement, les écarts observés sur les concentrations isotopiques sont très faibles. Ceci est cohérent, compte tenu du fait qu'il n'y a par définition pas d'évolution d'épuisement, ce qui limite de facto l'erreur sur les teneurs isotopiques.

Deuxièmement, le KEFF est marqué par un écart de 1342 pcm. Cette valeur peut sembler importante au vu de celles obtenues sur les assemblages 390GO et 30AV5, respectivement de 300 et 380 pcm. Cependant, le schéma de calcul mini cœur développé dans cette étude ne comporte qu'un seul niveau de calcul de flux, sur une géométrie non sectorisée, contrairement au schéma REL2005 avec lequel les valeurs précédemment citées ont été obtenues. En effet, l'absence de calcul de flux de deuxième niveau, a fortiori sur une géométrie MoC, constitue le principal point faible du schéma développé quant à la précision des résultats qu'il est en mesure de fournir, pouvant alors potentiellement expliquer cet écart important.

Les tolérances sur les différents écarts, définis sur les assemblages, nécessitent probablement d'être revues afin d'être applicable au mini cœur. En effet, l'interprétation et la valorisation des différentes

grandeurs dans l'analyse des résultats est une question qui illustre l'observation précédente. D'un point de vue "macroscopique", les moyennes des différentes concentrations isotopiques et des taux de réactions sont satisfaisantes, même pour des critères définis pour les assemblages. Néanmoins, les écarts maximums à l'échelle de la cellule, donc au niveau "microscopique", dépassent pour certains les 10%, inacceptable vis-à-vis des critères précédemment cités.

De plus, il n'existe actuellement pas de moyen de comparaison sur les résultats DRAGON5 mini cœur. Il est donc délicat de juger de la précision relative des résultats obtenus, d'autant plus que le schéma ne comporte qu'un seul niveau de calcul de flux comme évoqué précédemment. Ainsi, un cadre pour la validation des différents critères mérite alors d'être à nouveau défini.

Enfin, les valeurs discutées dans le cadre de ces travaux mettent en exergue une visible marge de progression sur la précision des résultats de DRAGON5. Cette dernière conjecture invite alors à envisager plusieurs suites pour cette étude.

6.4 Une étude qui appelle une suite

Ce projet a démontré la faisabilité, mais pas la limite de ce qui est concevable sur mini coeur sous DRAGON5. Les perspectives rendues envisageables ont donc appelé à la formulation de quelques axes d'approfondissement de cette étude, voire de nouveaux projets. Conscient des faiblesses du schéma ici développé, le travail de progression réalisé sur le calcul assemblage reste à reproduire, l'exemple le plus représentatif étant l'adaptation du schéma REL2005 au mini coeur. Le gain de précision ainsi généré appelle alors à la définition de critères de validation, similaires ou non, à ceux définis pour les assemblages. Dans le but, à terme, de parvenir à un schéma exploitable industriellement ou scientifiquement.

Cette démonstration technologique annonce probablement de nouveaux travaux sur mini coeurs déterministes. L'évolution progressive de DRAGON5 est notable. Les modifications dont il a bénéficié afin de palier les difficultés rencontrées offrent de nouvelles fonctionnalités, qui se traduisent par l'ajout de mots clés et paramètres dans certains modules. Son potentiel d'évolution à différentes échelles rend alors tentant d'extrapoler cette montée en puissance en envisageant le calcul coeur entier, peut être vers une poursuite du développement du code. Un bon indicateur pourrait être l'élaboration d'un colorset, constituant alors une étape intermédiaire pour évaluer la faisabilité d'un projet aussi ambitieux.

Annexe A ÉTUDE DU POIDS DES CROIX DE CONTRÔLE SUR SERPENT2

Cette annexe traite l'éjection de croix de contrôle au sein de l'assemblage central 30AV5 du mini coeur exposé en figure 4.2, inspirée des travaux du KIT en référence [7]. Initialement prévue pour une comparaison avec DRAGON5, cette étude n'a finalement été réalisée que sur le code stochastique compte tenu des contraintes calendaires du projet. Ainsi, en vue d'une future exploitation, les résultats obtenus sur Serpent2 sont présentés ici.

La particularité de cette étude est l'insertion des croix de contrôle sur une seule moitié de l'assemblage central. Par soucis de modélisation sur Serpent2, le choix a été fait de simuler une insertion des absorbants de contrôle sur l'intégralité des tubes guides de l'assemblage 30AV5. La simulation, conforme au protocole défini en section 4.6.4, a été réalisée pour deux types de croix de contrôle : en carbure de bore B_4C et en titanate de dysprosium Dy_2O_3 TiO_2 .

Une différence majeure dans l'interprétation des résultats de cette étude est l'expression de l'écart en réactivité utilisée ici. Précédemment égale à une simple différence de KEFF, l'écart en réactivité est maintenant exprimé à partir de l'inverse des KEFF avec et sans croix de contrôle insérées, selon la formule ci-dessous :

$$\Delta k_{\rm eff} = \left(\frac{1}{k_{\rm eff,\ croix\ insérées}} - \frac{1}{k_{\rm eff,\ croix\ extraites}}\right) \times 100000$$

A.1 Croix de contrôle en carbure de bore

Dans un premier temps, ce sont les croix de contrôle en carbure de bore B_4C qui ont été étudiées. La composition isotopique retenue pour ces dernières est identique à celle détaillée en référence [10].

A.1.1 Présentation des résultats

Les figures A.1 et A.2 ci-dessous représentent les évolutions du KEFF et de l'écart en réactivité. Pour rappel, les croix de contrôle sont insérées tous les 10 GWj/t.

Ainsi, la figure A.1 illustre bien le pouvoir neutrophage des croix de contrôle sur le mini coeur. Les diminutions brutales de KEFF sont caractéristiques de l'insertion des croix de contrôle et retranscrivent le caractère absorbant du ${}^{10}B$ et du ${}^{11}B$.

De plus, l'écart de réactivité en figure A.2 varie entre 5500 et près de 8300 pcm aux épuisements les plus élevés. Plus précisément, une augmentation du pouvoir antiréactif est observée au cours de l'évolution, contre intuitive au premier abord sachant que la composition isotopique des croix de contrôle est fixe tout au long de l'évolution.



FIGURE A.1 – Évolution du k_{eff} avec réflecteur et croix en B_4C .

FIGURE A.2 – Écart en réactivité Δk_{eff} avec réflecteur et croix en B_4C .

Une explication physique de cette augmentation du pouvoir antiréactif des croix de contrôle est proposée à la section suivante.

A.1.2 Analyse physique

Dans un premier temps, l'examen du flux avec croix de contrôle insérées au cours de l'évolution présenté en figure A.3 montre une augmentation continue, et sur tout le spectre énergétique jusqu'au domaine thermique, de ce dernier. En se ramenant à l'expression de base du taux de réaction, il est alors cohérent d'observer une augmentation du taux d'absorption.



FIGURE A.3 – Flux neutronique avec réflecteur et croix en B_4C insérées.

Cependant, cette logique est également applicable au taux de fissions. Sachant qu'une fission $d'^{235}U$ produit en moyenne 2,47 neutrons, l'augmentation du flux ne peut être la cause unique de l'augmentation du pouvoir antiréactif des croix au cours de l'évolution. Cette dernière conjecture amène alors à se tourner vers l'impact de la composition du combustible sur le KEFF au cours de l'évolution.

Le raisonnement qui suit se base sur l'expression du KEFF selon la formule des quatre facteurs, rappelée ci-dessous :

$$k_{eff} = \epsilon \times p \times f \times \eta \times P_{NF}$$

Avec :

- $-\epsilon$: facteur de fission rapide;
- p: facteur anti-trappe;
- -f: facteur d'utilisation thermique;
- $-\eta$: facteur de reproduction;
- P_{NF} : probabilité de non fuite.

Plus spécifiquement, le facteur d'utilisation thermique s'exprime comme suit :

$$f = \frac{N_c \times V_c \times \sigma_{a,c} \times \Phi_c}{N_c \times V_c \times \sigma_{a,c} \times \Phi_c + N_m \times V_m \times \sigma_{a,m} \times \Phi_m}$$

Avec :

- N_c : densité atomique du combustible;
- $-V_c$: volume du combustible;
- $\sigma_{a,c}$: section efficace microscopique d'absorption du combustible;
- Φ_c : flux dans le combustible;
- N_m : densité atomique du modérateur;
- $-V_m$: volume du modérateur;
- $\sigma_{a,m}$: section efficace microscopique d'absorption du modérateur;
- Φ_m : flux dans le modérateur.

De plus, en introduisant le rapport de modération R_m et le facteur de désavantage F_d , tout deux considérés constants en première approximation dans cette démonstration, f peut s'écrire :

$$R_m = \frac{V_m}{V_c}; F_d = \frac{\Phi_m}{\Phi_c}$$
$$f = \frac{1}{1 + \frac{R_m \times F_d \times \Sigma_{a,m}}{\Sigma_{a,c}}}$$

Avec :

— $\Sigma_{a,c}$: section efficace macroscopique d'absorption du combustible;

— $\Sigma_{a,m}$: section efficace macroscopique d'absorption du modérateur.

Après expérimentation numérique, le produit des trois autres facteurs de la formule des quatre facteurs avec la probabilité de non fuite est considéré comme constant lors de l'insertion des absorbants de contrôle. Les écarts relatifs de ce produit entre le cas où les croix sont insérées et celui où elles sont extraites au même pas d'évolution étant compris entre 0,4 et 0,8 % cette hypothèse est acceptable. L'écart en réactivité s'exprime alors :

$$\Delta k_{\text{eff}} = \frac{10^5}{\epsilon \times p \times \eta \times P_{NF}} \left(\frac{1}{f_{\text{croix insérées}}} - \frac{1}{f_{\text{croix extraites}}} \right)$$
$$\Delta k_{\text{eff}} = \frac{10^5}{\epsilon \times p \times \eta \times P_{NF}} \left[1 + \frac{R_m \times F_d \times \Sigma_{a,m}^{\text{ins}}}{\Sigma_{a,c}} - \left(1 + \frac{R_m \times F_d \times \Sigma_{a,m}^{\text{ext}}}{\Sigma_{a,c}} \right) \right]$$

Soit :

$$\Delta k_{\rm eff} = \frac{10^5 \times R_m \times F_d \times \Sigma_{a,\rm abs}}{\epsilon \times p \times \eta \times P_{NF} \times \Sigma_{a,c}}$$

Au cours de l'évolution, la quantité de noyaux fissiles diminue avec la consommation de combustible. La section efficace macroscopique d'absorption totale des noyaux fissiles, correspondant au produit des sections efficaces microscopiques d'absorption totale par la densité isotopique de chaque isotope fissile, suit alors la même variation. Finalement, le facteur d'utilisation thermique f, et par extension $\Delta k_{\rm eff}$ diminuent également.

De plus, il a été observé numériquement que le produit $\epsilon \times p \times \eta \times P_{NF}$ diminue lui aussi au cours de l'évolution, renforçant alors le phénomène explicité précédemment.

Ainsi, il est cohérent que le pouvoir d'antiréactivité des croix de contrôle augmente au cours de l'évolution, au vu de la consommation progressive des noyaux fissiles. L'évolution isotopique du combustible entraîne une augmentation, relative, du pouvoir d'antiréactivité des croix de contrôle.

Enfin, il est nécessaire de mentionner que cette démonstration est satisfaisante au titre d'une première approximation pour illustrer le phénomène physique développé précédemment. En réalité, le rapport de modération évolue avec l'insertion des croix : les tubes guides ne sont plus en eau, et le facteur de désavantage n'est lui aussi pas constant. Au même titre, la formule des quatre facteurs "discrétise" des grandeurs continues en énergie et reste, pour cette raison, aussi une approximation dans le cas d'un combustible complexe comportant plusieurs isotopes.

A.2 Croix de contrôle en titanate de dysprosium

Dans un second temps, l'étude s'est portée sur les croix de contrôle en titanate de dysprosium dont la composition isotopique est énoncée en référence [10]. Un phénomène similaire à celui observé avec les absorbants en carbure de bore est noté au niveau du pouvoir antiréactif. En effet, lors de l'insertion complète des croix de contrôle, les écarts en réactivité varient de 4300 à près de 6500 pcm en fin d'évolution comme l'illustre la figure A.4. Ce constat permet de souligner que les deux types de croix de contrôle étudiés n'ont pas le même poids d'antiréactivité, et n'auront probablement pas le même rôle au sein d'un coeur. Cependant, la même tendance à l'augmentation est observée sur ce deuxième type de croix de contrôle. Ici, le caractère neutrophage repose principalement sur la présence des différents isotopes du dysprosium, présentant une grande section efficace microscopique d'absorption.



FIGURE A.4 – Écart en réactivité Δk_{eff} avec réflecteur et croix en DyO_3 .

Au même titre que le carbure de bore, une étude sur l'évolution du flux neutronique lors de l'insertion des croix de contrôle au cours de l'évolution du combustible a été menée. Les résultats obtenus décrivent un phénomène analogue à celui observé précédemment. Ainsi, les mêmes justifications se basant sur la formule des quatre facteurs sont applicables à ce cas-ci.

A.3 Synthèse des résultats

Le tableau suivant reprend l'ensemble des valeurs obtenues pour les différents pas d'épuisement étudiés en fonction du type d'absorbant.

Type de croix	Épuisement (GWj/t)	Écart en réactivité (pcm)
B_4C	10	5455
	20	5517
	30	5891
	40	6537
	50	7313
	60	8325
$Dy_2O_3 TiO_2$	10	4241
	20	4390
	30	4541
	40	5204
	50	5746
	60	6494

TABLE A.1 – Écart en réactivité lors de l'insertion des croix de contrôle.

Finalement, l'évolution de la composition isotopique du combustible, en l'occurrence la consommation des noyaux fissiles, provoque une augmentation du pouvoir d'antiréactivité des croix de contrôle. Ce phénomène a également pour conséquence une modification du flux neutronique sur l'ensemble du spectre énergétique, au cours de l'évolution.

Cette variation du poids d'antiréactivité suscite une réflexion quant à la valeur de référence à attribuer aux croix de contrôle. Les études de sûreté imposent de prendre en référence le minimum des poids d'antiréactivité observés. Cette approche peut se révéler pénalisante dans le cadre d'une étude de chargement d'un coeur, où les assemblages n'ont pas tous le même taux d'épuisement. Par conséquent, une étude de croix de contrôle devrait débuter par une phase préliminaire cadrant le périmètre d'emploi des croix, afin de choisir la valeur la plus pertinente au vu du contexte.

BIBLIOGRAPHIE

- L. Ghasabyan. Validation of DRAGON5 lattice code for PWR applications using depletion benchmarks by detailed comparison with SERPENT2 Monte Carlo code. 2020. http://merlin.polymtl.ca/downloads/2020_LevonGhasabyan.pdf
- [2] L. Fede et M. François. Development of computational schemes with the DDRAGON5 lattice code for the simulation of VVER-1000 type reactor assemblies and validation with the Serpent2 stochastic code (in French). 2023. http://merlin.polymtl.ca/downloads/ ARCHIVE_VVER_20230912/CR_PFE_2023_28092023.pdf
- [3] J. Leppänen. SERPENT a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. 2013. http://merlin.polymtl.ca/Serpent_Dragon/Serpent_manual_2013.pdf
- [4] A. Hébert, G. Marleau and R. Roy. A USER GUIDE FOR DRAGON VERSION5. 2023. http://merlin.polymtl.ca/version5.htm
- [5] A. Hébert. *Polytechnique Montréal reactor physics archive page.* 2023. http: //merlin.polymtl.ca/archives.htm
- [6] SERPENT wiki. 2022. https://serpent.vtt.fi/mediawiki/index.php/Main_Page
- [8] L. Fede and M. François. Livrable DRAGON5 du projet POLYVVER. 2023. http://merlin.polymtl.ca/downloads/ARCHIVE_VVER_20230912/archive_VVER_DRAGON_ dataset_20230912.tgz
- [9] L. Fede and M. François. Post-traitement des résultats du projet POLYVVER. 2023. http://merlin.polymtl.ca/downloads/ARCHIVE_VVER_20230912/archive_VVER_ POSTTRAITEMENT_20230912.tgz
- [10] B. Vezzoni A. Willien. Definitions of tests cases for Verification and Validation of the multiparametric library generator prototype. 2021.
- [11] V. Valtavirta R. Tuominen and J. Leppänen. New energy deposition treatment in the Serpent 2 Monte Carlo transport code. Annals of Nuclear Energy, 129 :224-232, 2019. https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454919300726
- [12] D. Tomatis, F. Bidault, A. Bruneton and Z. Stankovski. Overview of SER-MA's Graphical User Interfaces for Lattice Transport Calculations. Energies, 2022. https://doi.org/10.3390/fr15041417

- [13] J.-F. Vidal et al. New modelling of LWR assemblies using the APOLLO2 code package. in Proc. Joint Int. Top. Mtg on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007), Monterey, California, USA, 15-19 april 2022. https://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:42109242
- [14] JEFF-3.1 Incident-Neutron Data. Los Alamos National Lab. https://t2.lanl.gov/nis/ data/jeff/neutron31.html
- [15] ENDF/B-VII.1 Incident-Neutron Data. Los Alamos National Lab. https://t2.lanl.gov/ nis/data/endf/endfvii.1-n.html
- [16] N. Weisse Contribution à la modélisation des coeurs de réacteurs VVER en VERSION5. Conception de géométries de mini coeurs VVER. 2024. http://merlin.polymtl.ca/ downloads/Rapport_Final_Nicolas_Weisse.pdf