

**CENTRALE
LYON**

**POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL**

UNIVERSITÉ
D'INGÉNIERIE



UE PRO
STAGE INGÉNIEUR
CENTRALE 2024 - 2025

Rapport de stage de césure Polytechnique Montréal

Stagiaire :

Pauline CHARNIN

Tuteur de stage :

Alain HÉBERT

Tutrice PCP :

Florence MILON

16 juin 2025

Remerciements

Je tiens à exprimer ma gratitude envers toutes les personnes qui m'ont accompagnée durant ce stage de césure à Polytechnique Montréal.

Je remercie tout d'abord Alain Hébert, mon tuteur de stage, pour m'avoir accueillie au sein de son équipe, pour sa disponibilité, sa rigueur scientifique et la confiance qu'il m'a accordée tout au long de ce projet. Ses conseils avisés et ses explications ont été essentiels à ma compréhension des enjeux complexes liés à la modélisation neutronique.

Je remercie également Centrale Lyon pour m'avoir offert l'opportunité de réaliser ce stage enrichissant à l'étranger dans le cadre de ma césure, ainsi que les enseignants de l'électif Ingénierie Nucléaire pour m'avoir transmis les bases solides nécessaires à sa bonne réalisation.

Je souhaite adresser un remerciement particulier à l'ensemble du groupe d'analyse nucléaire de Polytechnique Montréal pour leur aide précieuse lors de l'installation des outils, leur accompagnement dans les différentes simulations techniques, ainsi que leur soutien au quotidien. J'adresse une mention spéciale à Raphaël Guasch, doctorant au sein du groupe, pour sa contribution essentielle aux travaux menés sur le gadolinium.

Table des matières

1	État de l'art	4
1.1	Les outils de modélisation	4
1.1.1	Dragon	4
1.1.2	Donjon	5
1.1.3	PyGan	5
1.1.4	Serpent	5
1.1.5	OpenMC	6
1.2	Les phénomènes de dépôt d'énergie dans un réacteur nucléaire	6
1.3	Traitement des dépôts d'énergie dans les différents codes	7
1.3.1	Historique du modèle de dépôt d'énergie dans Dragon5	7
1.3.2	Méthodologie dans Serpent	8
1.3.3	Méthodologie dans OpenMC	10
1.4	L'élément Gadolinium dans un réacteur	10
1.5	L'erreur en évolution du Gadolinium	11
1.6	Cadre de simulation	14
2	Résultats et analyses	16
2.1	Migration de la bibliothèque de JEFF-3.1.1 à ENDF/B-VIII.1	16
2.2	Méthode d'extrapolation	17
2.2.1	Tests avec les mots-clés EXTR et NOEX	17
2.2.2	Extrapolation linéaire	21
2.2.3	Extrapolation parabolique	24
2.2.4	Schéma Prédicteur-Correcteur Couplé (PCC)	29
2.3	Modèle de dépôt d'énergie	33
2.3.1	Influence du modèle de dépôt d'énergie	33
2.3.2	Comparaison du mode de dépôt d'énergie et de la normalisation dans Serpent	35
2.3.3	Comparaison avec les options de corrélations des résonances : CORR vs NOCORR	39
2.4	Comparaison de bibliothèques	42
2.4.1	Présentation des bibliothèques	42
2.4.2	Résultats de la comparaison des bibliothèques	42
2.5	Comparaison Serpent/OpenMC	45
3	Bilan des résultats	47
4	La construction du projet professionnel	48
4.1	Le monde de la recherche	48
4.2	L'expérience de l'expatriation	48
4.3	Poursuite dans le secteur du nucléaire	49
5	Conclusion	49

Résumé

Ce stage de césure réalisé à Polytechnique Montréal s'inscrit dans une démarche de validation et de comparaison des modèles de dépôt d'énergie utilisés dans les codes de simulation neutronique Dragon5, Serpent2 et OpenMC. L'étude s'appuie sur une cellule de type $\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$, représentative des combustibles enrichis en poisons neutroniques. L'objectif principal était d'identifier et de quantifier les écarts d'évolution des isotopes Gd_{155} et Gd_{157} entre les différents codes, en analysant les sources physiques et numériques de divergence. Plusieurs axes ont été explorés : les méthodes d'extrapolation temporelle, les schémas d'intégration, les modèles de dépôt d'énergie (prise en compte du rayonnement gamma), ainsi que l'impact des bibliothèques de données nucléaires utilisées. Les résultats montrent l'importance d'un traitement cohérent du dépôt d'énergie pour garantir la précision des prévisions sur la réactivité du cœur (K_{eff}) et l'évolution isotopique. Ce travail met en évidence les limites des modèles standards de dépôt d'énergie lorsqu'ils sont utilisés pour la normalisation des taux de réaction dans les simulations de combustibles dopés au gadolinium, et propose d'intégrer un traitement KERMA dans Dragon ainsi que d'harmoniser les formalismes entre codes afin de garantir une normalisation cohérente des taux de réaction.

Abstract

This gap-year internship at Polytechnique Montréal focused on the validation and comparison of energy deposition models implemented in the neutron transport simulation codes Dragon5, Serpent2, and OpenMC. The study was based on a $\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$ fuel cell, representative of configurations using strong neutron absorbers. The main objective was to identify and quantify discrepancies in the isotopic evolution of Gd_{155} and Gd_{157} between the codes, by analyzing both physical and numerical sources of divergence. Several aspects were investigated : time extrapolation techniques, predictor-corrector integration schemes, energy deposition models (including gamma-ray contributions), and the influence of the nuclear data libraries employed. The results highlight the importance of consistent energy deposition treatment to ensure accurate predictions of core reactivity (K_{eff}) and isotopic evolution. This work highlights the limitations of standard energy deposition models when used for the normalization of reaction rates in simulations of gadolinium-doped fuels, and proposes the implementation of a KERMA-based treatment in Dragon, as well as the harmonization of formalisms across codes to ensure consistent normalization of reaction rates.

Introduction

L'industrie nucléaire s'appuie aujourd'hui sur divers simulateurs de plus en plus sophistiqués pour concevoir, analyser et optimiser les réacteurs (Référence [1]). Pour être fiables, ces outils doivent décrire avec précision le transport neutronique, la génération de chaleur et l'évolution isotopique du combustible sous irradiation. Parmi les matériaux utilisés, les combustibles $UO_2-Gd_2O_3$ jouent un rôle clé : le gadolinium, en particulier les isotopes Gd_{155} et Gd_{157} , agit comme poison neutronique consommable et module la réactivité du cœur. Maîtriser son comportement numérique est donc essentiel, tant pour garantir la sûreté des installations que pour optimiser le cycle combustible.

Nous avons comparé le code Dragon à deux codes de référence, Serpent et OpenMC. Ces trois codes illustrent les différentes méthodes de simulation :

1. Dragon 5 (Polytechnique Montréal [3]) repose sur un couplage déterministe transport/évolution hérité de plus de trente ans de développement.
2. Serpent2 (VTT, Finlande [4]) propose une approche Monte Carlo très flexible, avec plusieurs modes de dépôt d'énergie (edepmode).
3. OpenMC (MIT, États-Unis [5]) combine Monte Carlo et modules de déplétion open-source, dont une récente option "energy-deposition".

Ce stage s'inscrit dans la continuité des travaux réalisés à Polytechnique Montréal en 2023 et 2024 (Références [6] et [7]), notamment le rapport de précédents stagiaires sur des réacteurs VVER ukrainiens, qui mettait en évidence une forte dépendance des résultats d'évolution du Gadolinium au modèle de dépôt d'énergie employé dans les calculs Monte Carlo. L'objectif de ce travail est donc de reproduire et d'analyser cette erreur d'évolution à l'aide d'un cas benchmark représentatif (cellule simplifiée de type pincell $UO_2 - Gd_2O_3$ à température constante), en comparant de manière rigoureuse les résultats obtenus avec Dragon5, Serpent2 et OpenMC. Le but final est d'identifier les causes physiques et numériques de l'écart observé sur l'évolution sous irradiation du Gd_{157} afin d'obtenir des résultats numériquement acceptables ainsi que d'évaluer la validité des hypothèses et modèles employés par chacun des codes.

1 État de l'art

1.1 Les outils de modélisation

Dans le cadre des simulations, différents outils de modélisation ont été utilisés.

1.1.1 Dragon

DRAGON est un code de transport neutronique développé au sein de Polytechnique Montréal. Il permet la génération de sections efficaces homogénéisées utilisées dans les calculs de réacteur. Ce code est basé sur plusieurs méthodes de transport déterministes pour résoudre l'équation de transport, notamment la méthode des probabilités de collision, la méthode SN (discrétisation angulaire) et la méthode des caractéristiques (MoC), qui consiste à intégrer l'équation le long de trajectoires caractéristiques dans le milieu. Il utilise un formalisme multigroupe avec un maillage énergétique défini, permettant de modéliser

précisément les interactions neutroniques dans des géométries complexes. DRAGON est principalement utilisé pour la modélisation de cellules élémentaires et l'homogénéisation des paramètres neutroniques.

Ce code permet de générer des sections efficaces en fonction des conditions de fonctionnement. Son principal avantage est l'obtention d'une modélisation précise des interactions neutroniques dans les géométries complexes.

1.1.2 Donjon

DONJON est un code de diffusion neutronique utilisé pour la simulation de réacteurs à l'échelle du cœur. Il fonctionne en conjonction avec DRAGON, exploitant les sections efficaces générées pour calculer la distribution de puissance et la réactivité du réacteur. DONJON est basé sur la théorie de la diffusion ou sur la méthode SPN, qui sont des approximations de l'équation du transport neutronique.

Ce code permet de simuler l'évolution neutronique d'un réacteur sur de longues périodes. Son principal avantage est l'efficacité des calculs de cœur grâce à la rapidité des méthodes de diffusion. Cependant, la théorie de la diffusion (ou les méthodes SP_n) perd en précision dans les environnements faiblement modérateurs ou contenant des régions vides, où le transport devient fortement anisotrope et les hypothèses de la diffusion ne sont plus valides.

Ce code n'est pas intégré au rapport ci-dessous, dans la mesure où l'étude se limite à une cellule simplifiée et ne concerne pas un cœur entier.

1.1.3 PyGan

PyGan est une interface Python3 développée pour faciliter l'utilisation des codes DRAGON et DONJON. Elle permet d'automatiser certaines tâches répétitives et de standardiser l'écriture des scripts d'entrée, ainsi que d'obtenir des graphiques en Python.

Le principal avantage de cette interface tient à sa prise en main facilitée, grâce à son intégration en Python, tout en contribuant à réduire les erreurs humaines lors des simulations. Cependant, une bonne maîtrise des outils utilisés est nécessaire pour l'exploiter efficacement.

1.1.4 Serpent

SERPENT est un code Monte-Carlo développé par le VTT Technical Research Centre of Finland, utilisé dans la simulation du transport des neutrons pour des applications en physique des réacteurs et en neutronique. Il permet de simuler le comportement des neutrons en utilisant une approche stochastique, offrant ainsi une grande précision dans les résultats.

Ce code se distingue par l'utilisation de techniques d'optimisation, telles que l'importance sampling et la modélisation en énergie continue (continuous-energy), c'est-à-dire

sans regroupement énergétique préalable, ce qui permet une meilleure résolution des phénomènes neutroniques. SERPENT est compatible avec plusieurs bases de données nucléaires, ce qui permet de comparer les résultats avec différentes bibliothèques de sections efficaces. De plus, il est capable de modéliser des géométries complexes, comme des réacteurs entiers ou des assemblages combustibles détaillés. Cependant, bien que son temps de calcul soit optimisé, il reste relativement élevé pour les grandes simulations.

1.1.5 OpenMC

OpenMC est un code Monte Carlo open-source développé initialement par le MIT, utilisé pour simuler le transport des neutrons, notamment en énergie continue. Il est conçu pour fonctionner efficacement sur des architectures de calcul haute performance, avec la prise en charge du calcul parallèle via MPI et OpenMP. Cela en fait un outil bien adapté aux simulations de grande taille.

Grâce à son interface Python, OpenMC permet de modéliser des configurations complexes, comme des réacteurs nucléaires entiers, et de l'intégrer facilement à d'autres outils d'analyse. Il est compatible avec plusieurs bibliothèques de données nucléaires, comme ENDF/B ou JEFF, ce qui élargit ses possibilités d'utilisation.

Bien qu'il soit libre, personnalisable et de plus en plus utilisé dans le milieu académique, OpenMC reste encore peu présent dans l'industrie, notamment en raison de ses temps de calcul importants pour les simulations complexes et de la rigueur nécessaire dans la validation des modèles. Il est toutefois reconnu pour sa flexibilité et son potentiel d'évolution.

Remarque : Cette étude propose une validation code à code en comparant les résultats du code déterministe Dragon, qui résout l'équation de transport neutronique via des méthodes numériques approchées, à ceux des codes Monte Carlo Serpent et OpenMC, ces derniers servant de référence grâce à leur modélisation fine du transport neutronique par simulation statistique des trajectoires individuelles.

1.2 Les phénomènes de dépôt d'énergie dans un réacteur nucléaire

Les phénomènes de dépôt d'énergie dans un réacteur nucléaire jouent un rôle fondamental dans le contrôle de la réactivité et la gestion thermique du cœur (Référence [8]). Lorsqu'un neutron entre en collision avec un noyau atomique, une partie ou la totalité de son énergie est transférée au noyau cible, ce qui peut entraîner des excitations ou des fissions. Ces interactions conduisent à un dépôt d'énergie dans les matériaux environnants, entraînant une production de chaleur, ce qui constitue le mécanisme principal de la génération d'énergie dans un réacteur.

Dans un réacteur, les phénomènes de dépôt d'énergie peuvent être classés selon différents mécanismes de transfert d'énergie, qui sont influencés par les propriétés physiques des matériaux présents dans le cœur du réacteur, tels que le combustible nucléaire, les modérateurs et les absorbeurs de neutrons (Référence [9]). Les principaux processus responsables du dépôt d'énergie sont :

La fission : La fission nucléaire est le processus principal de génération d'énergie dans un réacteur. Lorsqu'un noyau fissile (comme l'uranium-235 ou le plutonium-239) capture un neutron, il a une forte probabilité de se diviser en deux noyaux fils et de libérer une grande quantité d'énergie sous forme de chaleur (environ 200 MeV par événement de fission), ainsi que plusieurs neutrons. Cette chaleur est ensuite transportée par les fluides caloporteurs pour être convertie en énergie électrique. La gestion de la répartition de cette énergie est essentielle pour maintenir un fonctionnement stable du réacteur.

La capture neutronique : En plus de la fission, des phénomènes de capture neutronique jouent également un rôle important. Certains isotopes, comme le gadolinium, capturent les neutrons sans fissionner, ce qui entraîne également un dépôt d'énergie. Bien que ce processus soit moins puissant que la fission, il a un impact important dans les zones du réacteur où la densité en neutrons est élevée, notamment dans les régions proches des matériaux de contrôle et de modération.

La diffusion neutronique : Les neutrons thermiques qui interagissent avec des modérateurs (comme l'eau légère ou lourde) subissent des phénomènes de diffusion. Ces collisions successives transfèrent une partie de l'énergie des neutrons aux noyaux du modérateur, produisant également un dépôt d'énergie. Bien que ce processus soit plus étendu que les phénomènes de capture, il joue un rôle secondaire dans la gestion thermique.

L'activation neutronique : Les neutrons peuvent également interagir avec des matériaux structuraux du réacteur (tels que le zirconium ou l'acier inoxydable), provoquant des réactions d'activation. Ces réactions génèrent des isotopes radioactifs et libèrent de l'énergie sous forme de chaleur. Bien que ce phénomène soit moins significatif que les autres processus de dépôt d'énergie, il est pris en compte dans la gestion thermique globale du réacteur.

Les effets thermiques indirects : En plus des phénomènes directement associés aux interactions neutroniques, des effets thermiques indirects, tels que la dilatation thermique des matériaux et les changements dans les propriétés physiques des matériaux à haute température, peuvent également contribuer au dépôt d'énergie. Ces effets doivent être modélisés pour garantir la sécurité et l'efficacité du réacteur, car ils influencent la réactivité et la performance des matériaux combustibles.

Ces phénomènes sont modélisés en tenant compte de la densité de population des neutrons, des variations de température et des changements de composition au fur et à mesure que le réacteur fonctionne, ce qui rend leur simulation particulièrement complexe.

1.3 Traitement des dépôts d'énergie dans les différents codes

1.3.1 Historique du modèle de dépôt d'énergie dans Dragon5

Le modèle de dépôt d'énergie actuellement utilisé dans Dragon5 a été développé au cours des 30 dernières années. Il se distingue par sa capacité à dissocier les contributions

énergétiques des neutrons et des rayons gamma, contrairement à d'autres codes de simulation qui se basent principalement sur l'énergie totale libérée par la fission.

Dans Dragon5, plusieurs contributions énergétiques sont prises en compte :

- L'énergie de fission (E_{fission}), qui est de l'ordre de 185 MeV.
- L'énergie issue de la capture radiative.
- L'énergie de la décroissance radioactive (sans l'énergie des neutrinos) pour les isotopes considérés comme "lumpés" dans les calculs, qui est une valeur moyenne représentative de l'énergie libérée par un groupe d'isotopes peu significatifs individuellement, mais qu'on modélise collectivement pour simplifier les calculs.

Le dépôt d'énergie est traditionnellement évalué à partir des valeurs Q , définies comme la différence entre la masse des isotopes avant et après la réaction nucléaire. Ce modèle a fonctionné de manière robuste pendant plusieurs décennies et a permis d'obtenir des résultats précis pour la plupart des configurations d'assemblages combustibles standards.

Cependant, des études menées il y a deux ans sur les réacteurs VVER ukrainiens ont mis en évidence des écarts significatifs dans les résultats. Dragon5 s'est avéré fiable pour les assemblages classiques constitués d'uranium enrichi (UOX), mais des incohérences ont été observées dans les assemblages contenant du gadolinium (Gd). Ce problème a mis en évidence une limitation du modèle existant lorsqu'il s'agit de réacteurs utilisant des absorbeurs de neutrons de masse élevée comme le gadolinium.

Pour remédier à cette limitation, des travaux ont été menés pour introduire les facteurs KERMA (Kinetic Energy Release in Materials) dans les fichiers Draglib utilisés par Dragon5. Ces facteurs permettent une évaluation plus précise du dépôt d'énergie en intégrant directement les contributions énergétiques spécifiques à chaque interaction nucléaire. Les développements en cours cherchent donc à adapter Dragon5 pour mieux intégrer ces nouveaux paramètres et corriger les écarts observés, tout en maintenant la compatibilité avec les anciens modèles de dépôt d'énergie.

1.3.2 Méthodologie dans Serpent

Serpent 2 implémente une approche modulaire du dépôt d'énergie, permettant de choisir entre différents niveaux de précision et de complexité via le paramètre `set edep`. Quatre modes principaux sont disponibles, chacun représentant un compromis entre exactitude physique et coût de calcul (Référence [10]) :

- **Mode 0 : Dépôt simplifié constant localisé.**

Toutes les contributions énergétiques sont déposées localement au site de fission. Ce mode repose sur une approximation empirique adaptée aux réacteurs à eau légère :

$$E_{\text{fiss},i} = \left(\frac{Q_i}{Q_{235}} \right) \times H_{235}, \quad \text{où } H_{235} = 202.27 \text{ MeV}$$

Ce mode, bien que rapide, est spatialement inexact et tend à surestimer l'énergie déposée, en particulier dans des environnements non standards (par exemple pour

les réacteurs refroidis au plomb).

— **Mode 1 : Dépôt local basé sur les données ENDF.**

Basé sur la section MT458 des bibliothèques ENDF, ce mode calcule l'énergie libérée par fission selon :

$$E_{\text{fiss},i} = E_{\text{FR}} + E_{\text{NP}} + E_{\text{ND}} + E_{\text{GP}} + \alpha E_{\text{GD}} + E_B + E_{\text{capt}}$$

où α permet d'inclure (ou non) les contributions retardées. L'énergie de capture E_{capt} est définie par l'utilisateur. Ce mode améliore la précision en magnitude, mais reste spatialement local.

— **Mode 2 : Dépôt neutronique via KERMA et gamma local.**

Le chauffage neutronique est estimé via les coefficients KERMA (Kinetic Energy Release in Materials) dans les fichiers ACE, et le dépôt d'énergie par fission suit :

$$E_{\text{fiss},i} = E_{\text{FR}} + E_{\text{GP}} + \alpha E_{\text{GD}} + E_B$$

Ce mode offre une meilleure précision spatiale tout en conservant un temps de calcul raisonnable. Les photons sont supposés se déposer localement à leur point d'émission.

— **Mode 3 : Transport couplé neutron-photon.**

Etant une extension du mode 2, il ajoute le transport explicite des photons issus des réactions (fission, capture, diffusion inélastique). Le dépôt d'énergie est alors modélisé selon :

$$E_{\text{fiss},i} = E_{\text{FR}} + \alpha E_B$$

Bien que plus coûteux en ressources, ce mode offre la meilleure précision spatiale, particulièrement pertinente dans les simulations thermiques couplées.

Remarque : Ce modèle n'est pas disponible dans Dragon.

Le choix du mode influe également sur la normalisation en puissance (commande `set powdens`) : un facteur de rééquilibrage énergétique est appliqué en modes 2 et 3 pour compenser l'approximation du régime critique et l'émission retardée des gammas.

Lexique des termes énergétiques :

E_{FR} : Énergie cinétique des fragments de fission

E_{NP} : Énergie des neutrons prompts

E_{ND} : Énergie des neutrons retardés

E_{GP} : Énergie des gammas prompts

E_{GD} : Énergie des gammas retardés

E_B : Énergie des électrons bêta retardés

E_{capt} : Énergie libérée par capture radiative

1.3.3 Méthodologie dans OpenMC

OpenMC utilise les coefficients KERMA (Kinetic Energy Release in Materials) dans les fichiers ACE pour estimer le dépôt d'énergie dans les matériaux. Ces coefficients, exprimés en eV-barn, sont générés à partir des fichiers de données nucléaires au format ENDF à l'aide du code NJOY, notamment via le module `heatr`. Le taux de chauffage local est obtenu par le produit de ces coefficients avec le flux neutronique incident, selon l'équation :

$$H(E) = \phi(E) \sum_i \rho_i \sum_r k_{i,r}(E)$$

où $k_{i,r}(E)$ est le coefficient KERMA pour la réaction r de l'isotope i , ρ_i la densité atomique, et $\phi(E)$ le flux neutronique à l'énergie E .

Dans le cas de la fission, l'énergie libérée est répartie entre différents produits secondaires : fragments de fission, neutrons (prompts et retardés), photons (prompts et retardés), électrons β et neutrinos. Les neutrinos étant non-interactifs, leur contribution est négligée dans les calculs de dépôt d'énergie.

Par défaut, NJOY n'intègre que certaines de ces contributions, notamment l'énergie des fragments de fission et des photons prompts, dans les coefficients KERMA. Pour fournir une estimation plus complète du chauffage, OpenMC reconstruit la réaction de chauffage totale (MT=301) en se basant sur les données de la section MF=1, MT=458 des fichiers ENDF. Ce traitement dépend du mode de transport sélectionné :

- **Transport neutronique seul** : l'énergie des photons (prompts et retardés) est supposée déposée localement. OpenMC utilise les coefficients générés par NJOY (MT=901), soustrait la composante de fission (MT=918), puis ajoute les contributions spécifiques de la fission : énergie des fragments (E_{fr}), photons ($E_{\gamma,p}$, $E_{\gamma,d}$) et électrons β .
- **Transport neutron-photon couplé** : les photons sont simulés explicitement dans le transport. OpenMC retire donc leur contribution locale à partir des données de NJOY (MT=301), puis reconstruit les coefficients en n'incluant que les contributions effectivement déposées localement (notamment E_{fr} et E_{β}).

Dans les deux cas, la contribution initiale de la fission (MT=318) est retirée et remplacée par une version ajustée, construite selon les composants énergétiques pertinents pour le type de simulation. Cette approche permet une modélisation plus précise du dépôt d'énergie, essentielle dans les configurations où les photons ou les électrons β jouent un rôle significatif.

1.4 L'élément Gadolinium dans un réacteur

Le gadolinium (Gd, numéro atomique 64) est un métal rare de la famille des lanthanides, reconnu pour ses propriétés importantes d'absorption des neutrons thermiques. Parmi ses isotopes naturels, le Gd_{155} et le Gd_{157} se distinguent par des sections efficaces d'absorption respectives de 254 000 barns et 60 900 barns, les plus élevées parmi tous les isotopes stables. Cette caractéristique en fait un matériau de choix pour le contrôle de la réactivité dans les réacteurs nucléaires à eau légère, tels que les réacteurs à eau pressurisée

(REP) et les réacteurs à eau bouillante (REB).

Dans les réacteurs nucléaires, le gadolinium est utilisé principalement sous forme d'alliages ou de composés intégrés dans les assemblages combustibles. Sa fonction principale est de moduler la réactivité du réacteur à différents moments de son cycle de fonctionnement. Voici les deux principaux rôles du gadolinium dans ce contexte :

Réduction de la réactivité après un rechargement : Lors d'un rechargement partiel ou total des assemblages combustibles, le gadolinium permet de diminuer la réactivité du réacteur. Sa capacité à absorber les neutrons contribue à maintenir un équilibre dynamique entre la production de neutrons et la consommation par les matériaux fissiles. Cela est particulièrement important après un rechargement, car il permet d'éviter un excès de réactivité qui pourrait provoquer une montée de puissance rapide et potentiellement dangereuse. La disparition progressive du gadolinium, au fur et à mesure de son épuisement dû à l'absorption de neutrons, sert à compenser l'épuisement naturel du combustible fissile.

Amélioration de la distribution radiale de la puissance : En intégrant le gadolinium de manière stratégique dans le cœur du réacteur, il est possible de favoriser une répartition radiale plus homogène de la puissance thermique générée. Cette gestion permet de maximiser l'efficacité du réacteur en minimisant les gradients de puissance qui peuvent entraîner une usure non uniforme du combustible. Le gadolinium joue ici un rôle dans l'optimisation du fonctionnement du réacteur tout au long d'un cycle de vie, avant le prochain rechargement.

1.5 L'erreur en évolution du Gadolinium

Le gadolinium, en raison de ses propriétés d'absorption des neutrons thermiques, est utilisé dans les réacteurs nucléaires à eau légère pour contrôler la réactivité. Les isotopes Gd_{155} et Gd_{157} , en particulier, présentent des sections efficaces d'absorption très élevées, ce qui les rend efficaces pour moduler la réactivité au début du cycle de vie du combustible.

Des études précédentes (Références [6] et [7]) ont révélé des écarts importants entre les résultats obtenus par différents codes de calcul, tels que Dragon5, Serpent2 et OpenMC, concernant la prédiction de la concentration en gadolinium au fil du temps.

Comparaison Dragon(ev3634)/Serpent - Cas edep 0, corr, extr, pcc1, endfb8r1 :

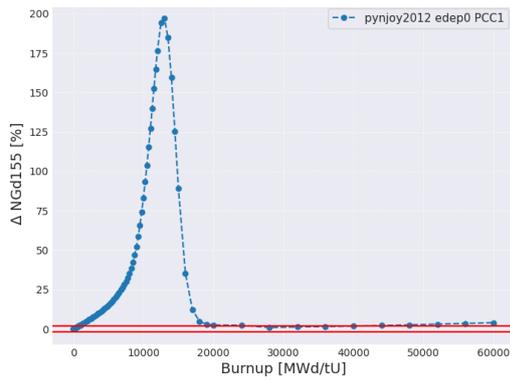


FIGURE 1 – Évolution de la concentration en Gadolinium ΔNGd_{155}

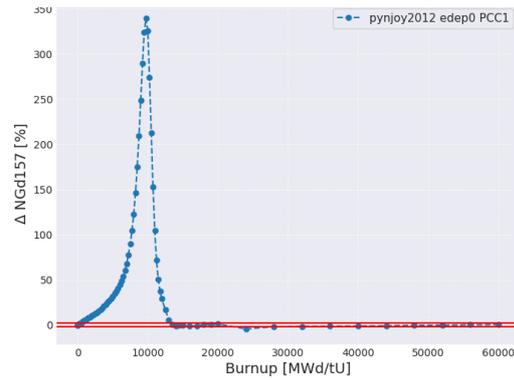


FIGURE 2 – Évolution de la concentration en Gadolinium ΔNGd_{157}

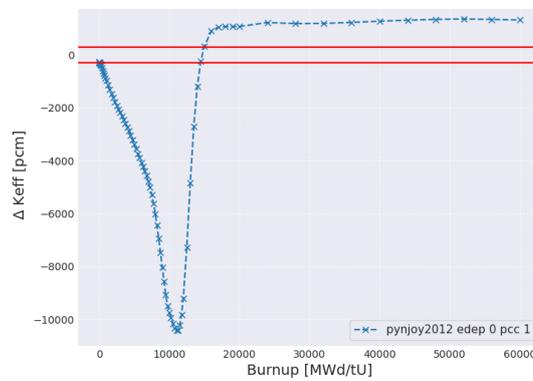


FIGURE 3 – Évolution du coefficient de criticité K_{eff} ΔK_{eff}

Comparaison Dragon(ev3634)/Serpent - *Cas edep 2, corr, extr, pcc1, endfb8r1* :

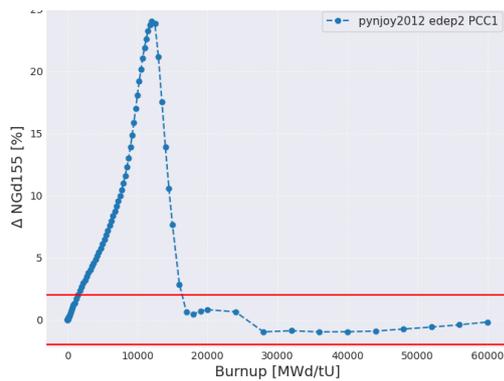


FIGURE 4 – Évolution de la concentration en Gadolinium ΔNGd_{155}

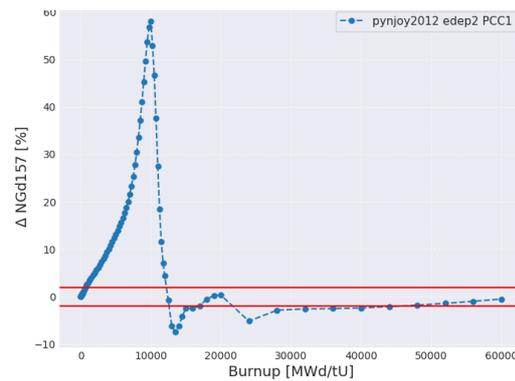


FIGURE 5 – Évolution de la concentration en Gadolinium ΔNGd_{157}

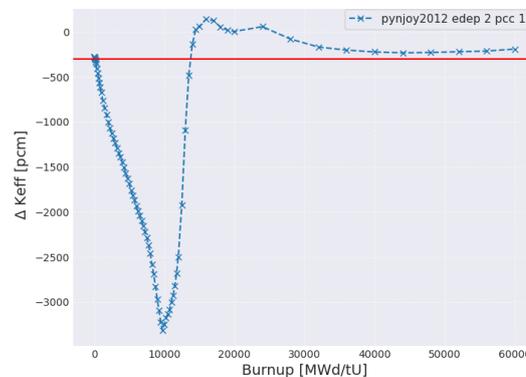


FIGURE 6 – Évolution du coefficient de criticité ΔK_{eff}

Les figures 1,2, 3, 4, 5 et 6 comparent les résultats obtenus avec Dragon5 et Serpent2 pour les modes **edep 0** et **edep 2**, en évaluant à la fois l'évolution de la concentration en Gd_{155} (ΔNGd_{155}), Gd_{157} (ΔNGd_{157}) et celle du coefficient de criticité (ΔK_{eff}). La zone délimitée par les lignes rouges représente le domaine d'acceptabilité pour la validation du modèle. Dans ces cas, l'ensemble des contributions énergétiques est pris en compte.

Pour les différents graphiques :

- Pour le mode **edep 0**, les écarts sur ΔNGd_{155} et ΔNGd_{157} atteignent plus de 200%, tandis que l'écart sur ΔK_{eff} dépasse les -10000 pcm, ce qui est significatif pour la sûreté du cœur.
- Pour le mode **edep 2**, les écarts sont encore moins marqués : ΔNGd_{155} et ΔNGd_{157} atteignent jusqu'à 60% et ΔK_{eff} dépasse -3000 pcm. Ces valeurs sont bien au-delà du domaine tolérable.

L'objectif principal de ce travail est d'identifier les sources spécifiques de ces écarts et d'évaluer les améliorations possibles des modèles de simulation en fonction des données et des outils utilisés. Cette démarche vise à améliorer la précision des prédictions relatives à l'évolution du gadolinium dans les réacteurs et à garantir une gestion plus fiable de la réactivité et de la distribution de la puissance tout au long du cycle de vie du réacteur.

1.6 Cadre de simulation

Le système étudié est une cellule (pincell) représentative d'un crayon combustible à base d' UO_2 dopé au Gd_2O_3 , entouré de zirconium et modéré à l'eau légère. Il s'agit d'un benchmark simplifié qui est utilisé pour nos différentes comparaisons code à code. Les caractéristiques géométriques et physiques sont les suivantes :

- Rayon du combustible : 0,41 cm
- Rayon externe de la gaine : 0,475 cm
- Pas de réseau : 1,26 cm (cellule carrée)
- Température uniforme : 294 K
- Puissance spécifique : 26,5 W/g

Remarque : L'évolution du système est simulée à puissance constante, ce qui correspond aux conditions opérationnelles réelles d'un réacteur nucléaire. Pour assurer cette constance de puissance tout au long de la simulation, il est nécessaire de normaliser les taux de réactions neutroniques calculés par les codes, afin de garantir que l'énergie libérée reste stable malgré les variations des compositions isotopiques et des conditions physiques. Cette normalisation est essentielle pour obtenir des résultats cohérents et comparables entre les différents outils de modélisation.

Le combustible contient initialement des isotopes d'uranium (U_{235} , U_{238}) et de gadolinium (Gd_{154} à Gd_{160}). L'analyse porte principalement sur l'évolution des isotopes Gd_{155} , Gd_{157} , U_{235} , U_{238} , Pu_{239} ainsi que des poisons neutroniques tels que Xe_{135} et Sm_{149} .

La pincell peut être représentée comme suit :

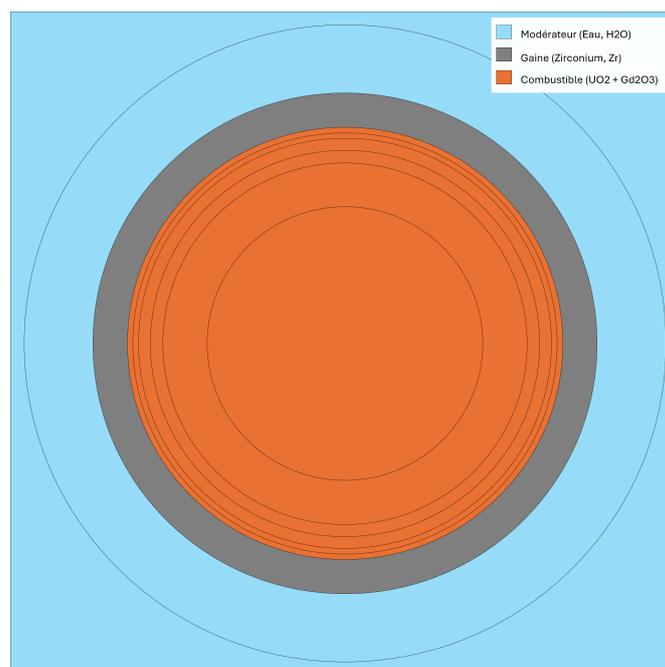


FIGURE 7 – Schéma de la cellule d'étude

Choix des pas de burnup

Dans le cadre de cette étude, une attention particulière a été portée à la définition des pas de burnup afin de garantir une bonne résolution temporelle dans les phases critiques de l'irradiation tout en optimisant les temps de calcul. Ces temps ont été définis lors des études précédentes et se structurent de la manière suivante :

- **ListeBU** : il s'agit de la liste principale contenant les pas de burnup utilisés pour la résolution de l'évolution isotopique. Elle comprend une densité élevée de points dans les faibles valeurs de burnup (de 0 à 15 MWd/tU, puis jusqu'à 1000 MWd/tU), où les phénomènes d'absorption par les isotopes comme le Gd sont prédominants et nécessitent une résolution fine. Cette densité diminue progressivement au fur et à mesure que le burnup augmente, avec des points plus espacés au-delà de 20000 MWd/tU. Cette approche permet de bien capturer les dynamiques initiales tout en réduisant la charge de calcul en phase de saturation ou de stabilisation des compositions.
- **ListeAUTOP** : cette liste contient des points de burnup spécifiques destinés à l'analyse du calcul de l'autoprotection du gadolinium. L'autoprotection neutronique désigne le phénomène de réduction du flux neutronique à l'intérieur de matériaux fortement absorbants, comme certains isotopes du gadolinium et de l'uranium, en raison de leur forte section efficace de capture dans les résonances. Ce phénomène a un impact non négligeable sur les taux de réaction et la répartition spatiale des flux, et nécessite un traitement particulier dans les codes de transport et d'évolution. Les valeurs sélectionnées (par exemple 1000, 10000, 20000 MWd/tU) sont issues d'études précédentes (Référence [6]) et permettent d'évaluer cette propriété à différentes étapes de l'irradiation, depuis la phase initiale fortement absorbante jusqu'aux étapes où la concentration de Gd diminue significativement.
- **ListeCOMPO** : cette liste est utilisée pour extraire les compositions isotopiques de manière systématique. Dans notre étude, elle est strictement identique à la **ListeBU**, ce qui permet de disposer des résultats de composition à chaque pas de burnup de calcul. Cela est particulièrement utile pour l'analyse de l'évolution de certains isotopes absorbants (tels que le Gd_{155} ou le Gd_{157}), et pour les comparaisons avec d'autres codes comme Serpent2 ou OpenMC.

La combinaison de ces trois listes permet d'assurer un compromis efficace entre précision, temps de calcul et exploitabilité des résultats. En particulier, le maillage fin en début d'irradiation est indispensable pour bien capturer l'absorption rapide du gadolinium, tandis que l'espacement progressif vers les pas de burnup élevés reflète le ralentissement des phénomènes évolutifs au sein du combustible.

2 Résultats et analyses

Cette section présente les résultats des simulations menées avec les codes Dragon5, Serpent2 et OpenMC, en mettant en évidence les écarts observés dans l'évolution des isotopes Gd_{155} et Gd_{157} ainsi que dans le facteur de multiplication effectif (K_{eff}). Ces résultats sont analysés selon trois axes : la méthode d'extrapolation utilisée pour la résolution des équations de combustion, le modèle de dépôt d'énergie considéré dans chaque code, et enfin les bibliothèques nucléaires employées.

2.1 Migration de la bibliothèque de JEFF-3.1.1 à ENDF/B-VIII.1

Afin d'améliorer les performances de simulation du code de transport neutronique Dragon5, une mise à jour des bibliothèques de données nucléaires a été effectuée. Ces bibliothèques jouent un rôle central dans les calculs neutroniques et thermohydrauliques, en fournissant des données essentielles telles que les sections efficaces, les spectres de fission, les constantes thermiques et les facteurs kerma pour une large gamme d'isotopes.

Les deux bibliothèques sont :

- **JEFF-3.1.1** : Publiée en 2009 par l'Agence pour l'Énergie Nucléaire (AEN), cette bibliothèque a longtemps constitué une référence en Europe. Ses évaluations reposent sur les données disponibles à l'époque, combinant mesures expérimentales et modélisations.
- **ENDF/B-VIII.1** : Mise à disposition en 2024 par le National Nuclear Data Center (NNDC), cette bibliothèque intègre des mises à jour significatives, tant en termes de données expérimentales récentes que de modèles théoriques affinés. Elle se distingue notamment par une réévaluation approfondie des isotopes du gadolinium, particulièrement sensibles dans les configurations contenant des poisons neutroniques.

Le graphique ci-dessous est extrait de la base de données nucléaire JANIS (cf Référence [11]) et représente les données de sections efficaces pour la réaction de capture neutronique (ou $MT=102$) du gadolinium 157, formant du gadolinium 158.

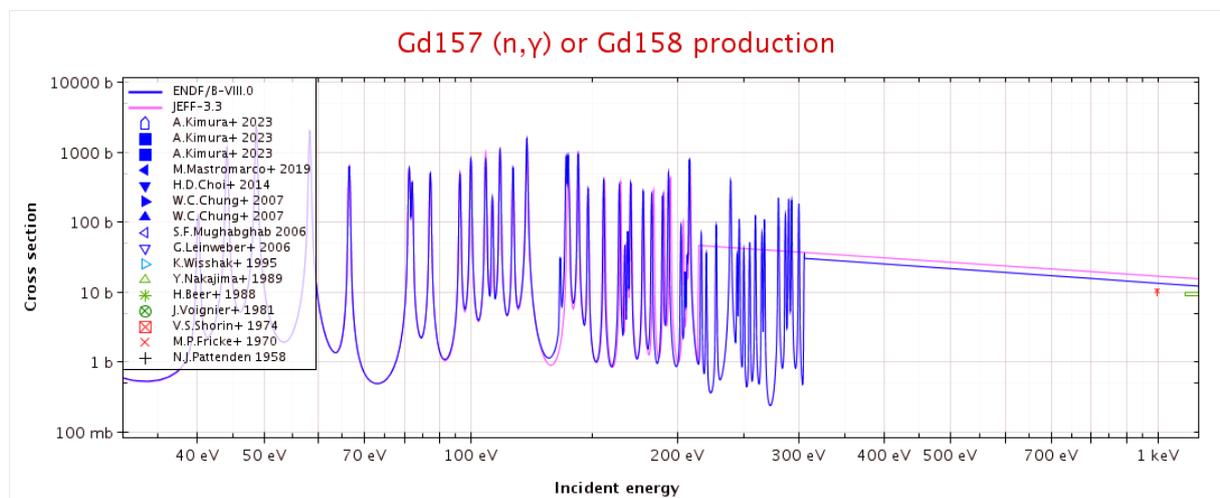


FIGURE 8 – Données de section efficace en fonction de l'énergie des neutrons

On remarque sur la figure 8 que les données issues de JEFF-3.3 (*en rose*) s'interrompent au-delà de 210 eV, alors que la bibliothèque ENDF/B-VIII.0 (*en bleu*) fournit une couverture continue jusqu'à 300 eV. Cette absence de données dans JEFF peut conduire à des sous-estimations dans les bilans de capture, en particulier dans les zones de résonance, ce qui justifie la migration vers une bibliothèque plus récente.

2.2 Méthode d'extrapolation

Le calcul de la combustion neutronique dans Dragon repose sur la résolution des équations de bilan des isotopes, qui nécessite une connaissance précise des taux de réactions microscopiques à chaque instant de la simulation. Ces taux varient dans le temps avec la composition du combustible et le spectre neutronique, une extrapolation est nécessaire pour estimer leur valeur au cours de chaque pas de temps.

2.2.1 Tests avec les mots-clés EXTR et NOEX

Dragon propose deux options principales pour le traitement temporel des taux de réaction microscopiques dans les calculs de combustion : les mots-clés EXTR et NOEX. Ces options contrôlent la manière dont les taux sont estimés au début de chaque intervalle temporel.

- **EXTR** : cette option active une extrapolation des taux de réactions à l'instant initial t_i de chaque pas de temps. L'extrapolation repose sur les valeurs calculées aux pas précédents t_{i-1} et t_{i-2} . Cela permet de capturer les variations temporelles de manière plus réaliste et d'améliorer la précision de l'intégration temporelle, notamment lorsque les taux évoluent rapidement.
- **NOEX** : en choisissant cette option, l'extrapolation est désactivée. Les taux sont alors supposés constants sur toute la durée de l'intervalle de temps. Il s'agit d'une approximation plus simple, correspondant à une méthode d'Euler explicite, qui peut introduire des erreurs importantes lorsque les taux de réaction varient fortement au cours du pas de temps.

L'option **EXTR** est activée par défaut dans Dragon, car elle offre un meilleur compromis entre précision et coût de calcul dans la majorité des cas.

Les résultats de la comparaison entre Serpent et Dragon, obtenus via l'utilisation ou non d'une méthode d'extrapolation, sont présentés ci-dessous.

Comparaison noex/extr Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 0, corr, pcc1, endfb8r1 :

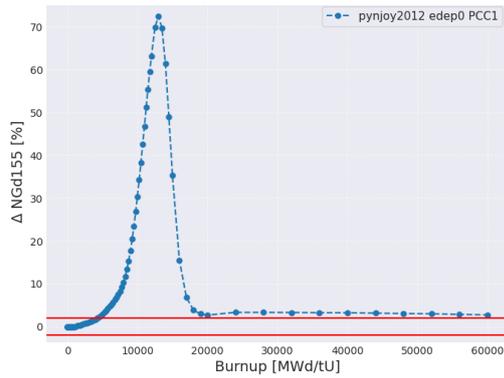


FIGURE 9 – ΔNGd_{155} - noex

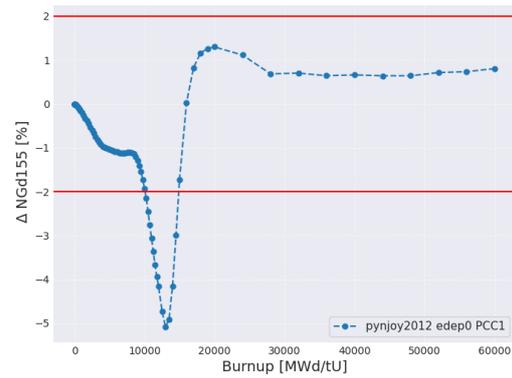


FIGURE 10 – ΔNGd_{155} - extr

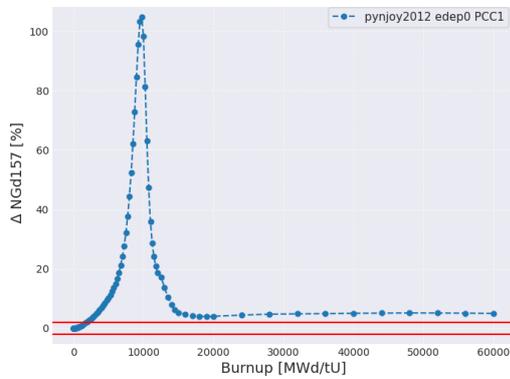


FIGURE 11 – ΔNGd_{157} - noex

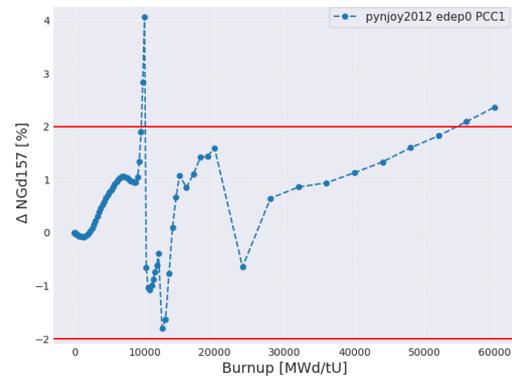


FIGURE 12 – ΔNGd_{157} - extr

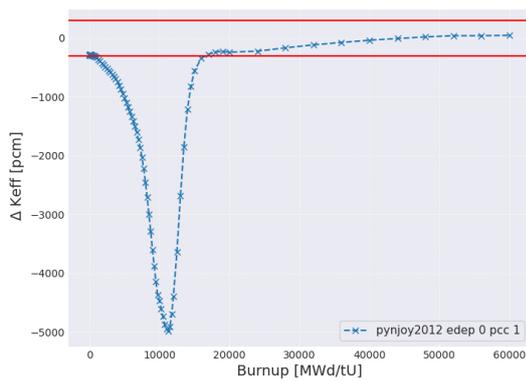


FIGURE 13 – ΔK_{eff} - noex

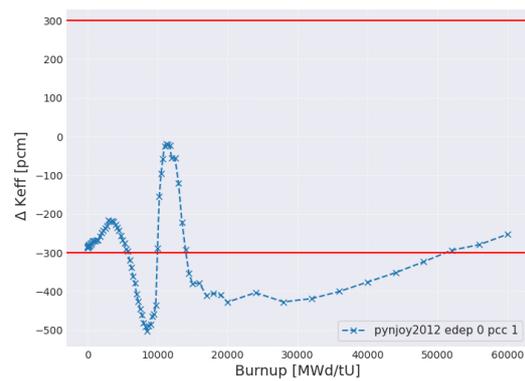


FIGURE 14 – ΔK_{eff} - extr

Les figures 9 à 14 permettent de comparer l'impact des mots-clés EXTR et NOEX dans Dragon sur l'évolution des concentrations isotopiques (ici le Gadolinium 155 et 157) et du coefficient de criticité effectif ΔK_{eff} , par rapport à la référence Serpent.

- Pour le ΔNGd_{155} et ΔNGd_{157} , en mode NOEX (Figures 9 et 11), on observe un comportement oscillatoire important dans les premiers pas de combustion. Ces oscillations s'amortissent au-delà de 10,000 MWd/t, suggérant un effet transitoire associé au début de la déplétion. En revanche, le mode EXTR (Figures 10 et 12)

montre une réduction significative de l'écart, qui reste globalement contenu dans une bande de 2% sur toute la durée de vie. L'extrapolation permet ici une meilleure cohérence avec le comportement attendu.

- Pour le ΔK_{eff} , le mode NOEX (Figure 13) présente un écart initial brutal dépassant les 5000 pcm. Avec l'option EXTR (Figure 14), les écarts sont bien mieux contenus dès les premiers pas de temps. L'amplitude maximale est réduite à environ 500 pcm, avec une convergence vers la fin. La comparaison devient plus stable et fidèle au modèle Serpent.

Une autre comparaison a été menée pour voir l'impact d'une extrapolation dans le cas edep 2 de Serpent qui est physiquement plus acceptable que le mode simplifié edep 0 pour le calcul du dépôt d'énergie (cf Partie 2.3.2).

Comparaison noex/extr Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 2, corr, pcc1, endfb8r1 :

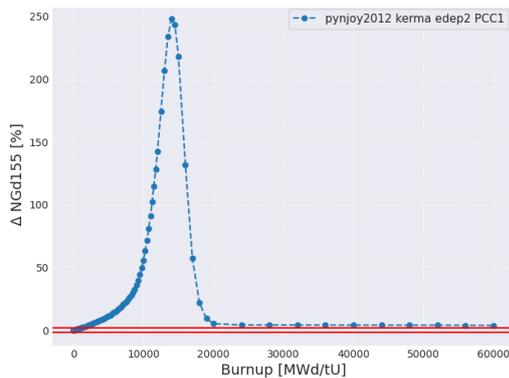


FIGURE 15 – ΔNGd_{155} - noex

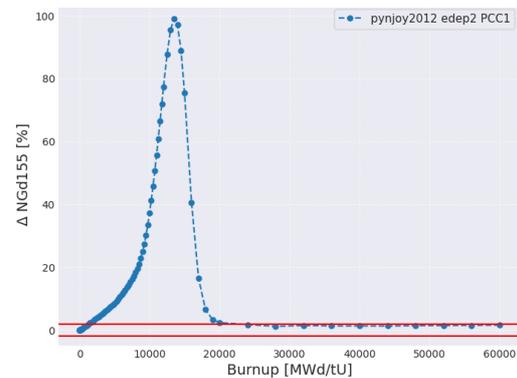


FIGURE 16 – ΔNGd_{155} - extr

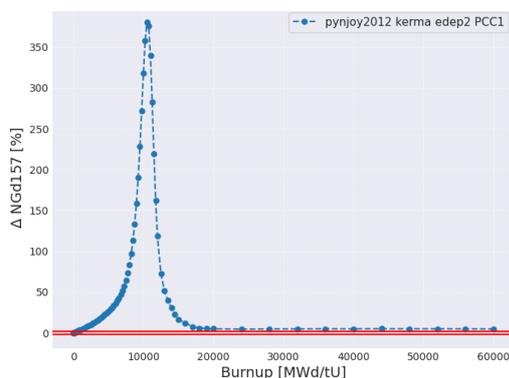


FIGURE 17 – ΔNGd_{157} - noex

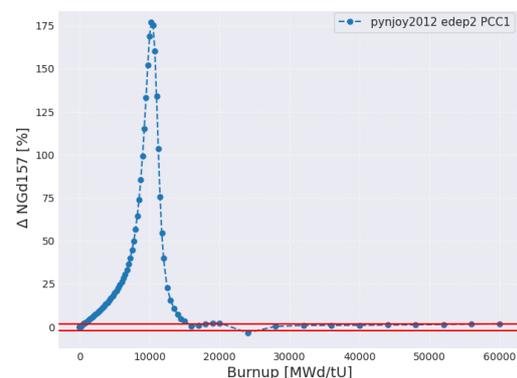


FIGURE 18 – ΔNGd_{157} - extr

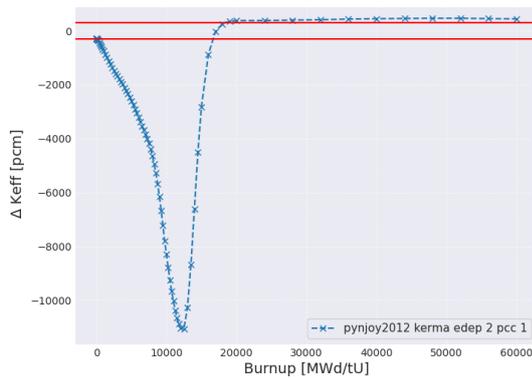


FIGURE 19 – ΔK_{eff} - noex

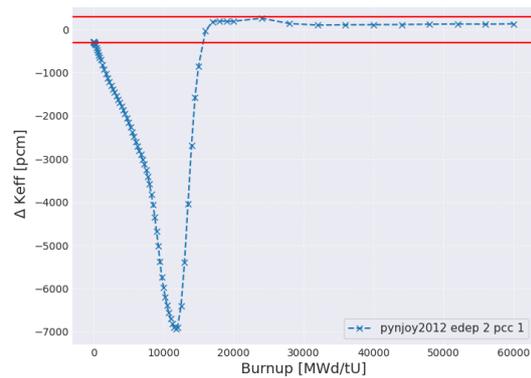


FIGURE 20 – ΔK_{eff} - extr

Les figures comparant les modes EXTR et NOEX dans le cas edep2 (cf Figures 15 à 20) montrent des évolutions qualitativement similaires, avec toutefois une amélioration notable en termes de précision pour le cas EXTR. En effet, les écarts relatifs sur les concentrations des isotopes Gd155 et Gd157 ainsi que sur le coefficient de criticité ΔK_{eff} restent globalement plus proches de la zone de tolérance.

Ces résultats confirment que l'option EXTR, en tenant compte de la dynamique temporelle des taux de réaction, améliore nettement la précision des simulations de déplétion, tant sur les isotopes critiques comme le Gd155 et le Gd157 que sur les paramètres globaux comme K_{eff} . À l'inverse, l'option NOEX tend à introduire des artefacts numériques en début de vie, dus à sa nature d'intégration plus simpliste. Son utilisation peut donc induire des biais importants dans les phases transitoires du calcul, notamment pour des combustibles enrichis en poisons forts ou pour des cas simplifiés comme edep0.

Remarque : L'option EXTR, bien qu'en général plus précise dans les cas standards, peut introduire des erreurs significatives si elle est utilisée dans un cadre non adapté comme pcc0 (où le prédicteur est constant et aucune correction n'est appliquée pour compenser l'extrapolation initiale, cf Partie 2.2.4), comme le montrent les comparaisons suivantes.

Comparaison extr/noex Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 0, corr, pcc0, endfb8r1 :

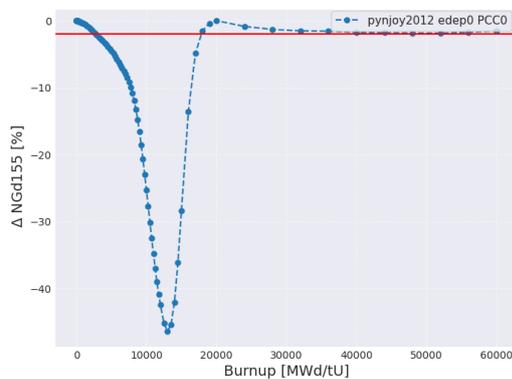


FIGURE 21 – ΔNGd_{155} - extr

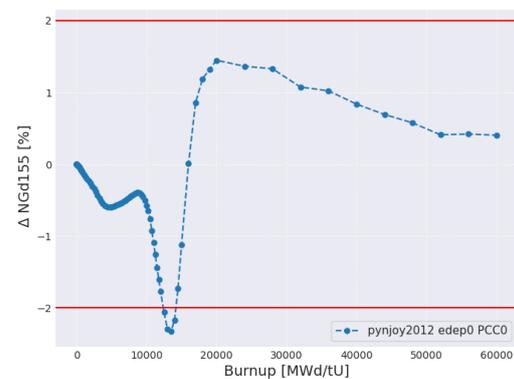


FIGURE 22 – ΔNGd_{155} - noex

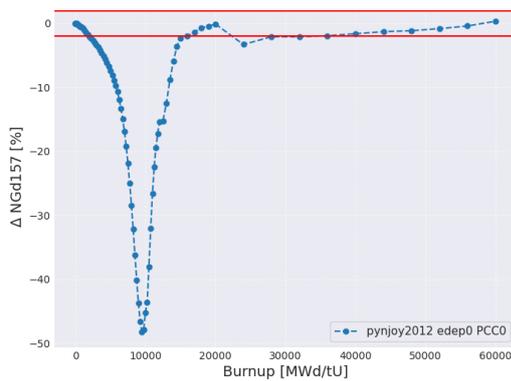


FIGURE 23 – ΔNGd_{157} - extr

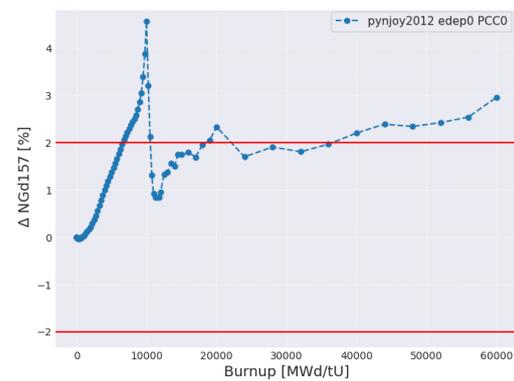


FIGURE 24 – ΔNGd_{157} - noex

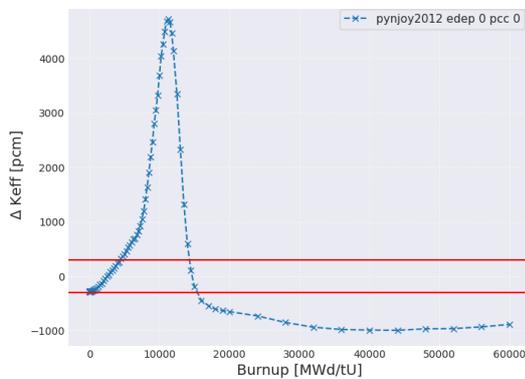


FIGURE 25 – ΔK_{eff} - extr

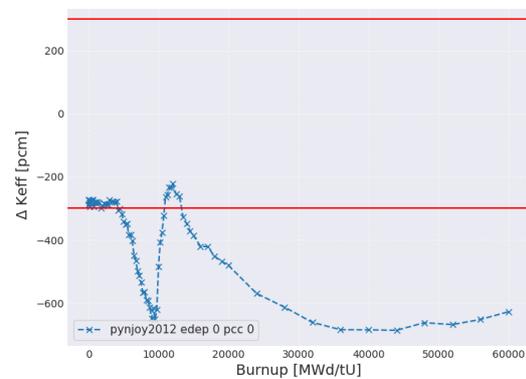


FIGURE 26 – ΔK_{eff} - noex

- Dans le cas EXTR (Figures 21, 23 et 25), l'erreur sur la concentration en Gd155 et Gd157 atteint jusqu'à -50% , et le ΔK_{eff} dépasse ± 4500 pcm, largement hors des bornes d'acceptabilité. Cela montre une forte surestimation induite par une extrapolation inadaptée dans un schéma sans correcteur.
- En revanche, dans le cas NOEX (Figures 22, 24 et 26), les écarts sont bien contenus : ΔNGd_{155} et ΔNGd_{157} restent dans une bande de $\pm 2\%$ et 4% , et ΔK_{eff} se stabilise autour de -400 pcm, dans la zone tolérée.

Cela démontre que, pour des intégrations à prédicteur constant comme le mode pcc0, il est préférable de désactiver l'extrapolation. En effet pcc0 et NOEX sont "mathématiquement" équivalents. Ainsi il vaut mieux privilégier les comparaisons à méthodes comparables : NOEX avec pcc0 et EXTR avec pcc1 ou pcc2.

2.2.2 Extrapolation linéaire

Jusqu'à présent, l'approche standard dans Dragon était une extrapolation linéaire de Lagrange, fondée sur l'hypothèse que les taux de réaction microscopiques évoluent de manière linéaire entre deux étapes temporelles. Cette extrapolation de premier ordre permet d'estimer la valeur du taux au temps initial t_i , à partir des valeurs connues aux temps précédents t_{i-1} et t_{i-2} , avant d'utiliser ces taux dans une intégration de type Runge-Kutta.

Cependant, des analyses ont révélé que le facteur appliqué à cette extrapolation linéaire était surestimé (environ deux fois trop élevé dans les anciennes versions de Dragon, comme dans la version *ev3634*), ce qui engendrait des erreurs systématiques dans les résultats. Ces erreurs étaient notables dans les calculs à pas de temps long ou pour les isotopes sensibles aux variations rapides de flux. Il y a eu une correction du facteur d'extrapolation dans la dernière version de Dragon (*ev3785*), comme le montrent les graphiques ci-dessous. Dans le cas étudié, seules les réactions induites par les neutrons sont prises en compte pour les dépôts d'énergie, en suivant le modèle *NGO* (cf. partie 2.3.1) qui exclut la contribution des captures radiatives. Ainsi, seule l'énergie déposée par la fission est considérée pour la normalisation des taux de réactions, ce qui rapproche ce cas du mode *edep 0* de Serpent.

Comparaison Dragon(*ev3634*)/Serpent et Dragon(*ev3785*)/Serpent - Cas *edep 0, corr, extr, pcc1, endfb8r1* :

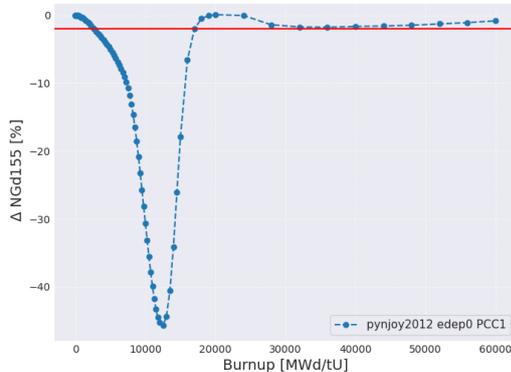


FIGURE 27 – ΔNGd_{155} - *ev3634*

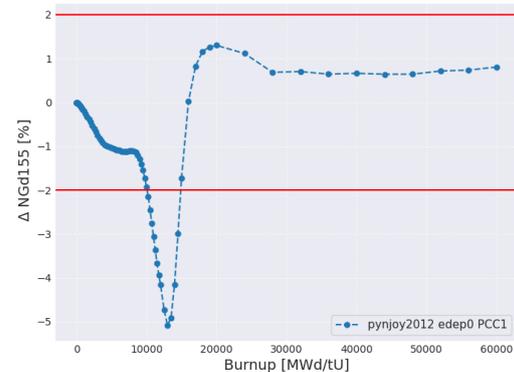


FIGURE 28 – ΔNGd_{155} - *ev3785*

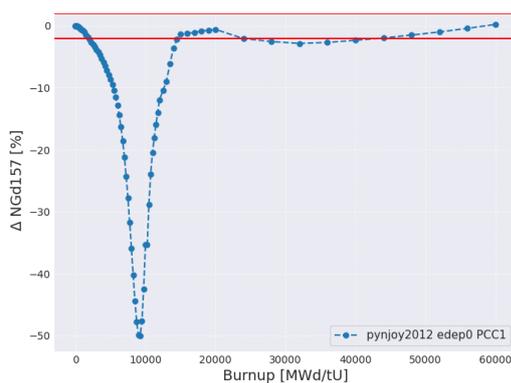


FIGURE 29 – ΔNGd_{157} - *ev3634*

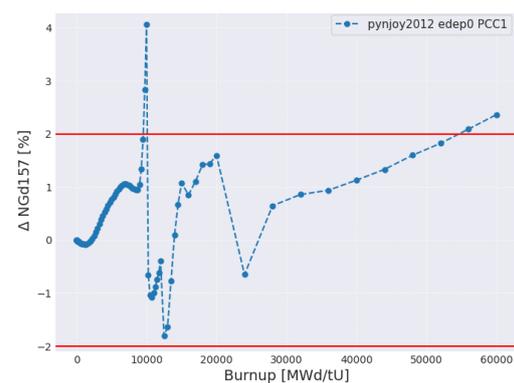


FIGURE 30 – ΔNGd_{157} - *ev3785*

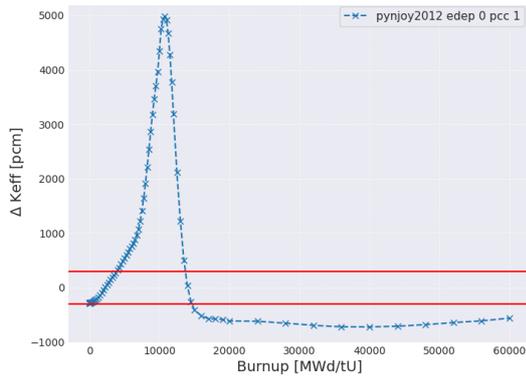


FIGURE 31 – ΔK_{eff} - ev3634

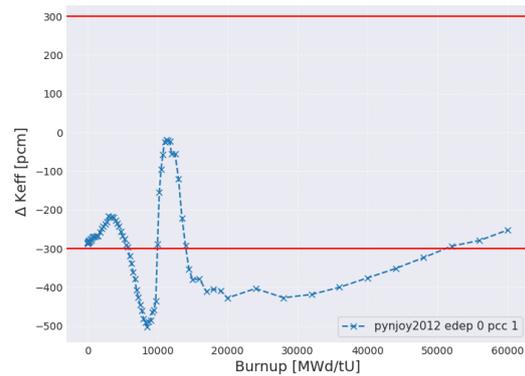


FIGURE 32 – ΔK_{eff} - ev3785

- **Concentration en Gd_{155} et en Gd_{157}** : Les Figures 27 et 29 montrent initialement une surestimation de la consommation du Gadolinium, avec un écart allant jusqu'à -50% . Cela résulte directement d'une surestimation des taux de capture neutronique à cause du facteur d'extrapolation appliquée dans ev3634. En revanche, les Figures 28 et 30 (version ev3785) montrent une évolution avec un pic d'erreur de près de $\pm 5\%$ et le reste compris dans la borne de tolérance, ce qui représente une amélioration nette de la précision.
- **Coefficient de criticité K_{eff}** : La Figure 31 montre un écart maximal de plus de 5000 pcm dans les premières étapes de burnup. Cette surestimation de la réactivité traduit une mauvaise prédiction de la densité isotopique, notamment pour les poisons comme le Gd_{157} . Dans la version corrigée (Figure 32), l'écart reste compris entre -300 pcm et 100 pcm, ce qui est plus compatible avec les critères de validation.

Comparaison Dragon(ev3634)/Serpent et Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 2, corr, extr, pcc1, endfb8r1 :

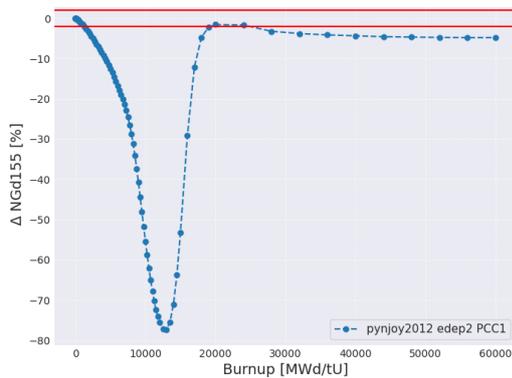


FIGURE 33 – ΔNGd_{155} - ev3634

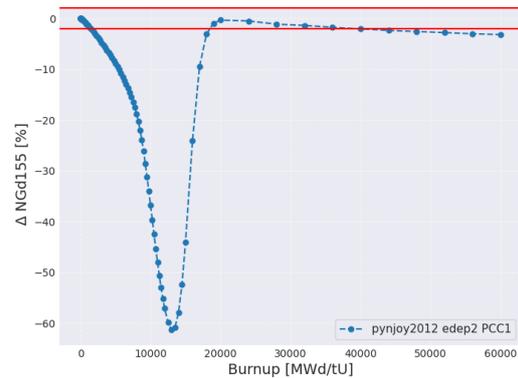


FIGURE 34 – ΔNGd_{155} - ev3785

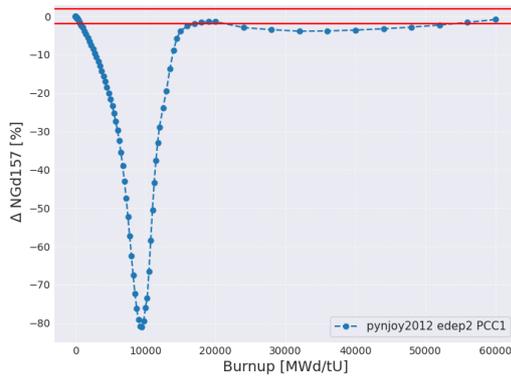


FIGURE 35 – ΔNGd_{157} - ev3634

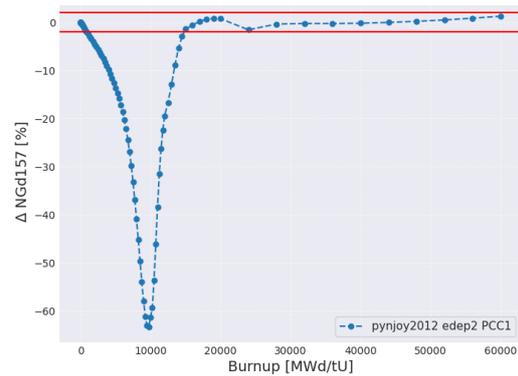


FIGURE 36 – ΔNGd_{157} - ev3785

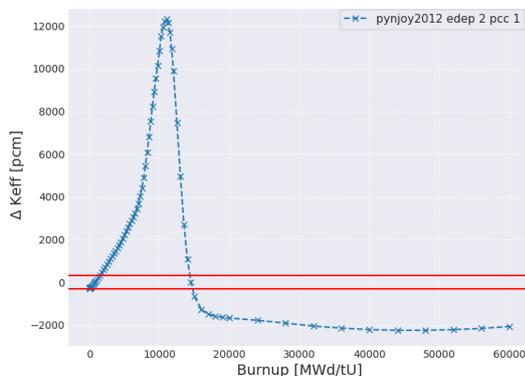


FIGURE 37 – ΔK_{eff} - ev3634

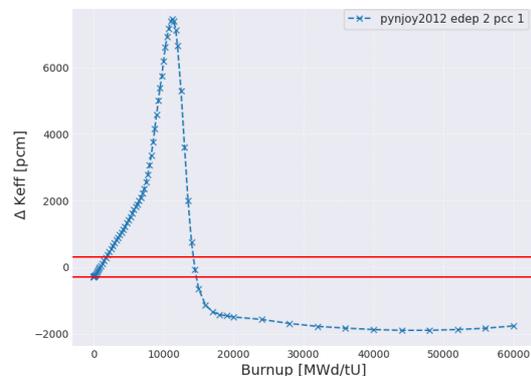


FIGURE 38 – ΔK_{eff} - ev3785

Les figures comparant les versions ev3634 et ev3785 dans le cas edep2 (cf Figures 33 à 38) montrent des évolutions qualitativement similaires, avec toutefois une amélioration notable en termes de précision pour le cas ev3785. En effet, les écarts relatifs sur les concentrations des isotopes Gd155 et Gd157 ainsi que sur le coefficient de criticité ΔK_{eff} restent globalement plus proches de la zone de tolérance.

L'erreur introduite par le facteur d'extrapolation mal calibré dans la version ev3634 entraînait une surestimation des taux de capture neutronique, ce qui affectait fortement la modélisation de l'évolution du gadolinium en surestimant sa consommation, ainsi que la prédiction de la réactivité. La version ev3785, en corrigeant ce facteur d'extrapolation, c'est-à-dire en réduisant la surestimation systématique des taux de réaction entre pas de temp, améliore la précision des calculs, conduisant à des résultats de modélisation mieux alignés avec ceux de Serpent et permettant ainsi une validation plus fiable.

2.2.3 Extrapolation parabolique

En parallèle, une option d'extrapolation parabolique a été introduite, correspondant à une extrapolation de second ordre. Cette méthode ajuste une parabole sur les trois derniers points temporels disponibles, offrant ainsi une meilleure précision lorsque les variations des taux microscopiques ne suivent pas une tendance strictement linéaire. L'activation de cette méthode d'extrapolation parabolique se fait via le paramètre EXTR_2 dans le fichier

d'entrée.

La comparaison entre Serpent et Dragon selon les différentes méthodes d'extrapolation donne les figures suivantes :

Comparaison extr/extr2 dans Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 0, corr, pcc1, endfb8r1 :

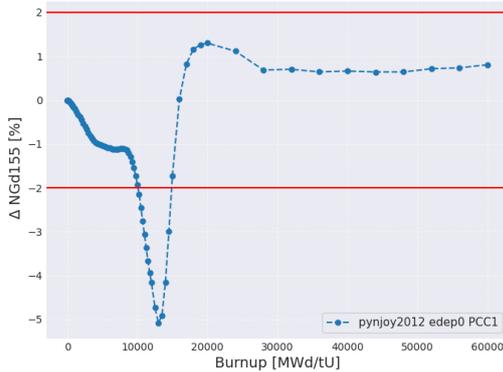


FIGURE 39 – ΔNGd_{155} - extrapolation linéaire

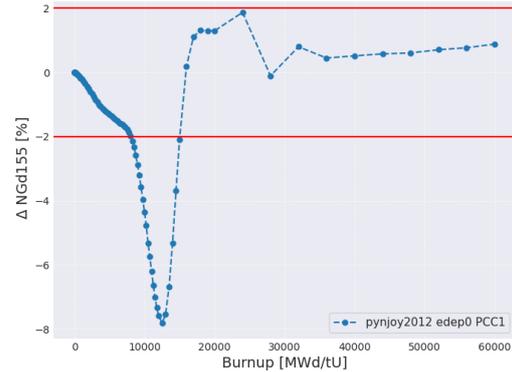


FIGURE 40 – ΔNGd_{155} - extrapolation parabolique

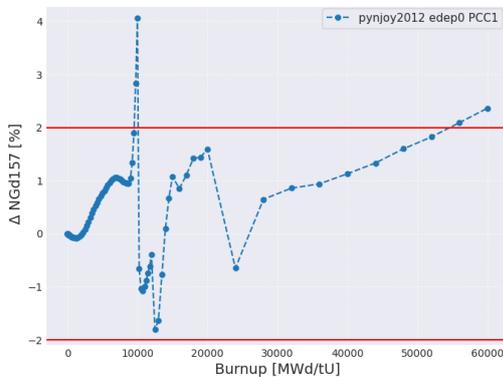


FIGURE 41 – ΔNGd_{157} - extrapolation linéaire

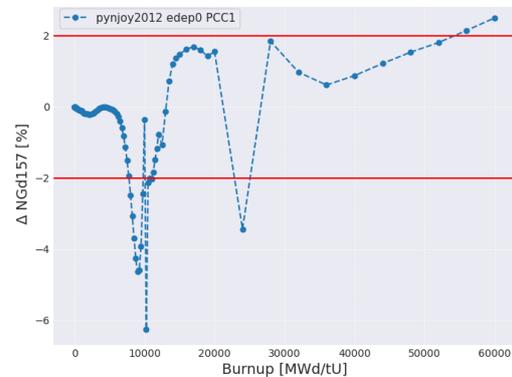


FIGURE 42 – ΔNGd_{157} - extrapolation parabolique

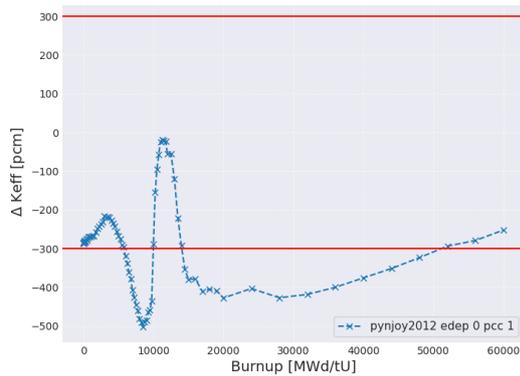


FIGURE 43 – ΔK_{eff} - extrapolation linéaire

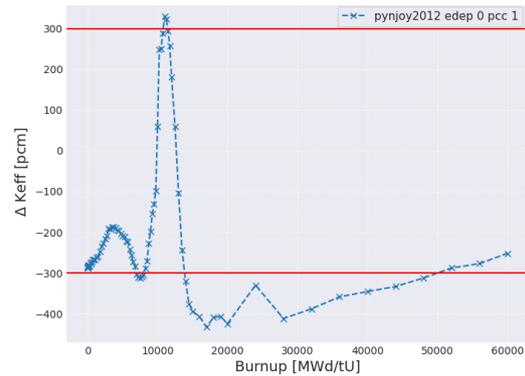


FIGURE 44 – ΔK_{eff} - extrapolation parabolique

En termes de résultats :

- Les figures 39 et 40 montrent l'évolution de la concentration en Gadolinium ΔNGd_{155} avec une extrapolation linéaire et parabolique respectivement. On observe que l'extrapolation parabolique ne semble pas corriger l'écart présent dans la méthode linéaire.
- De manière similaire, les figures 41 et 42 illustrent l'évolution de la concentration en ΔNGd_{157} . Ici aussi, l'extrapolation parabolique ne semble pas mieux suivre les variations complexes des données.
- Enfin, l'évolution du coefficient de criticité ΔK_{eff} est représentée dans les figures 43 (extrapolation linéaire) et 56 (extrapolation parabolique). On remarque que l'extrapolation parabolique apporte une meilleure stabilisation du signal, en permettant une variation du ΔK_{eff} dans la zone de tolérance.

En résumé, bien que l'extrapolation parabolique ne corrige pas significativement les écarts observés dans les concentrations en Gadolinium (ΔNGd_{155} et ΔNGd_{157}) par rapport à la méthode linéaire, elle semble néanmoins améliorer l'évolution du coefficient de criticité ΔK_{eff} . Cette dernière semble mieux capter les variations critiques et maintenir le signal dans une plage acceptable, ce qui pourrait s'avérer important pour les analyses de sécurité et de performance.

Nous avons réalisé la même comparaison entre les extrapolations linéaire et parabolique pour le cas *edep2*. Les résultats sont affichés dans les graphiques ci-dessous.

Comparaison extr/extr2 dans Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 2, corr, pcc1, endfb8r1 :

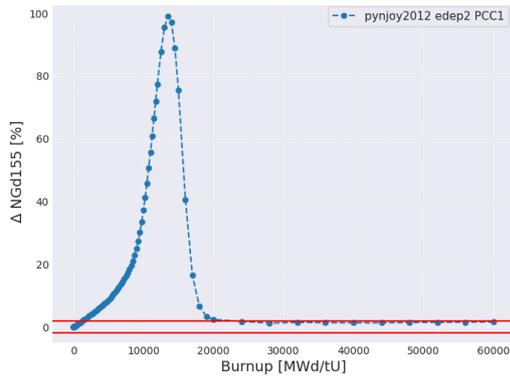


FIGURE 45 – ΔNGd_{155} - extrapolation linéaire

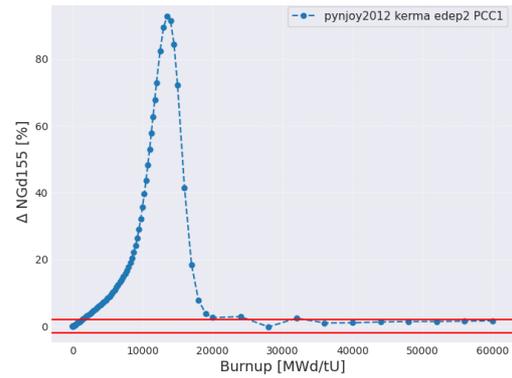


FIGURE 46 – ΔNGd_{155} - extrapolation parabolique

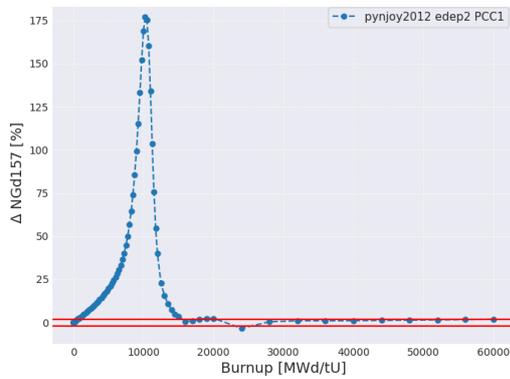


FIGURE 47 – ΔNGd_{157} - extrapolation linéaire

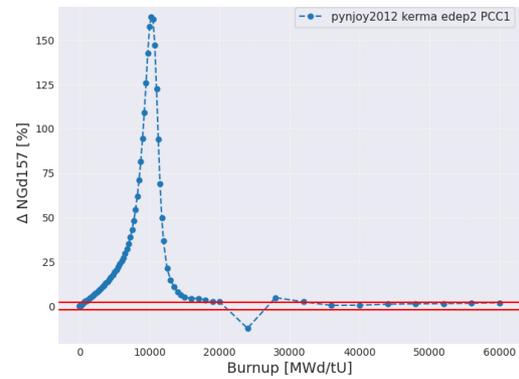


FIGURE 48 – ΔNGd_{157} - extrapolation parabolique

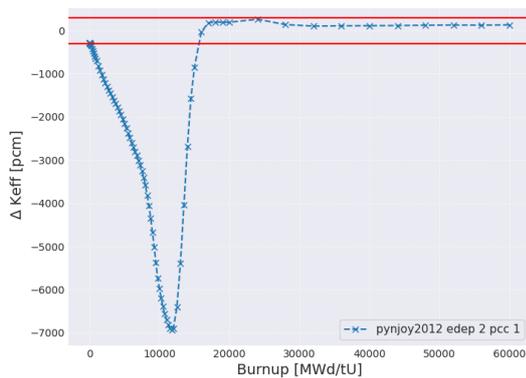


FIGURE 49 – ΔK_{eff} - extrapolation linéaire

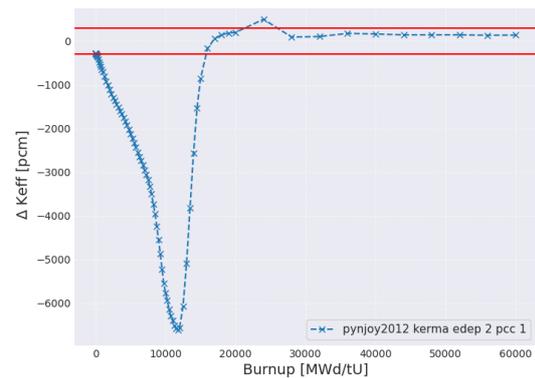


FIGURE 50 – ΔK_{eff} - extrapolation parabolique

Les figures comparant les extrapolations linéaires et paraboliques dans le cas *edep2* (cf Figures 45 à 50) montrent des évolutions qualitativement similaires, avec toutefois une amélioration des valeurs par rapport à la zone de tolérance pour l'extrapolation parabolique.

Remarque : Il est possible que l'extrapolation parabolique ne modifie pas fondamentalement l'évolution des grandeurs étudiées, mais permette simplement de lisser ou d'approximer la tendance générale tout en réduisant le nombre de pas de burnup nécessaires pour obtenir une courbe stable. Ainsi, plutôt que de corriger les écarts présents dans l'extrapolation linéaire, elle offrirait un compromis en simplifiant la modélisation et en limitant la charge de calcul, sans pour autant altérer significativement la dynamique des paramètres.

Afin de vérifier cette hypothèse, nous avons réduit le nombre de pas de burnup utilisés dans les calculs, en passant de 80 à 48 valeurs. Cette réduction a été effectuée de manière à supprimer environ un pas sur deux, à l'exception de la fin du cycle, où les valeurs étaient déjà suffisamment espacées. Les graphiques ci-dessous montrent les résultats avec la nouvelle liste de pas de Burnup.

**Comparaison extr/extr 2 avec réduction du nombre de points de Burnup
Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 0, corr, pcc1, endfb8r1 :**

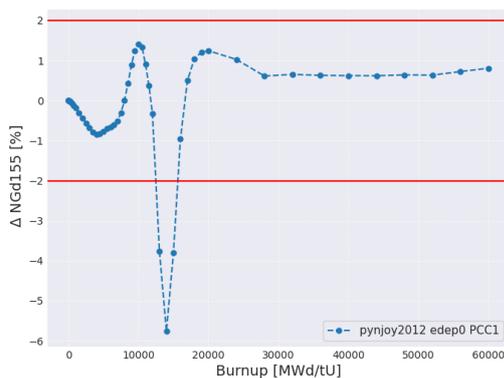


FIGURE 51 – ΔNGd_{155} - extrapolation linéaire avec 48 points de Burnup

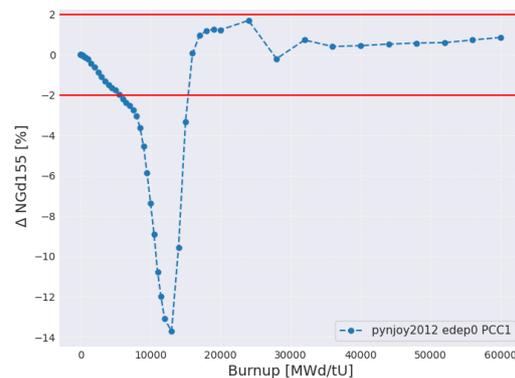


FIGURE 52 – ΔNGd_{155} - extrapolation parabolique avec 48 points de Burnup

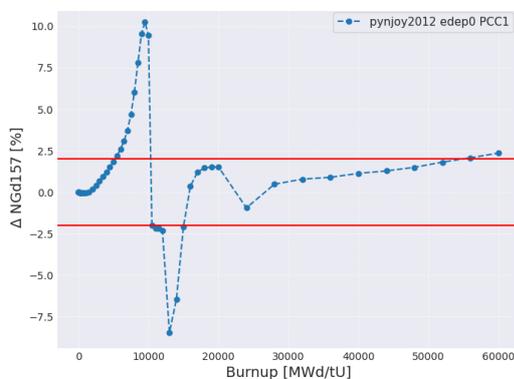


FIGURE 53 – ΔNGd_{157} - extrapolation linéaire avec 48 points de Burnup

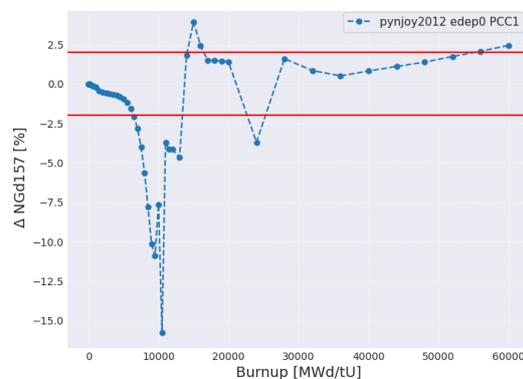


FIGURE 54 – ΔNGd_{157} - extrapolation parabolique avec 48 points de Burnup

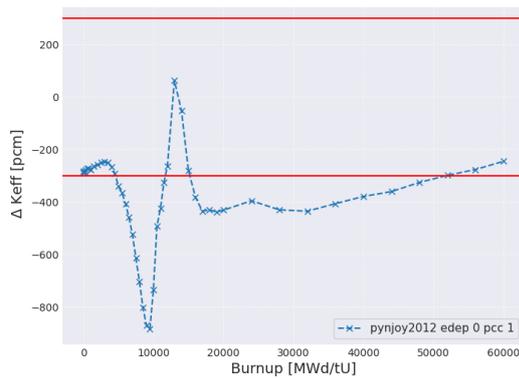


FIGURE 55 – ΔK_{eff} - extrapolation linéaire

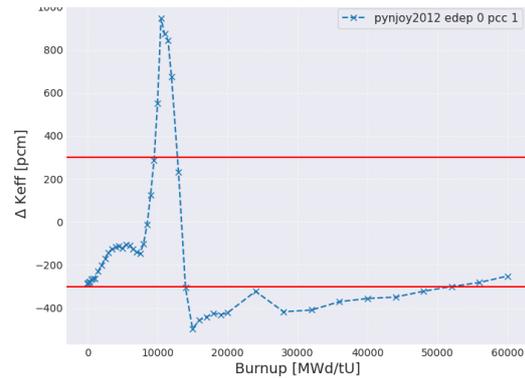


FIGURE 56 – ΔK_{eff} - extrapolation parabolique

Les résultats obtenus avec 48 pas de burnup montrent que l'extrapolation parabolique conserve une évolution similaire à celle observée avec 80 pas. Cependant, les écarts de valeurs sont plus importants avec un nombre réduit de pas de Burnup, notamment pour les concentrations en Gadolinium (ΔNGd_{155} et ΔNGd_{157}).

De même, l'extrapolation linéaire souffre d'une dégradation des résultats lorsqu'on réduit le nombre de points de burnup, avec une perte de précision notable sur l'ensemble des grandeurs étudiées.

Ainsi, bien que la tendance générale soit mieux reproduite avec l'extrapolation parabolique, la précision des résultats se dégrade, ce qui ne permet pas de conclure à un réel avantage de cette extrapolation pour un maillage temporel réduit.

2.2.4 Schéma Prédicteur-Correcteur Couplé (PCC)

Au-delà des méthodes d'extrapolation explicite, un autre élément de l'étude concerne l'intégration d'un schéma de type Predictor-Corrector Couplé (PCC) pour la résolution des équations de combustion. Contrairement à l'approche classique, fondée sur une extrapolation suivie d'une résolution directe des équations, le schéma PCC introduit une itération entre une prédiction initiale et une correction progressive, afin de mieux tenir compte de l'évolution réelle des taux au sein même du pas de temps.

Le principe repose sur deux étapes :

- Étape de prédiction (Predictor) : une première estimation des concentrations isotopiques à t_{i+1} est obtenue à l'aide des taux extrapolés à partir de t_i et des valeurs passées. Cette prédiction utilise généralement une méthode explicite rapide mais approximative.
- Étape de correction (Corrector) : les taux de réaction sont recalculés à partir de la composition prédite, ce qui permet une estimation plus précise des taux au cours du pas de temps. Ces taux corrigés permettent alors de recalculer les concentrations isotopiques avec une meilleure précision, généralement à l'aide d'un schéma d'intégration implicite ou semi-implicite.

Ce schéma itératif améliore la précision globale sans nécessiter un pas de temps excessivement petit, tout en maintenant la stabilité numérique, en particulier dans les régimes transitoires. Le couplage entre les taux et la composition est ainsi traité de manière plus cohérente.

Schéma PCC dans Serpent : commande `set pcc`

Le code Serpent propose une implémentation du schéma de type Predictor-Corrector Couplé (PCC) via la commande `set pcc`, utilisée pour spécifier la méthode d'intégration temporelle dans le calcul de combustion. Cette commande permet de définir à la fois le type d'extrapolation utilisé pour le prédicteur, le type d'interpolation pour le correcteur, ainsi que le nombre de sous-pas appliqués à chaque étape.

Voici un résumé des modes disponibles :

MODE	Prédicteur	Correcteur	Remarques
0 (CE)	Constante	-	Méthode d'Euler sans sous-pas
1 (CELI)	Constante	Linéaire	Ancien schéma PCC (Serpent 1)
2 (LE)	Linéaire	-	Pas de correcteur
3 (LELI)	Linéaire	Linéaire	Variante simple du schéma PCC
4 (LEQI)	Linéaire	Quadratique	Amélioration de la précision
5	Constante ou linéaire	Linéaire ou quadratique	Mode entièrement personnalisable
6 (CECE)	Constante	Constante arrière	Pour études spécifiques, peu utilisé

TABLE 1 – Modes disponibles pour la commande `set pcc` dans Serpent

En comparaison des différents schémas de type PCC, on obtient les figures suivantes :

Comparaison `pcc0/pcc1/pcc2` Dragon(ev3785)/Serpent - Cas `edep 0, corr, endfb8r1` :

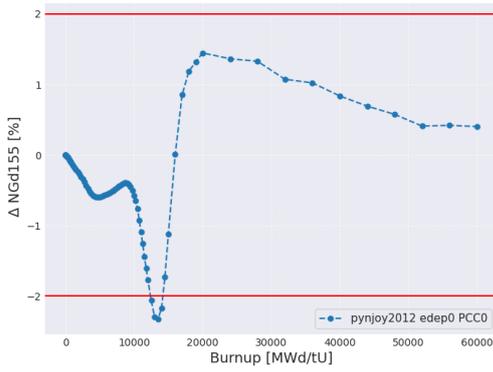


FIGURE 57 – ΔNGd_{155} - pcc0

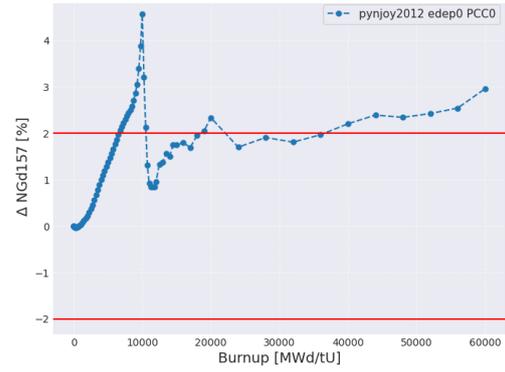


FIGURE 58 – ΔNGd_{157} - pcc0

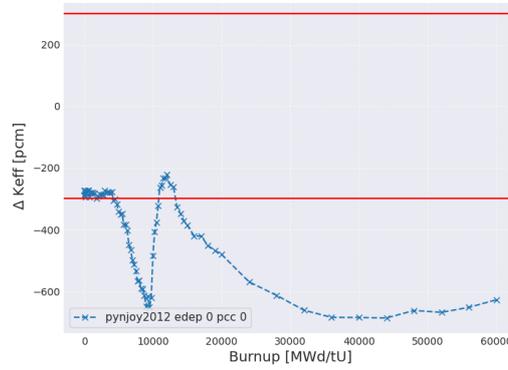


FIGURE 59 – ΔK_{eff} - pcc0

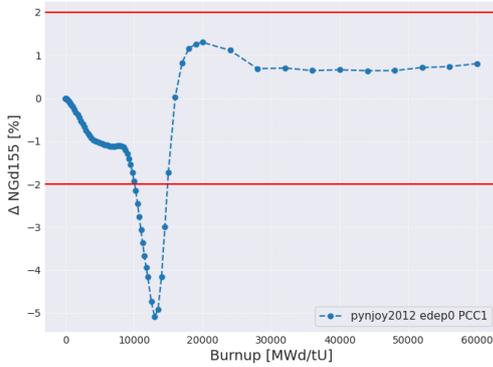


FIGURE 60 – ΔNGd_{155} - pcc1

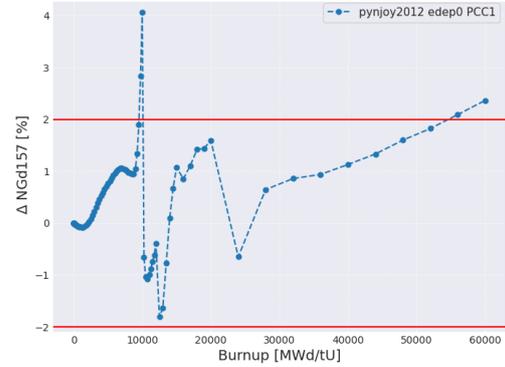


FIGURE 61 – ΔNGd_{157} - pcc1

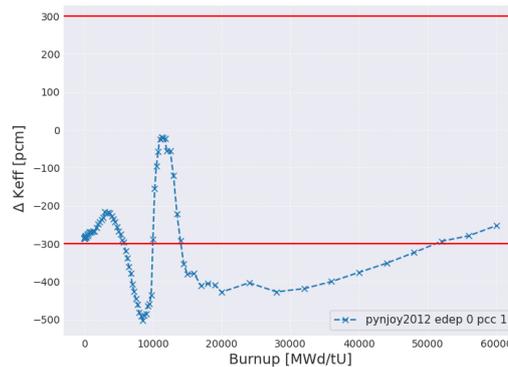


FIGURE 62 – ΔK_{eff} - pcc1

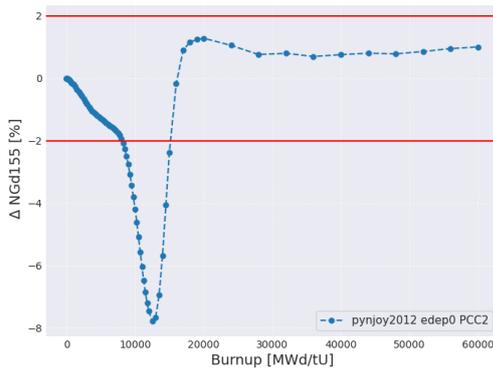


FIGURE 63 – ΔNGd_{155} - pcc2

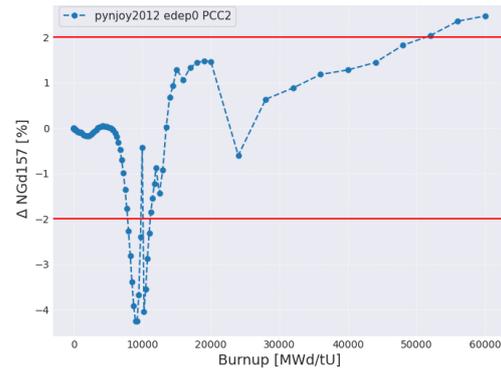


FIGURE 64 – ΔNGd_{157} - pcc2

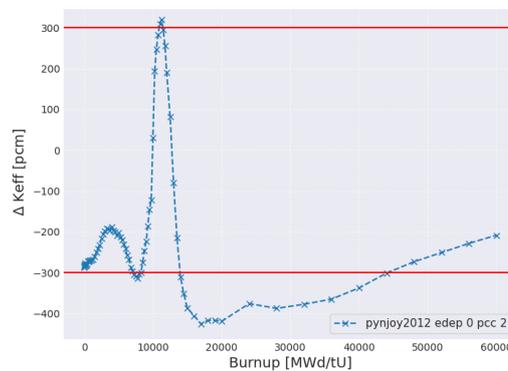


FIGURE 65 – ΔK_{eff} - pcc2

L'impact de l'activation du schéma PCC dans Serpent est clairement visible à travers la comparaison avec Dragon, en particulier parce que Serpent sert ici de référence de calcul. Les trois modes principaux de Serpent étudiés ici, pcc0 (sans correcteur, comparable à NOEX dans Dragon), pcc1 (avec correcteur linéaire, comparable à EXTR dans Dragon) et pcc2 (avec correcteur quadratique, également comparable à EXTR), illustrent l'influence des différentes méthodes d'intégration des taux de réaction sur la précision des résultats. Le choix des paramètres dans Serpent est crucial, car il conditionne la qualité de la référence à laquelle les résultats de Dragon sont comparés, permettant ainsi d'évaluer plus rigoureusement les performances et limites des schémas d'extrapolation et d'intégration utilisés dans Dragon.

On observe les tendances suivantes :

Mode pcc0 : Ce mode, basé uniquement sur une extrapolation constante sans correction, présente des écarts par rapport à la zone de référence. Au niveau du Gd155, l'évolution est acceptable, tandis la concentration en Gd157 montre une sous-estimation au début de l'irradiation, qui se stabilise ensuite. L'erreur sur K_{eff} est relativement importante à la fin de l'évolution.

Mode pcc1 : L'introduction d'un correcteur linéaire permet une amélioration notable de la précision sur les concentrations, avec une réduction globale de l'écart et un comportement plus symétrique autour de la référence pour la concentration en

Gd157. De même, l'erreur sur K_{eff} est mieux maîtrisée, avec une diminution du pic initial et une évolution plus convergente.

Mode pcc2 : La concentration en Gd157 présente une évolution distincte par rapport au mode pcc0 en début de cycle, et reste proche de la zone de référence durant la quasi-totalité de l'irradiation. Ce comportement est toutefois moins marqué pour le Gd155, dont la précision reste plus variable. L'erreur sur K_{eff} reste contenue, avec un maximum plus faible que dans les deux autres modes et une convergence rapide vers une erreur moindre.

Ainsi, l'usage d'un correcteur plus sophistiqué dans le schéma PCC permet une meilleure prise en compte de la dynamique des taux de combustion, ce qui se traduit principalement par une amélioration de l'estimation de K_{eff} , notamment dans les phases de transition où une extrapolation simple ne suffit plus. L'impact sur les concentrations isotopiques reste en revanche plus limité.

Remarque : Parmi les schémas testés dans Serpent, seul le mode pcc1 correspond véritablement à un schéma prédictor-correcteur, tel que défini classiquement. De plus, les configurations pcc3 à pcc6 n'ont pas été intégrées dans cette analyse, puisqu'aucun correcteur n'a été implémenté dans nos calculs dans Dragon. Une comparaison intégrant ces modes aurait conduit à des résultats partiels ou difficilement interprétables, en l'absence d'implémentation équivalente dans Dragon.

2.3 Modèle de dépôt d'énergie

L'un des aspects essentiels dans la simulation de la dynamique du réacteur est la prise en compte du dépôt d'énergie généré par les neutrons et les rayonnements gamma. Dans le cadre de cette étude, les valeurs de $Q_{fission}$ (dépôt d'énergie par fission) de Dragon ont été imposées dans Serpent à l'aide du mot-clé `set fissh`. Cette approche permet de garantir la cohérence des valeurs utilisées dans les deux codes pour le calcul de la puissance produite lors des réactions de fission des noyaux fissiles.

2.3.1 Influence du modèle de dépôt d'énergie

Afin d'évaluer l'impact de l'énergie déposée lors des captures radiatives (n, γ) , où le gadolinium contribue de manière significative, sur la normalisation des taux de réaction à chaque pas de temps, deux modes de calcul du dépôt d'énergie ont été comparés :

- TOT : ce mode prend en compte l'ensemble des contributions énergétiques utilisées pour le calcul de la puissance, incluant l'énergie cinétique des neutrons ainsi que l'énergie des photons gamma émis lors des réactions (n, γ) . Ces gammas ne sont pas explicitement transportés (sauf dans les simulations couplées neutron-photon), mais leur énergie est ajoutée au bilan énergétique qui sert à normaliser les taux de réaction.
- NGO : dans ce mode, l'énergie associée aux photons gamma issus des réactions (n, γ) est artificiellement mise à zéro. Cela n'affecte pas les sections efficaces de capture, mais permet de neutraliser leur contribution énergétique dans le processus de normalisation, afin d'en isoler l'impact sur l'évolution isotopique.

L'objectif n'est donc pas d'évaluer l'effet physique direct des rayonnements gamma, mais de quantifier l'influence de leur énergie déposée, notamment via les captures sur le Gd, sur le calcul des taux de réaction normalisés, et d'assurer la cohérence entre les approches utilisées dans Serpent et Dragon sous des hypothèses énergétiques comparables.

Comparaison TOT/NGO Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 0, corr, extr, pcc1, endfb8r1 :

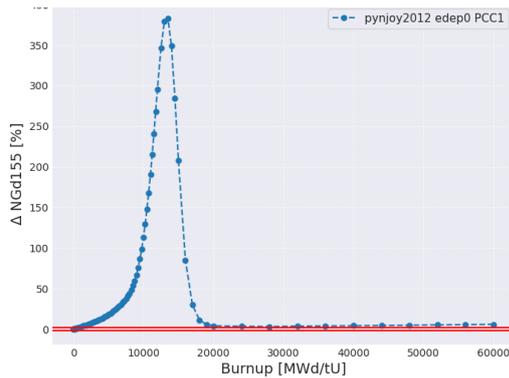


FIGURE 66 – ΔNGd_{155} - TOT

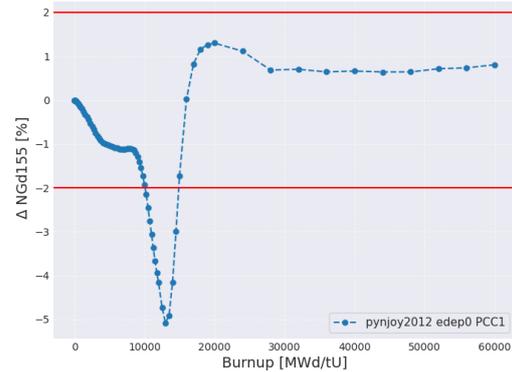


FIGURE 67 – ΔNGd_{155} - NGO

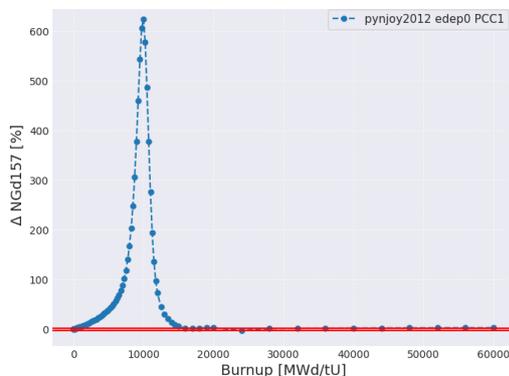


FIGURE 68 – ΔNGd_{157} - TOT

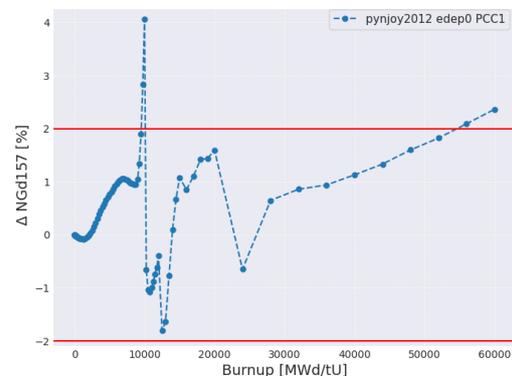


FIGURE 69 – ΔNGd_{157} - NGO

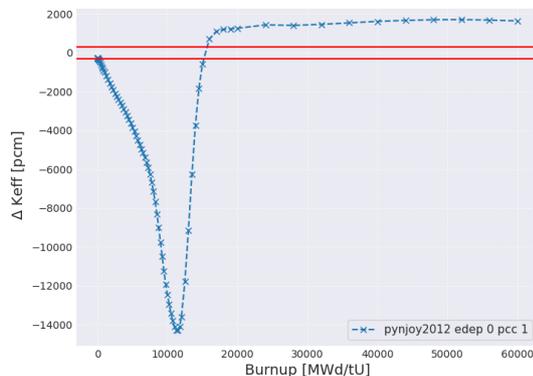


FIGURE 70 – ΔK_{eff} - TOT

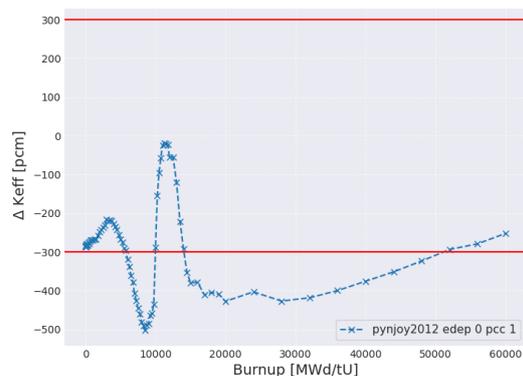


FIGURE 71 – ΔK_{eff} - NGO

Les figures 66 et 68 (TOT) montrent une surestimation massive de la concentration en Gadolinium 155 et 157 avec un pic d'erreur atteignant près de 400% et 600% autour de 10000 MWd/tU. Cette déviation traduit une mauvaise représentation de la consommation des isotopes Gd155 et Gd157 lorsqu'on intègre l'effet gamma dans un modèle mal ajusté thermiquement. À l'inverse, les figures 67 et 69 (NGO) montrent des écarts modérés, inférieurs à $\pm 5\%$ sur l'ensemble du cycle, bien plus cohérents avec les résultats attendus et compatibles avec les incertitudes des bibliothèques nucléaires.

De même, la Figure 70 révèle une dérive très importante du ΔK_{eff} , dépassant -14000 pcm, indiquant une forte incohérence entre la modélisation du dépôt d'énergie et l'évolution isotopique. En comparaison, la Figure 71 montre que l'approche NGO maintient les écarts sur K_{eff} dans une bande raisonnable (autour de -400 pcm), en ligne avec les écarts attendus entre codes de référence.

Ces résultats montrent qu'en mode TOT, les écarts importants observés sur les concentrations en gadolinium et sur le ΔK_{eff} proviennent avant tout d'un traitement incohérent du dépôt d'énergie entre les deux codes. En effet, l'intégration des dépôts gamma n'est pas modélisée de manière équivalente dans Dragon et Serpent, ce qui empêche toute comparaison rigoureuse. À l'inverse, le mode NGO, en ne considérant que les dépôts neutroniques, permet d'éliminer cette source d'incohérence. Il offre ainsi un cadre de comparaison plus juste entre les deux simulateurs, où les différences observées peuvent être attribuées à la physique modélisée ou aux bibliothèques de données, et non à un désalignement dans le traitement du dépôt d'énergie.

Remarque : Une partie de l'erreur observée à $t = 0$ pourrait être réduite par une modélisation plus précise de l'effet d'auto-protection du gadolinium. En effet, ce matériau fortement absorbant présente un auto-écrantage spatial important, qui influence les sections efficaces de capture $\sigma_{n,\gamma}$ pour les isotopes Gd₁₅₅ et Gd₁₅₇. Une meilleure estimation de cet effet permettrait d'obtenir des taux de réaction plus précis, selon la relation $\tau_{\text{réaction, iso}} = \sigma_{\text{réaction, iso}} \phi N_{\text{iso}}$, et donc d'améliorer la prédiction de l'évolution isotopique dès les premiers instants.

2.3.2 Comparaison du mode de dépôt d'énergie et de la normalisation dans Serpent

Dans Serpent, plusieurs modes de calcul du dépôt d'énergie sont disponibles via le paramètre `edepmode` (comme présenté dans la partie Méthodologie 1.3.2. La comparaison entre les modes `edepmode 2` et `edepmode 0` a été testée afin d'évaluer l'impact d'un traitement plus complet du dépôt d'énergie. Ce mode 2 prend en compte un plus grand nombre de contributions, incluant notamment les rayonnements gamma secondaires, les produits de désintégration et les énergies de réaction (capture, fission, etc.). Il permet ainsi une estimation plus réaliste de l'énergie thermique produite dans le réacteur, au prix d'une sensibilité accrue aux modèles thermiques et à la cohérence du traitement entre codes.

Un point essentiel dans ces calculs réside dans la manière de normaliser les flux neutroniques pour déterminer les taux de réaction. Deux approches peuvent être mises en œuvre :

- **Puissance constante** : la simulation impose une production d'énergie constante à chaque étape, ce qui correspond à la réalité d'un réacteur en fonctionnement nominal. Dans ce cas, le flux neutronique est ajusté dynamiquement pour compenser les variations de rendement énergétique liées à l'évolution du combustible.
- **Flux constant** : le flux neutronique est maintenu constant au cours du temps, ce qui simplifie les calculs mais entraîne une puissance variable selon l'étape d'irradiation. Cette hypothèse n'est généralement pas représentative du comportement réel d'un réacteur, mais elle peut s'avérer utile à des fins d'analyse. Dans notre cas, l'hypothèse de flux constant peut servir de référence intermédiaire pour isoler les effets introduits par le calcul du flux dans le cadre de la normalisation à puissance constante.

Pour garantir une bonne comparaison entre les résultats de Dragon et de Serpent, il est important d'utiliser une hypothèse cohérente de normalisation (puissance ou flux constant) et de bien comprendre les différences induites par le choix du mode de dépôt d'énergie.

L'analyse comparative des figures 72 à 77 (cas NG0) et des figures 78 à 83 (cas TOT) ci-dessous permet d'évaluer l'influence du paramètre *edep* dans les simulations Serpent, en particulier vis-à-vis de la référence Dragon.

Comparaison *edep0/edep2* avec modèle NG0 dans Dragon(ev3785)/Serpent - Cas *corr, extr, pcc1, endfb8r1* :

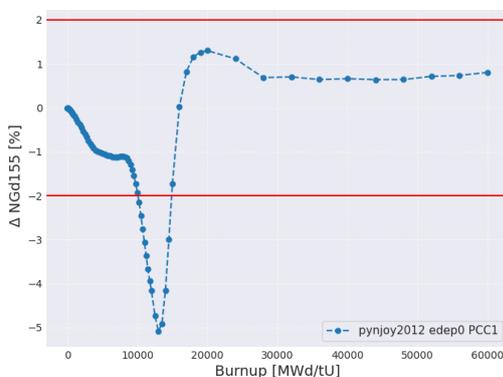


FIGURE 72 – ΔNGd_{155} - *edep0*

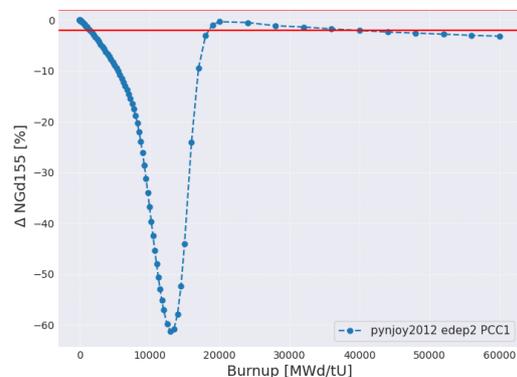


FIGURE 73 – ΔNGd_{155} - *edep2*

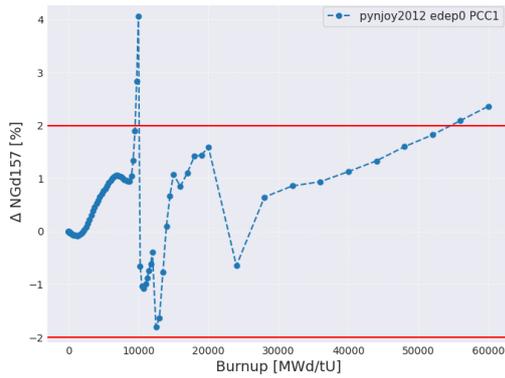


FIGURE 74 – ΔNGd_{157} - edep0

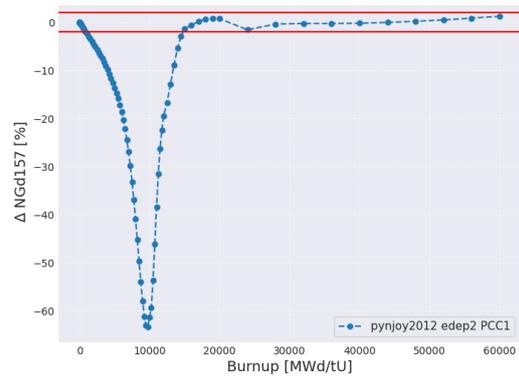


FIGURE 75 – ΔNGd_{157} - edep2

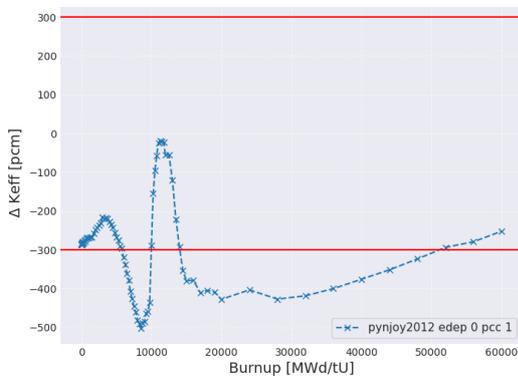


FIGURE 76 – ΔK_{eff} - edep0

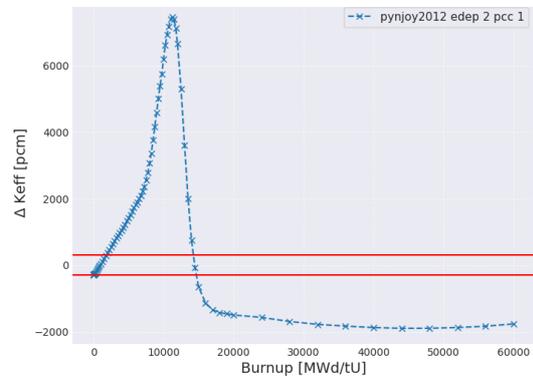


FIGURE 77 – ΔK_{eff} - edep2

Comparaison edep0/edep2 avec modèle T0T dans Dragon(ev3785)/Serpent - Cas corr, extr, pcc1, endfb8r1 :

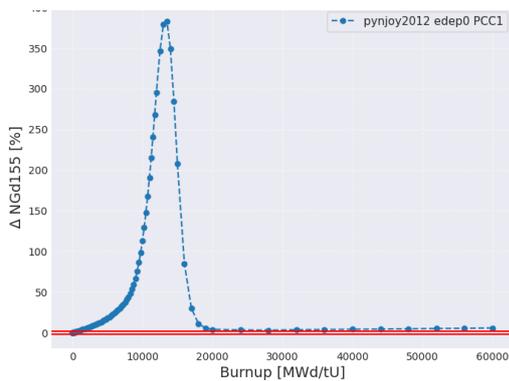


FIGURE 78 – ΔNGd_{155} - edep0

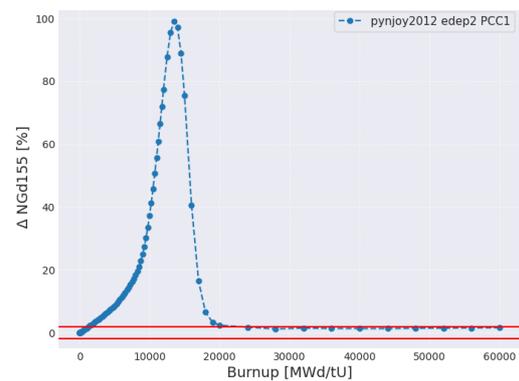


FIGURE 79 – ΔNGd_{155} - edep2

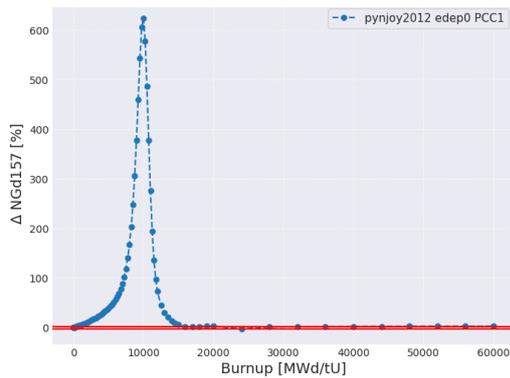


FIGURE 80 – ΔNGd_{157} - edep0

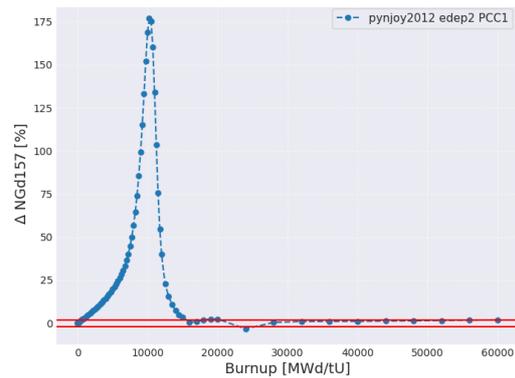


FIGURE 81 – ΔNGd_{157} - edep2

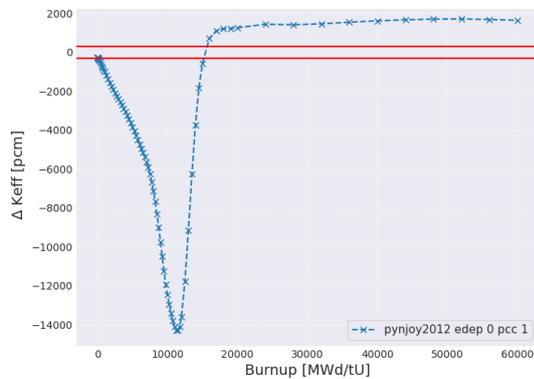


FIGURE 82 – ΔK_{eff} - edep0

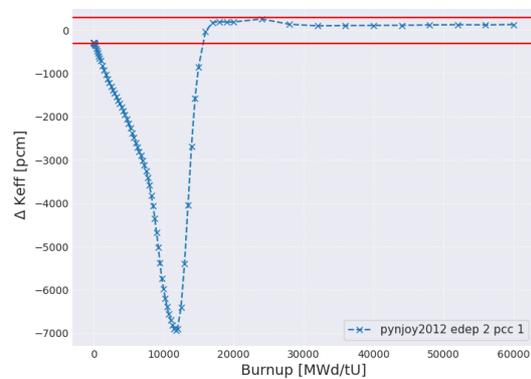


FIGURE 83 – ΔK_{eff} - edep2

Dans le cas NGO, les résultats obtenus avec le mode **edep0** montrent une cohérence acceptable avec la référence pour les deux isotopes de gadolinium. En effet, les figures 72 et 74 présentent des écarts modérés (typiquement contenus dans une bande de $\pm 5\%$), assurant un bon accord avec notre référence. À l'inverse, les figures 73 et 75, correspondant au mode **edep2** de l'évolution des isotopes de gadolinium, révèlent des écarts importants, notamment en début d'irradiation où les sous-estimations peuvent atteindre jusqu'à -60% . Ces dérives suggèrent une incompatibilité entre l'option **edep2** et l'hypothèse d'absence de dépôt gamma (NGO), probablement en raison d'une mauvaise prise en compte de la normalisation énergétique.

Concernant la réactivité (figures 76 et 77), le mode **edep0** conduit à des écarts relativement constants et raisonnables, de l'ordre de -500pcm , alors que le mode **edep2** présente un comportement non physique : une surestimation initiale massive ($> 7000\text{ pcm}$) suivie d'une chute brutale, confirmant un déséquilibre de normalisation dans ce paramètre.

En revanche, dans le cas TOT (prise en compte du dépôt gamma), les courbes obtenues avec **edep0** et **edep2** présentent une évolution similaire pour les concentrations isotopiques comme pour ΔK_{eff} (figures 78 à 83). Toutefois, les résultats avec **edep2** apparaissent ici plus proches de la zone de référence, avec des écarts globaux moindres que ceux obtenus avec **edep0**. Cela suggère que, dans un contexte où le dépôt énergétique total est correctement modélisé, le mode **edep2** devient plus fiable et physiquement pertinent.

Ainsi, le mode `edep0` fournit des résultats robustes dans un cadre simplifié, notamment lorsque seule l'énergie déposée par la fission est prise en compte, comme dans le cas `NGO`. En revanche, le mode `edep2`, qui repose sur une normalisation via les coefficients `KERMA`, suit une logique différente de celle des approches basées sur les `Q-values`, et ne peut donc pas être directement comparé à `NGO` ou `TOT`. Ces écarts ne relèvent pas d'une incohérence, mais traduisent simplement des choix de modélisation distincts en matière de dépôt d'énergie.

Remarque : Les résultats obtenus pour le cas `edep2` avec le modèle `TOT` présentent des valeurs absolues relativement élevées. Cette observation peut s'expliquer par le fait que le mode `edep2` repose sur une normalisation via les coefficients `kerma`, contrairement aux modèles `TOT` ou `NGO`, qui n'en tiennent pas compte. Ainsi, une comparaison directe n'est pas strictement valide sans utiliser également des `kerma` dans `Dragon`. Une amélioration est toutefois attendue avec la nouvelle version de `Dragon` (`ev3785`), notamment grâce à la correction apportée à l'extrapolation.

2.3.3 Comparaison avec les options de corrélations des résonances : `CORR` vs `NOCORR`

Une autre dimension de l'étude a porté sur l'influence des résonances isotopiques, particulièrement lorsqu'elles sont modélisées de manière corrélée ou non lors du calcul d'autoprotection. Cette analyse a été réalisée à l'aide des mots-clés `CORR` et `NOCORR` dans `Dragon5`.

- `CORR` : Avec ce mot-clé, les résonances d'un isotope sont considérées comme corrélées avec celles d'autres isotopes ayant le même indice `INRS` (indice de mélange résonant). Par exemple, dans le cas du gadolinium, les résonances de Gd_{155} et Gd_{157} sont modélisées de manière conjointe, car leurs résonances se chevauchent dans l'espace énergétique. Cette approche permet de mieux capturer l'effet collectif des résonances isotopiques, ce qui peut avoir un impact significatif sur les résultats de réactivité, en particulier dans les réacteurs utilisant des poisons neutroniques comme le gadolinium.
- `NOCORR` : En revanche, lorsque le mot-clé `NOCORR` est activé, les résonances sont supposées indépendantes. Cela signifie que chaque isotope est traité de manière isolée, sans tenir compte des corrélations entre les résonances des différents isotopes. Dans ce cas, les résonances de Gd_{155} et Gd_{157} seraient considérées comme indépendantes, ce qui pourrait entraîner une sous-estimation des effets de la superposition des résonances dans les zones où ces isotopes sont présents.

Les résultats des comparaisons avec les options de résonance sont ci-dessous, avec la méthode `RSE` pour les calculs d'autoprotection.

Comparaison `CORR/NOCORR Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 0, extr, pcc1, endfb8r1` :

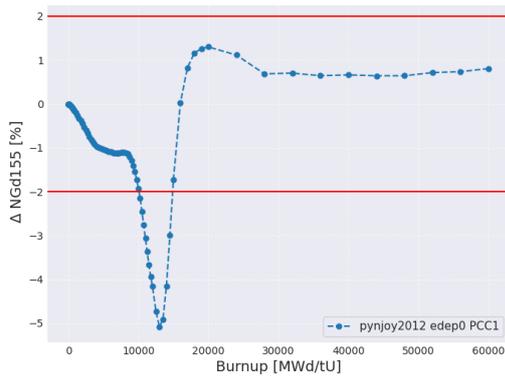


FIGURE 84 – ΔNGd_{155} - CORR

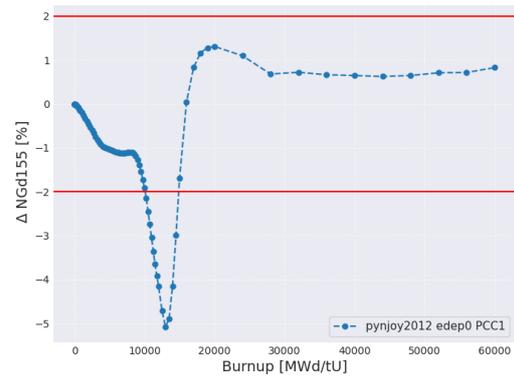


FIGURE 85 – ΔNGd_{155} - NOCORR

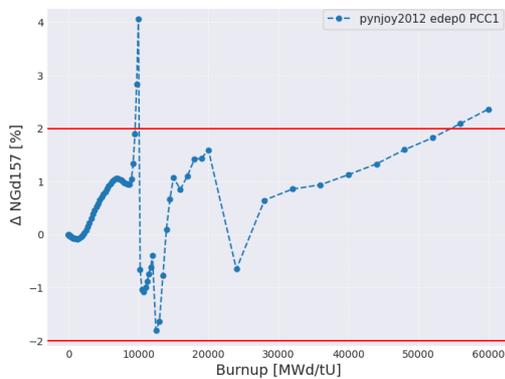


FIGURE 86 – ΔNGd_{157} - CORR

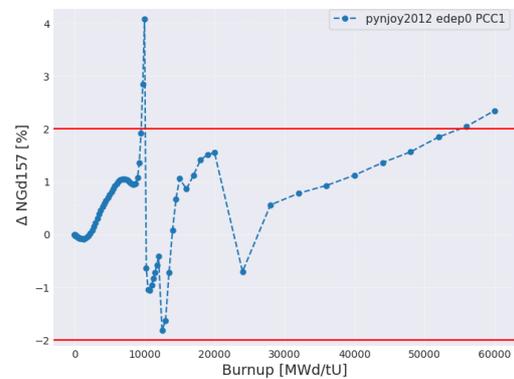


FIGURE 87 – ΔNGd_{157} - NOCORR

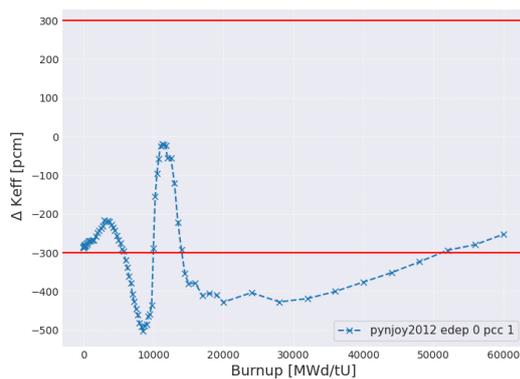


FIGURE 88 – ΔK_{eff} - CORR

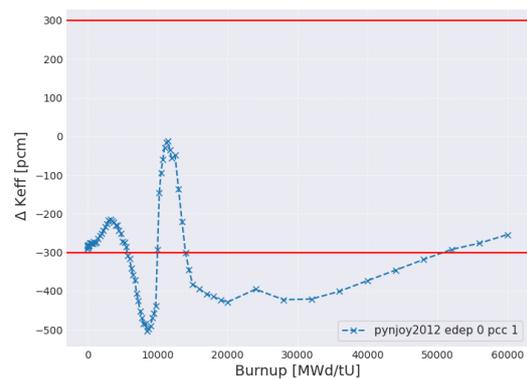


FIGURE 89 – ΔK_{eff} - NOCORR

Pour vérifier si ces premiers résultats sont dus à un choix du mode de dépôt d'énergie, on effectue la même comparaison CORR/NOCORR pour le cas edepmode 2.

Comparaison CORR/NOCORR Dragon(ev3785)/Serpent - Cas edep 2, extr, pcc1, endfb8r1 :

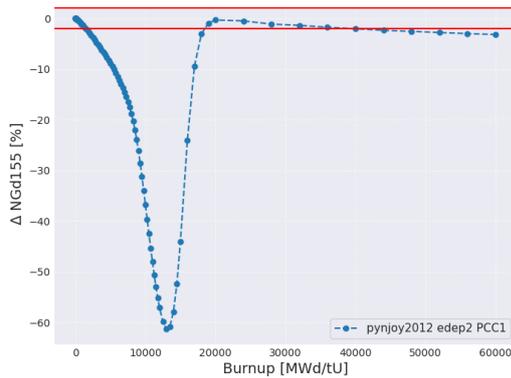


FIGURE 90 – ΔNGd_{155} - CORR

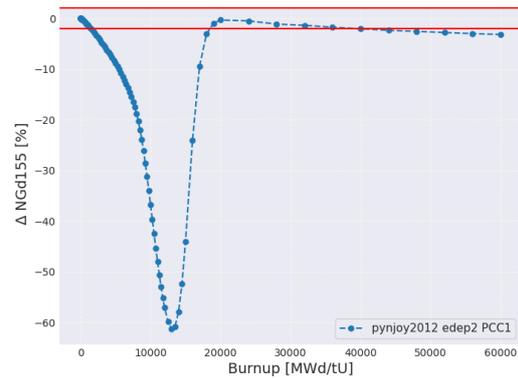


FIGURE 91 – ΔNGd_{155} - NOCORR

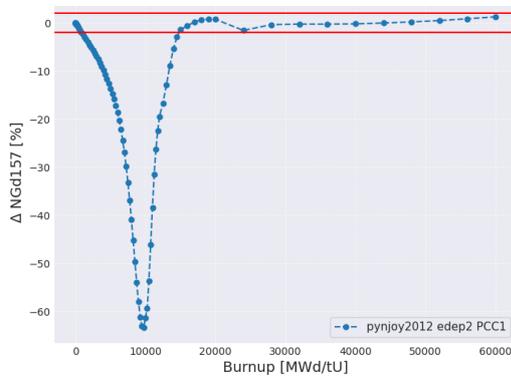


FIGURE 92 – ΔNGd_{157} - CORR

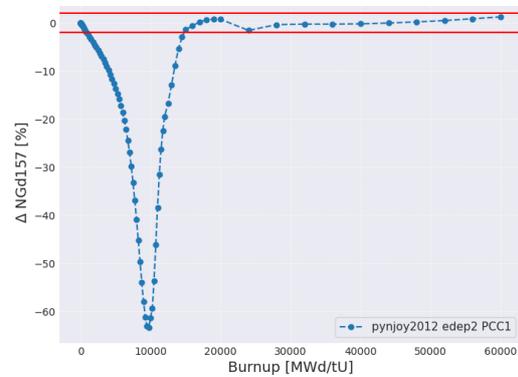


FIGURE 93 – ΔNGd_{157} - NOCORR

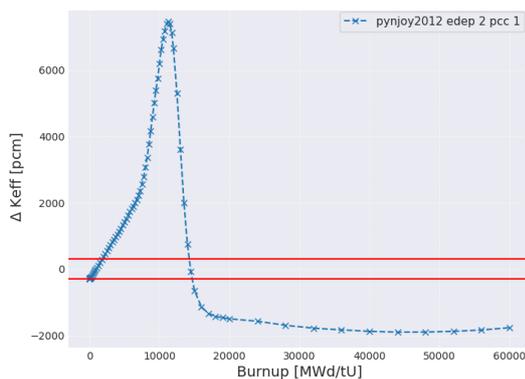


FIGURE 94 – ΔK_{eff} - CORR

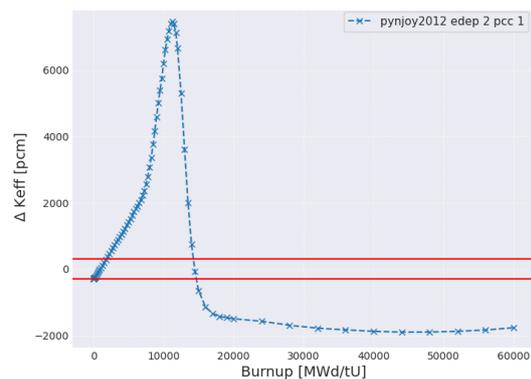


FIGURE 95 – ΔK_{eff} - NOCORR

Les tests réalisés avec les mots-clés CORR et NOCORR n'ont pas conduit à des résultats concluants, comme le montrent les graphiques ci-dessus. En effet, dans les configurations testées, aucune différence n'a été observée entre les deux options, suggérant que l'effet des corrélations entre les résonances des isotopes n'est pas déterminant pour les résultats obtenus. Cela pourrait être dû à la spécificité de notre cellule étudiée, où les effets de résonance sont moins influents que d'autres facteurs comme la composition isotopique ou les conditions de fonctionnement.

Remarque : Il est important de signaler que l'impact de ces options pourrait varier selon les types de réacteurs simulés et les conditions expérimentales prises en compte. Des tests supplémentaires seront nécessaires pour explorer plus en profondeur l'effet des corrélations de résonance dans d'autres contextes.

2.4 Comparaison de bibliothèques

Une étude a été menée pour évaluer l'impact du changement de bibliothèque nucléaire sur les résultats obtenus avec le code Dragon5. Trois versions distinctes de bibliothèques de sections efficaces, appelées draglibs, ont été comparées afin d'analyser l'influence des modifications des données nucléaires, en particulier celles liées au dépôt d'énergie et à la capture des neutrons.

2.4.1 Présentation des bibliothèques

Les bibliothèques comparées sont les suivantes :

- **Ancienne draglib** : Cette version repose sur des coefficients KERMA approximés à partir des valeurs de Q (Q-values). Bien que cette approche ait été utilisée dans des simulations antérieures, elle présente une précision limitée, en particulier pour les matériaux où les coefficients KERMA jouent un rôle crucial dans les calculs de dépôt d'énergie.
- **Draglib enrichie avec MT=301** : Cette version améliore la précision en intégrant la section MT=301, correspondant au KERMA total. L'ajout de cette section permet une meilleure modélisation des effets de dépôt d'énergie, en particulier pour les isotopes ayant des sections efficaces significatives dans ce domaine.
- **Draglib complète** : La version la plus complète intègre non seulement MT=301 (KERMA total) auquel on soustrait MT=318 (KERMA de fission) et on additionne MT=458 (Q-values précises de fission). Ces ajouts permettent une description plus fine des interactions des neutrons avec les noyaux, et en particulier, en théorie une meilleure estimation des effets thermiques et radiatifs dus aux produits de fission.

L'objectif de cette comparaison est de déterminer comment l'intégration de sections efficaces plus précises influence les résultats des simulations.

2.4.2 Résultats de la comparaison des bibliothèques

Dans les schémas ci-dessous, on nomme :

- Old Draglib : l'ancienne bibliothèque
- Draglib K1 : la bibliothèque enrichie avec (MT=301)
- Draglib K2 : la bibliothèque enrichie avec (MT=301) - (MT=318) + (MT=458)

Comparaison Ancienne Draglib/Draglib K1/Draglib K2 pour Dragon(ev3785)/Serpent
- *Cas edep 2, corr, extr, pcc1* :

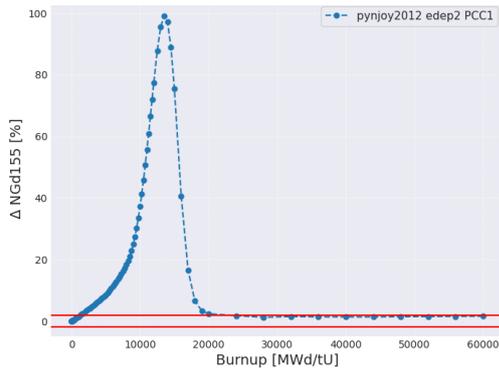


FIGURE 96 – ΔNGd_{155} - Old Draglib

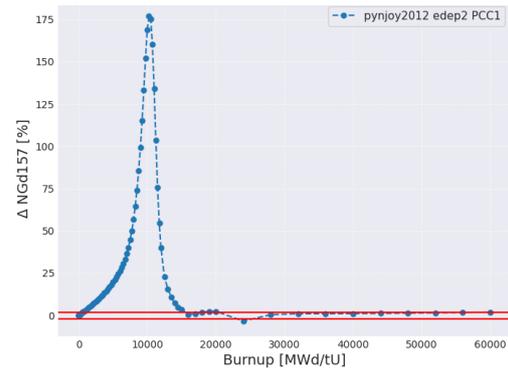


FIGURE 97 – ΔNGd_{157} - Old Draglib

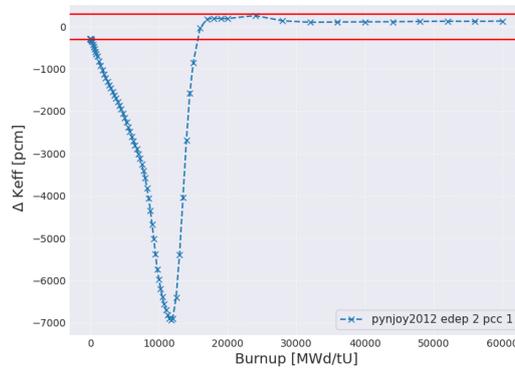


FIGURE 98 – ΔK_{eff} - Old Draglib

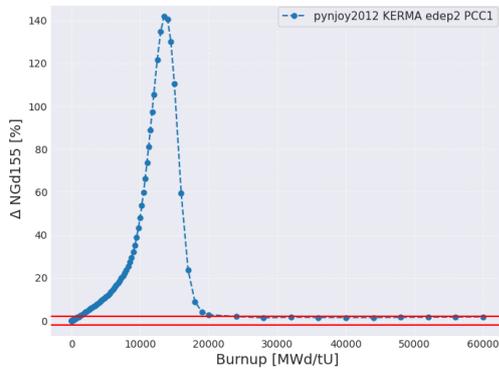


FIGURE 99 – ΔNGd_{155} - Draglib K1

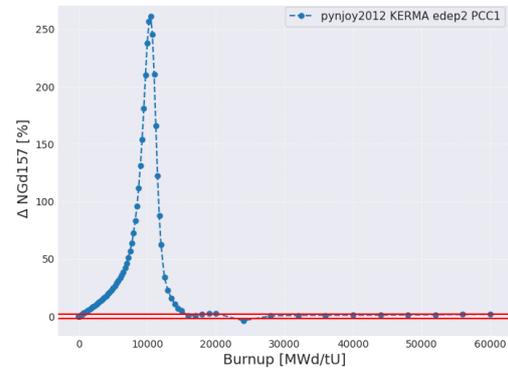


FIGURE 100 – ΔNGd_{157} - Draglib K1

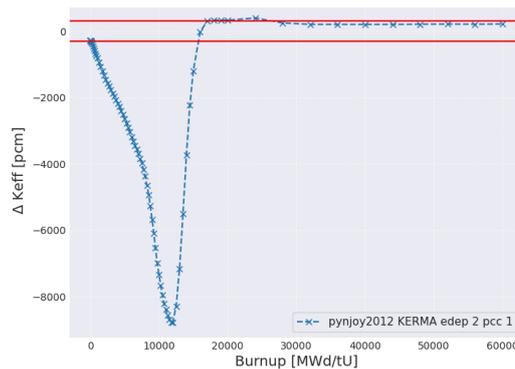
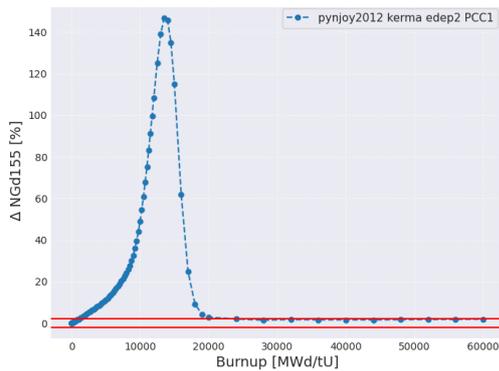
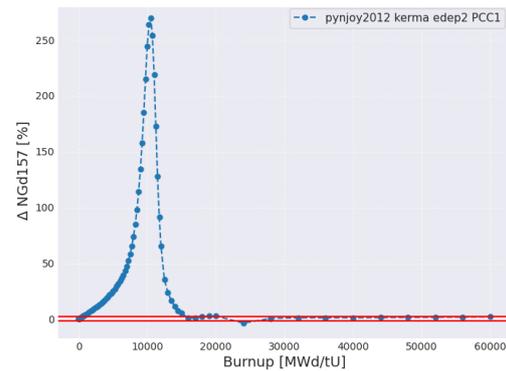
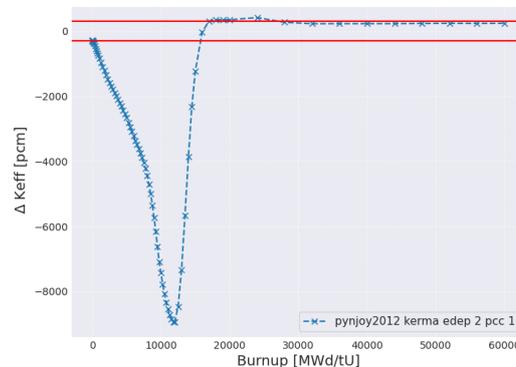


FIGURE 101 – ΔK_{eff} - Draglib K1


 FIGURE 102 – ΔNGd_{155} - Draglib K2

 FIGURE 103 – ΔNGd_{157} - Draglib K2

 FIGURE 104 – ΔK_{eff} - Draglib K2

L'analyse comparative des trois versions de **draglib** met en évidence un constat important : malgré l'enrichissement progressif des bibliothèques en données KERMA (MT=301, MT=318, MT=458), les résultats obtenus avec Dragon5 ne montrent pas d'amélioration notable en termes de précision par rapport à la référence Serpent.

On observe les tendances suivantes :

Old Draglib : Cette version, reposant sur des estimations des Q -values, reproduit les grandes tendances d'évolution des isotopes Gd155 et Gd157. L'écart relatif à la référence est visible, mais cohérent dans le temps. L'erreur sur le facteur de multiplication effectif K_{eff} reste significative.

Draglib K1 : L'ajout de la section MT=301 (KERMA total) ne modifie pas sensiblement les évolutions. Les courbes de concentration restent très proches de celles obtenues avec la **Old Draglib**, et les écarts vis-à-vis de Serpent sont amplifiés.

Draglib K2 : Malgré la correction des sections MT=318 (KERMA sans fission) et MT=458 (Q -values de fission), aucun gain en précision n'est observé. Les trajectoires des isotopes sont quasiment superposables à celles de la **draglib K1**. L'écart avec Serpent, tant sur les concentrations isotopiques que sur K_{eff} , reste équivalent, voire parfois légèrement plus prononcé.

Ces résultats montrent que l'enrichissement des draglibs n'a pas eu l'effet attendu sur la fidélité des simulations vis-à-vis de la référence. L'évolution temporelle des isotopes est

correctement reproduite dans tous les cas, mais sans que les nouvelles bibliothèques ne permettent de corriger les écarts de valeur absolue.

2.5 Comparaison Serpent/OpenMC

Une comparaison directe a été effectuée entre les résultats obtenus avec Serpent2 et ceux produits par OpenMC, en se concentrant sur le mode de dépôt d'énergie `edep2`, basé sur les coefficients KERMA (sections MT301, MT318) et les Q-values de fission (section MT458). Le cas analysé repose sur un schéma d'intégration CELI (correcteur linéaire `pccl`).

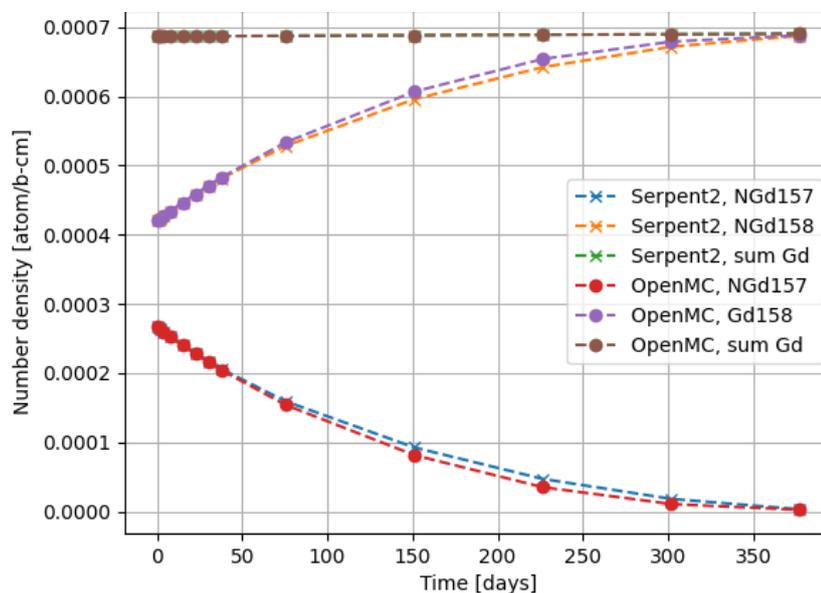


FIGURE 105 – Évolution des densités de Gd157 et Gd158

La figure 105 montre une bonne cohérence entre Serpent2 et OpenMC pour les évolutions des isotopes du gadolinium. La conservation de la somme des densités atomiques ($\text{sum Gd} = \text{Gd 157} + \text{Gd158}$) est globalement respectée, avec des écarts faibles sur toute la durée d'irradiation.

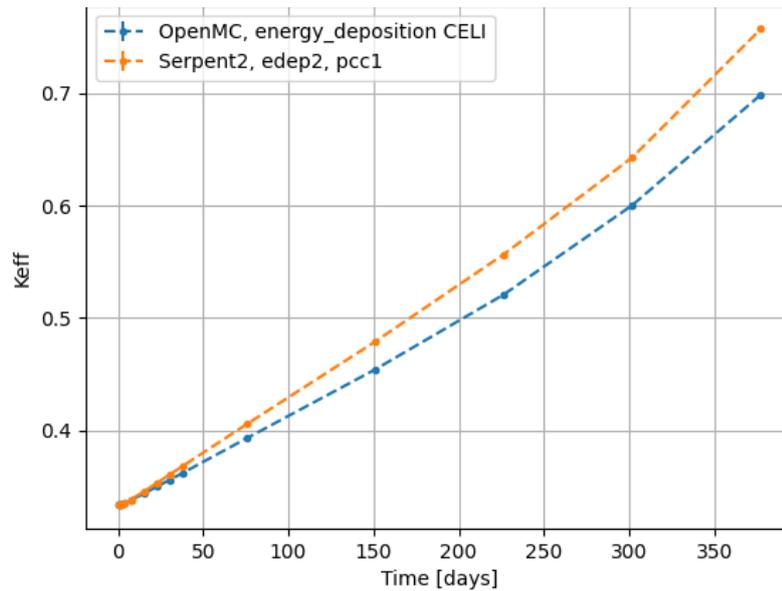


FIGURE 106 – Comparaison du K_{eff} entre Serpent2 et OpenMC

En revanche, la figure 106 met en évidence une divergence entre les deux codes sur l'évolution de K_{eff} , notamment en fin de cycle, où l'écart peut atteindre jusqu'à 6000 pcm. La moyenne des écarts reste modérée, de l'ordre de 1350 pcm. Les tendances globales des deux courbes sont similaires sur l'ensemble de l'irradiation, mais la divergence est importante pour des temps élevés. Cette divergence semble corrélée à une consommation plus rapide du Gd_{157} dans OpenMC par rapport à Serpent2, ce qui influence directement la réactivité sur la seconde moitié de l'irradiation.

Cette comparaison met ainsi en évidence une cohérence relativement satisfaisante entre Serpent2 et OpenMC sur l'évolution isotopique des poisons neutroniques, en particulier pour le couple $\text{Gd}_{157}/\text{Gd}_{158}$. La conservation de la somme des densités atomiques témoigne d'une gestion plutôt rigoureuse des réactions de capture neutronique dans les deux codes.

3 Bilan des résultats

Ce travail avait pour but de valider les modèles de dépôt d'énergie utilisés dans les principaux codes de simulation neutronique, notamment pour suivre l'évolution isotopique de matériaux fortement absorbants comme le gadolinium. L'objectif principal était d'expliquer les différences observées sur le burnup des isotopes Gd_{155} et Gd_{157} entre Dragon5, Serpent2 et OpenMC, à partir d'un cas benchmark simplifié.

Nous avons d'abord montré que la méthode d'extrapolation dans le temps avait un rôle clé dans la précision des calculs d'évolution. Dans la version initiale de Dragon (`ev3634`), la consommation du gadolinium était surestimée, en grande partie à cause d'un facteur d'extrapolation mal adapté. La mise à jour vers la version `ev3785` (et les suivantes) a corrigé ce problème, ce qui a permis de réduire les écarts sur la concentration en Gd_{157} et sur le facteur de criticité (K_{eff}), pour les rapprocher des références Monte Carlo.

L'étude des modèles de dépôt d'énergie a aussi mis en avant l'importance de la prise en compte des contributions gamma. Le mode TOT, qui incluait toutes les interactions, était plus complet en théorie, mais il a entraîné des écarts significatifs sur l'évolution isotopique et sur K_{eff} , sans doute à cause d'un déséquilibre thermique mal compensé. À l'inverse, le mode `edep0`, plus simple, a donné des résultats plus stables et plus proches des benchmarks dans le cas `edep0`.

Nous avons aussi comparé plusieurs bibliothèques nucléaires, en particulier avec des jeux de données enrichis (MT=301, 318, 458) et la transition vers ENDF/B-VIII.1. Ces évolutions étaient censées permettre une meilleure description des phénomènes physiques, notamment pour des isotopes complexes comme ceux du gadolinium. Pourtant, elles n'ont pas amélioré la fidélité globale des simulations par rapport aux références. L'évolution des isotopes dans le temps a été bien reproduite, mais les écarts absolus sur les concentrations ou sur K_{eff} sont restés présents, sans changement notable avec ces nouvelles bibliothèques.

Par ailleurs, les tests sur les schémas d'intégration (PCC, EXTR/NOEX) ont confirmé que la manière dont les taux de réaction sont estimés au cours d'un pas de temps, via une extrapolation linéaire ou une valeur constante, joue un rôle essentiel pour limiter les erreurs en début de cycle, notamment lorsque la composition isotopique et la réactivité évoluent rapidement.

Enfin, une comparaison directe entre Serpent2 et OpenMC, en mode de dépôt d'énergie `edep2` (basé sur les coefficients KERMA et les Q-values de fission), a montré une bonne cohérence sur l'évolution des densités atomiques des isotopes Gd_{157} et $Gd-158$. La conservation de la somme des densités de gadolinium a été bien respectée, avec des écarts extrêmement faibles (de l'ordre de 10^{-7} atom/b-cm), ce qui a prouvé que les deux codes géraient de manière cohérente les réactions de capture et de transmutation. En revanche, nous avons noté une divergence importante sur l'évolution de K_{eff} , notamment en fin de cycle, avec un écart pouvant aller jusqu'à 6000 pcm, même si la moyenne des différences est restée modérée (environ 1350 pcm).

4 La construction du projet professionnel

4.1 Le monde de la recherche

Ce stage m'a permis de découvrir concrètement le fonctionnement d'un laboratoire de recherche académique, en l'occurrence un environnement où évoluent principalement des doctorants. Le travail était très centré sur la programmation, avec des journées entières passées à coder, à tester et à déboguer les outils de simulation. J'ai constaté que la part de temps dédiée à la résolution de bugs ou à la mise au point d'outils techniques était bien plus importante que celle consacrée à l'analyse des résultats.

Travailler dans un domaine de recherche amorcé depuis plusieurs années ne s'est pas forcément révélé un avantage immédiat : la prise en main du sujet s'est avérée longue et complexe, en raison notamment de la spécialisation du domaine, de la richesse des outils et de la documentation existante. Il m'a fallu plusieurs semaines avant de maîtriser suffisamment les bases pour commencer à produire des premiers résultats. Par ailleurs, les pistes à explorer n'étaient pas toujours clairement définies ; il fallait tester de nombreuses hypothèses sans garantie de succès ou d'un quelconque changement.

Un point positif notable dans mon cas a été la présence d'un doctorant travaillant sur le projet depuis plus d'un an et demi, qui a pu m'accompagner efficacement dans les premières étapes : installation des codes, compréhension du modèle, premiers tests, etc. Cela a grandement facilité mon intégration et ma capacité à produire des résultats.

Cependant, j'ai ressenti une certaine frustration liée à l'absence de sens physique direct : le modèle étudié étant une cellule simplifiée, il ne permettait pas à lui seul de représenter fidèlement un cœur de réacteur. Les objectifs de recherche étaient globaux, et les sous-objectifs n'émergeaient qu'au fil des blocages techniques, ce qui rendait difficile une planification claire du travail. Cette expérience m'a permis de mieux cerner les limites du travail de recherche académique dans le cadre de mon projet professionnel.

4.2 L'expérience de l'expatriation

Ce stage s'est déroulé à Montréal, une grande ville francophone au cadre de vie agréable et sécuritaire. Le quotidien y est très proche de celui que l'on connaît en France, notamment en raison de la forte présence de Français, particulièrement dans les milieux universitaires. Tous les doctorants du laboratoire étaient d'ailleurs d'origine française.

Le mode de travail au Québec est également moins rigide qu'en France, tant sur le plan du temps de travail que dans les rapports hiérarchiques. Cette souplesse rend l'environnement plus détendu et flexible, sans pour autant nuire à l'efficacité.

En revanche, le contexte énergétique québécois, historiquement marqué par une forte production hydroélectrique, est très peu favorable à l'énergie nucléaire. Il y a donc peu de perspectives professionnelles dans ce domaine dans la région. La majorité des opportunités nucléaires se trouve plutôt du côté de l'Ontario, autour de Toronto, où sont situées les principales installations nucléaires du Canada. Toutefois, j'ai pu observer plusieurs coopérations avec des entreprises françaises du secteur nucléaire, notamment à travers divers

chercheurs qui entretiennent des liens étroits avec les institutions européennes (comme mon tuteur Alain Hébert avec le CEA et *newcleo*).

4.3 Poursuite dans le secteur du nucléaire

À l'issue de ce stage, mon intérêt pour le domaine du nucléaire s'est confirmé, avec toutefois une orientation plus nette vers la recherche appliquée et le développement, plutôt que vers la recherche académique. Je souhaite m'orienter vers des structures innovantes en lien avec l'industrie, où les problématiques sont concrètes, les objectifs clairement définis, et où le travail se fait en équipe. J'avais eu auparavant l'occasion d'expérimenter ce mode de fonctionnement dans des entreprises comme *newcleo*, qui développent des concepts de réacteurs avancés, et cela correspond bien à ma vision.

Dans cette optique, je poursuivrai ma formation l'année prochaine en contrat de professionnalisation chez Framatome, au sein du service sûreté. Cette expérience me permettra de consolider mes compétences dans un cadre industriel exigeant, en lien direct avec les enjeux actuels du secteur.

5 Conclusion

Ce stage de césure à Polytechnique Montréal m'a permis d'appréhender les enjeux liés à la modélisation neutronique et à la simulation de l'évolution isotopique dans les réacteurs nucléaires, notamment sur une cellule dopée au gadolinium.

À travers l'étude comparative des codes Dragon5, Serpent2 et OpenMC, j'ai pu mettre en évidence divers aspects qui étaient responsables de l'erreur en évolution du gadolinium observée lors de précédents travaux, comme l'importance d'un facteur d'extrapolation calibré, la robustesse relative des différents modes de dépôt d'énergie, ou encore l'influence des bibliothèques de données nucléaires sur les résultats. Ce travail a aussi permis de souligner la nécessité d'adapter finement les schémas numériques au contexte de simulation pour éviter des erreurs systématiques, parfois de grande ampleur.

D'un point de vue professionnel, cette expérience m'a offert une immersion dans le monde de la recherche académique, tout en confirmant mon souhait d'évoluer vers des environnements plus appliqués, au sein d'acteurs industriels du secteur nucléaire. Ce stage m'a aussi permis de renforcer mes compétences techniques en simulation et en programmation scientifique.

Références

- [1] HÉBERT Alain, *Applied Reactor Physics*, Presses Internationales Polytechnique, 2009, ISBN : 978-2553011073.
- [2] HÉBERT Alain, *DRAGON5 and DONJON5, the contribution of École Polytechnique de Montréal to the SALOME platform*, Ann. Nucl. Energy, 87, 12–20 (2016).
- [3] DRAGON5, *Code déterministe pour la physique des réacteurs*, École Polytechnique de Montréal, <http://www.polymtl.ca/merlin/logiciels/dragon5.html>
- [4] SERPENT, *A Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*, VTT Technical Research Centre of Finland, <https://serpent.vtt.fi>
- [5] OPENMC, *Monte Carlo Code for Nuclear Reactor Simulations*, MIT Computational Reactor Physics Group, <https://openmc.org>
- [6] FRANÇOIS Mathias, FEDE Lucas, *Développement de schémas de calcul avec le code de réseau Dragon5 pour la simulation d'assemblages de réacteurs de type VVER-1000 et validation avec le code stochastique Serpent2*, Rapport de projet de fin d'études, EAMEA, Polytechnique Montréal, 2023, http://merlin.polymtl.ca/downloads/ARCHIVE_VVER_20230912/CR_PFE_2023_28092023.pdf.
- [7] FONTAINE Pierre, PANISI Philippe, *Contribution à la modélisation d'un mini cœur VVER dans l'environnement Dragon5 et validation avec le code stochastique Serpent2*, Rapport de projet de fin d'études, EAMEA, Polytechnique Montréal, 2024, http://merlin.polymtl.ca/downloads/2024_09_12_PFE_Fontaine_Panisi.pdf.
- [8] DIOP Cheikh M'Backé, CEA/Saclay, *Physique des réacteurs nucléaires – Bases de la physique nucléaire*, Techniques de l'ingénieur, Génie nucléaire, 2016/01/10, DOI : 10.51257/a-v2-bn3010
- [9] MATERSON Robert E., *Introduction to Nuclear Reactor Physics*, Academic Press, 2012, ISBN : 978-0123864626.
- [10] TUOMINEN Riku, VALTAVIRTA Ville, LEPPÄNEN Jaakko, *New energy deposition treatment in the Serpent 2 Monte Carlo code*, Annals of Nuclear Energy, Volume 128, 2019, Pages 291–299, DOI : 10.1016/j.anucene.2019.01.038.
- [11] OECD Nuclear Energy Agency (NEA), *JANIS Book : Cross sections of Gd157 (n,γ) → Gd158*, ENDF/B-VIII.0 and JEFF-3.3 comparison, <https://www.oecd-nea.org/janisweb/book/neutrons/Gd157/MT102/renderer/2994>.