

RAPPORT DE PROJET DE FIN D'ÉTUDES

École des applications militaires de l'énergie atomique

**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**

Projet réalisé par :

le lieutenant de vaisseau
Mathias François
mathias.francois@intradef.gouv.fr

l'enseigne de vaisseau de 1^{ère} classe
Lucas Fede
lucas.fede@intradef.gouv.fr

Sous le tutorat de :

Alain Hébert
alain.hebert@polymtl.ca

Septembre 2023

REMERCIEMENTS

Nous souhaitons exprimer notre gratitude envers les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce projet de fin d'études.

Nous remercions en premier lieu Alain Hébert, professeur de neutronique à l'École Polytechnique de Montréal et directeur de notre projet, pour sa confiance accordée dès le début de cette aventure, sa disponibilité tout au long du stage, son apport technique essentiel à la réalisation de ce dernier, ainsi que pour les enseignements précieux que nous avons pu tirer de ses conseils avisés.

Nous remercions ensuite l'état-major de l'EAMEA pour la confiance accordée pour la réalisation de ce projet, ainsi que pour le financement généreux qui a rendu ce stage au Canada possible.

Nous sommes particulièrement reconnaissants envers le corps enseignant de l'EAMEA, en particulier nos professeurs de neutronique, pour les connaissances techniques qu'ils ont su nous transmettre durant l'année ayant précédé ce projet. Nous les remercions pour leur soutien auprès de la hiérarchie militaire durant la phase de création du projet.

Nous reconnaissons l'aide précieuse apportée par notre collègue de laboratoire, Cyprien Richard, durant quatre des six mois du projet. Son travail d'optimisation remarquable a été déterminant dans l'obtention de résultats suffisamment précis. Nous louons ses compétences accrues en informatique, notamment sur Python, ainsi que sa bonne humeur constante.

Merci à Ahmed Naceur, étudiant en thèse à l'École Polytechnique de Montréal, pour son aide précieuse dans la compréhension des codes de calculs neutroniques DRAGON5 et Serpent2, ainsi que pour sa disponibilité sans faille. Sa contribution a été d'une importance capitale dans la réussite de nos simulations.

Nous remercions également Elias-Yammir Garcia-Cervantes, du Commissariat à l'Énergie Atomique du centre de Cadarache, DES/IRESNE/DER/SPRC/LEPH, pour le temps qu'il a consacré à la réalisation de la géométrie ALAMOS d'un petit assemblage, essentiel à la progression de notre étude.

Nous remercions Vivian Salino, ingénieur-chercheur à l'IRSN, IRSN/PSN-RES/SNC/LN, pour son aide précieuse dans l'avancée des pistes exploratoires en fin de projet, notamment les difficultés liées à la prise en compte exacte du dépôt d'énergie dans les codes stochastiques.

Merci à Alberto Brighenti, de Framatome – DTIPD Codes and Methods Department, Paris – La Défense, responsable des calculs de réseau chez Framatome pour le projet CAMIVVER, d'avoir accepté d'être notre rapporteur et d'avoir consacré du temps à la lecture de notre rapport.

Enfin, nous tenons à remercier chaleureusement tous nos amis rencontrés à Montréal, qui ont pleinement participé à la réussite humaine de ce projet.

RÉSUMÉ

Les réacteurs nucléaires de type Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor (VVER) représentent une part significative du parc nucléaire européen, environ 10%, concentrée dans les pays d'Europe de l'Est. Dans ce contexte, l'Agence d'Approvisionnement Euratom (ESA) identifie comme préoccupation majeure la dépendance totale envers un seul fournisseur russe. Cette situation a incité la communauté européenne à explorer des alternatives pour réduire cette vulnérabilité et accroître ses capacités en matière de simulation numérique. Répondant à cette nécessité, le projet Codes And Methods Improvements for VVER simulations (CAMIVVER), initié en 2020 et dirigé par Framatome, vise à créer une expertise interne et à favoriser l'émergence de solutions européennes.

Certaines des solutions adoptées par le projet CAMIVVER font appel à des codes propriétaires, non libres d'utilisation. C'est en particulier le cas du code neutronique de réseau, APOLLO3, propriété du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA). Ce point pourrait contraindre l'éventuelle exportation des schémas de calcul développés, hors du cercle des entités disposant d'un accès à APOLLO3. Conscient de cet enjeu, l'École Polytechnique de Montréal (EPM) lance en 2023 le projet POLYVVER, visant à évaluer dans quelle mesure les calculs de neutronique du projet CAMIVVER peuvent être réalisés avec son code de réseau déterministe et open-source : DRAGON5.

L'objectif central de cette étude est d'évaluer la capacité de DRAGON5 à réaliser des simulations d'assemblages de réacteurs VVER-1000. Pour y parvenir, une méthodologie rigoureuse a été adoptée, impliquant la validation systématique des calculs déterministes par le code stochastique Serpent2. Les premiers calculs ont été réalisés à l'échelle de la cellule. Cette étape préliminaire a permis de mener des travaux d'optimisation et de développer les outils de comparaison déterministe/stochastique tout en rationalisant le temps de calcul. Par la suite, deux schémas de calcul d'assemblage ont été élaborés : un schéma à un niveau, appelé 100%ALAMOS, et un schéma à deux niveaux, nommé REL2005. Ces schémas ont été encapsulés dans une couche Python3 pour créer un livrable facilement exécutable par l'utilisateur.

Les résultats issus de cette étude sont prometteurs. Ils démontrent une performance très satisfaisante pour les cellules et les assemblages constitués uniquement de combustible d'oxyde d'uranium (UOx). Cependant, les défis subsistent, notamment en ce qui concerne les cellules empoisonnées à l'oxyde de gadolinium (Gd_2O_3). Néanmoins, à l'échelle de l'assemblage, la présence en faible nombre de ces crayons empoisonnés au gadolinium, a permis l'obtention d'accords satisfaisants. Parmi les schémas de calcul d'assemblages, le schéma 100%ALAMOS est celui présentant à ce jour les meilleures performances. De plus, des tendances similaires sont observées entre les résultats des assemblages et des cellules, ce qui s'avère être une donnée précieuse pour orienter les travaux d'optimisation et les tests futurs, tout en réduisant les coûts de calcul.

En somme, cette étude démontre que DRAGON5 présente la capacité à simuler avec succès les assemblages de réacteurs VVER. Cependant, elle souligne également la nécessité d'approfondir les recherches pour affiner la précision des calculs avant d'envisager une étape d'industrialisation. Les pistes d'amélioration identifiées et détaillées dans ce rapport fournissent une feuille de route claire pour guider la suite du projet POLYVVER. Les résultats obtenus constituent une étape majeure dans la simulation déterministe d'assemblages VVER avec un code open-source et appellent à une comparaison approfondie avec le code de référence APOLLO3. Ils ouvrent également la voie à des calculs de cœur complet avec le code DONJON5, utilisant les bibliothèques de sections efficaces multi-paramétrées (MULTICOMPO) générées par DRAGON5.

ABSTRACT

The nuclear reactors of the Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor (VVER) type constitute a significant portion of the European nuclear fleet, around 10%, concentrated in Eastern European countries. In this context, the Euratom Supply Agency (ESA) considers the complete dependence on a single Russian supplier as a major concern. This situation has spurred the European community to explore alternatives to mitigate this vulnerability and enhance its capabilities in numerical simulation. In response to this need, the Codes And Methods Improvements for VVER simulations (CAMIVVER) project, initiated in 2020 and led by Framatome, aims to establish in-house expertise and foster the emergence of European solutions.

Certain approaches adopted by the CAMIVVER project involve the utilization of proprietary codes, which are not freely available for use. This notably applies to the network neutron code, APOLLO3, owned by the Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA). This aspect could impede the potential export of developed calculation schemes beyond entities granted access to APOLLO3. Mindful of this challenge, École Polytechnique de Montréal (EPM) launches the POLYVVER project in 2023, aiming to assess to what extent the neutron calculations required by the CAMIVVER project can be performed using its deterministic and open-source lattice code, DRAGON5.

The central objective of this study is to evaluate DRAGON5's capability to conduct simulations of VVER-1000 reactor assemblies. To achieve this, a rigorous methodology has been adopted, involving the systematic validation of deterministic calculations using the stochastic code Serpent2. Initial calculations were carried out at the cell level. This preliminary step was enabling optimization efforts and the development of deterministic/stochastic comparison tools, all while streamlining computation time. Subsequently, two assembly calculation schemes were devised : a single-level scheme named 100%ALAMOS, and a two-level scheme known as REL2005. These schemes were encapsulated within a Python3 layer to create a user-friendly executable deliverable.

The results of this study show promise, demonstrating highly satisfactory performance for cells and assemblies comprised solely of uranium oxide (UOx) fuel. However, challenges remain, particularly concerning cells poisoned with gadolinium oxide (Gd₂O₃). Nevertheless, at the assembly scale, the presence of a small number of gadolinium-poisoned rods allowed for acceptable agreements. Among the assembly calculation schemes, the 100%ALAMOS scheme has exhibited the best performance to date. Additionally, similar trends have been observed between assembly and cell results, providing valuable insights for guiding future optimization and testing efforts, all while reducing computational costs.

In conclusion, this study establishes DRAGON5's ability to successfully simulate VVER reactor assemblies. However, it also underscores the need for further research to refine the precision of calculations before contemplating industrialization. The identified and detailed improvement avenues within this report provide a clear roadmap to guide the progression of the POLYVVER project. The obtained results mark a significant milestone in deterministic VVER assembly simulation using an open-source code, prompting an in-depth comparison with the reference code APOLLO3. They also pave the way for full-core calculations using the DONJON5 code, based on the multi-parametric effective cross-section libraries (MULTICOMPO) generated by DRAGON5.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	i
RÉSUMÉ	ii
ABSTRACT	iii
TABLE DES MATIÈRES	iv
LISTE DES FIGURES	vii
LISTE DES TABLES	xi
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xiii
1 INTRODUCTION	1
1.1 Projet CAMIVVER	1
1.2 Problématique actuelle et apport de l'École Polytechnique de Montréal	1
1.3 Méthodologie	2
1.4 Résultats de l'étude	2
2 CHOIX DES ASSEMBLAGES	3
2.1 Introduction	3
2.2 Choix des assemblages	3
2.3 Choix des cellules	5
2.4 Caractéristiques géométriques	5
2.4.1 Description des cellules	5
2.4.2 Stiffeners	7
2.4.3 Composition des matériaux et conditions nominales	8
2.5 Conclusion	8
3 PARAMÉTRISATION DU CODE SERPENT2	9
3.1 Introduction : justification du travail d'optimisation	9
3.2 Choix et méthodes : optimisation des pas de burn-up	10
3.3 Convergence : pas de burn-up	12
3.3.1 Coefficient de multiplication effectif : k_{eff}	12
3.3.1.1 Première partie d'irradiation : de 0 à 12 GWj.t ⁻¹	12
3.3.1.2 Seconde partie d'irradiation : de 12 à 60 GWj.t ⁻¹	13
3.3.2 Concentrations isotopiques : [¹⁵⁷ Gd] et [²⁴¹ Pu]	14
3.3.2.1 Première partie d'irradiation : de 0 à 12 GWj.t ⁻¹	14
3.3.2.2 Seconde partie d'irradiation : de 12 à 60 GWj.t ⁻¹	14
3.3.3 Conclusion partielle : burn-up	15
3.4 Choix et méthodes : optimisation de la statistique	15
3.5 Convergence : la statistique neutronique totale	16
3.5.1 Coefficient de multiplication effectif : k_{eff}	16
3.5.2 Concentrations isotopiques : [¹⁵⁷ Gd] et [²⁴¹ Pu]	17
3.5.3 Conclusion partielle : statistique	18
3.6 Optimisation de la répartition du nombre de cycles et du nombre de neutrons par cycle	19
3.7 Paramètres finaux de l'étude	20
4 À L'ÉCHELLE DE LA CELLULE	21
4.1 Introduction	21
4.2 Schéma de calcul Serpent2	21
4.2.1 Géométries des cellules dans Serpent2	22
4.3 Schéma de calcul DRAGON5	22

4.3.1	Géométries des cellules dans DRAGON5	22
4.3.2	Chaînage des modules dans DRAGON5	23
4.4	Résultats initiaux	24
4.4.1	Analyse physique des résultats	24
4.4.2	Comparaison initiale des résultats DRAGON5 et Serpent2	27
4.4.2.1	Cellule UOx faiblement enrichie : 22AU_22UOx	28
4.4.2.2	Cellules UOx plus fortement enrichies	28
4.4.2.3	Cellules Gd : 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd	30
4.5	Optimisation DRAGON5	31
4.5.1	Démarche d'optimisation	32
4.5.2	Condition limite aux frontières : TISO ou TSPC	32
4.5.3	Pas de burn-up : <i>ListBU</i>	33
4.5.3.1	Cellules sans gadolinium	33
4.5.3.2	Cellules avec gadolinium	34
4.5.4	Isotopes autoprotégés	34
4.5.4.1	Cellules sans gadolinium	34
4.5.4.2	Cellules avec gadolinium	36
4.5.5	Pas d'autoprotection : <i>ListAUTOP</i>	37
4.5.6	Paramètres de tracking (<i>an2d</i> ; <i>densur</i>)	38
4.5.7	Méthode de résolution : P_{ij} ou MOC	40
4.5.8	Résultats de l'optimisation à l'échelle de la cellule	40
4.6	Résultats finaux	41
4.6.1	Cellules sans gadolinium	41
4.6.2	Cellules avec gadolinium	42
4.7	Conclusion	44
5	À L'ÉCHELLE DE L'ASSEMBLAGE	45
5.1	Introduction	45
5.2	Schéma de calcul Serpent2	45
5.3	Schémas de calcul DRAGON5	47
5.3.1	Schéma de calcul 100%ALAMOS	47
5.3.1.1	Géométries	47
5.3.1.2	Modules et chaînage	48
5.3.2	Schéma de calcul REL2005	48
5.3.2.1	Géométries	49
5.3.2.2	Modules et chaînage	51
5.3.3	Gestion de l'autoprotection	53
5.3.4	Paramètres des schémas de calcul d'assemblage	53
5.4	Grandeurs globales	54
5.4.1	Assemblages sans gadolinium	54
5.4.2	Assemblages avec gadolinium	55
5.5	Grandeurs locales	57
5.5.1	Assemblage 22AU	57
5.5.2	Assemblage 40AU	60
5.5.3	Assemblage 398GO	62
5.5.4	Assemblage 39AWU	65
5.6	Conclusion	68
6	LIVRABLE	70
6.1	Introduction	70
6.2	Fonctionnalités du livrable	70
6.2.1	Architecture logicielle	70
6.2.2	Capacités de simulation	71
6.2.3	Capacités annexes à la simulation	71

6.3	Architecture logicielle du livrable	71
6.4	Accès au livrable et installation	73
6.5	Conclusion	73
7	AVENIR DU PROJET	74
7.1	Introduction	74
7.2	Pistes d'amélioration	74
7.3	Perspectives d'évolution	76
8	CONCLUSION	77
8.1	Synthèse des travaux	77
8.1.1	À l'échelle de la cellule	77
8.1.2	À l'échelle de l'assemblage	78
8.2	Pistes d'amélioration et perspectives d'évolution	78
	RÉFÉRENCES	80

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Assemblage KML2 22AU.	4
Figure 2.2	Assemblage KML2 40AU.	4
Figure 2.3	Assemblage KML2 439GT.	4
Figure 2.4	Assemblage KML2 39AWU.	4
Figure 2.5	Légende utilisée pour les figures 2.6 à 2.8.	6
Figure 2.6	Géométrie d'une cellule combustible du réacteur KML2.	6
Figure 2.7	Géométrie d'un tube guide du réacteur KML2.	6
Figure 2.8	Géométrie du tube d'instrumentation central du réacteur KML2.	6
Figure 2.9	À gauche : cellule combustible avec le gap, utilisée pour la première étape de validation. À droite : cellule combustible sans gap, utilisée pour la seconde étape de validation.	6
Figure 2.10	Détail de la géométrie d'un stiffener du réacteur KML2.	7
Figure 2.11	Organisation géométrique des assemblages du cœur avec les stiffeners.	7
Figure 3.1	Écarts sur le k_{eff} entre les options de burn-up 1 à 3b et la référence de l'essai 1, de 0 à 12 GWj.t ⁻¹	13
Figure 3.2	Écarts sur le k_{eff} entre les options de burn-up 1b à 3 et la référence de l'option 4, de 12 à 60 GWj.t ⁻¹	13
Figure 3.3	Écarts sur [¹⁵⁷ Gd] entre les options de burn-up 1 à 3b et la référence de l'essai 1, de 0 à 12 GWj.t ⁻¹	14
Figure 3.4	Écarts sur [²⁴¹ Pu] entre les options de burn-up 1 à 3b et la référence de l'essai 1, de 0 à 12 GWj.t ⁻¹	14
Figure 3.5	Écarts sur [¹⁵⁷ Gd] entre les options de burn-up 1b à 3 et la référence de l'option 4, de 12 à 60 GWj.t ⁻¹	15
Figure 3.6	Écarts sur [²⁴¹ Pu] entre les options de burn-up 1b à 3 et la référence de l'option 4, de 12 à 60 GWj.t ⁻¹	15
Figure 3.7	Écarts sur le k_{eff} entre des statistiques de 100 000 et 2 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.	17
Figure 3.8	Écarts sur le k_{eff} entre des statistiques de 4 millions et 8 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.	17
Figure 3.9	Écarts sur [¹⁵⁷ Gd] entre des statistiques de 100 000 et 2 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.	17
Figure 3.10	Écarts sur [¹⁵⁷ Gd] entre des statistiques de 4 millions et 8 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.	17
Figure 3.11	Écarts sur [²⁴¹ Pu] entre des statistiques de 100 000 et 2 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.	18
Figure 3.12	Écarts sur [²⁴¹ Pu] entre des statistiques de 4 millions et 8 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.	18
Figure 4.1	Cellule UOx : trou central, combustible discrétisé en quatre couronnes et gaine.	22
Figure 4.2	Cellule Gd : trou central, combustible discrétisé en six couronnes et gaine.	22
Figure 4.3	Géométrie d'autoprotection pour les cellules sans gadolinium.	23
Figure 4.4	Géométrie de calcul de flux pour les cellules sans gadolinium.	23
Figure 4.5	Géométrie d'autoprotection pour les cellules avec gadolinium.	23
Figure 4.6	Géométrie de calcul de flux pour les cellules avec gadolinium.	23
Figure 4.7	Chaînage des modules du schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.	23
Figure 4.8	Évolution du k_{eff} D5 et S2. Irradiation de 439GT_44UOx : 0 à 60 GWj.t ⁻¹	25
Figure 4.9	Évolution du k_{eff} D5 et S2. Irradiation de 39AWU_33Gd : 0 à 60 GWj.t ⁻¹	25
Figure 4.10	Chaîne d'évolution des actinides.	25
Figure 4.11	Évolution de [²³⁵ U] avec D5 et S2. Irradiation cellule 39AWU_33Gd : 0 à 60 GWj.t ⁻¹	25
Figure 4.12	Évolution de [²⁴¹ Pu] avec D5 et S2. Irradiation cellule 39AWU_33Gd : 0 à 60 GWj.t ⁻¹	25

Figure 4.13	Évolution de $[^{135}\text{Xe}]$ calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t ⁻¹	26
Figure 4.14	Évolution de $[^{149}\text{Sm}]$ calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t ⁻¹	26
Figure 4.15	Évolution de $[^{157}\text{Gd}]$ calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 439GT_44UOx de 0 à 60 GWj.t ⁻¹	27
Figure 4.16	Évolution de $[^{157}\text{Gd}]$ calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t ⁻¹	27
Figure 4.17	Évolution de $[^{155}\text{Gd}]$ calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t ⁻¹	27
Figure 4.18	Sections efficaces microscopiques totales : vecteur isotopique du gadolinium.	27
Figure 4.19	k_{eff} : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour la cellule 22AU_22UOx.	28
Figure 4.20	$[^{235}\text{U}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour la cellule 22AU_22UOx.	28
Figure 4.21	k_{eff} : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.	29
Figure 4.22	$[^{235}\text{U}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.	29
Figure 4.23	$[^{239}\text{Pu}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.	29
Figure 4.24	$[^{155}\text{Gd}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.	29
Figure 4.25	k_{eff} : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.	30
Figure 4.26	$[^{235}\text{U}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.	30
Figure 4.27	$[^{241}\text{Pu}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.	31
Figure 4.28	$[^{157}\text{Gd}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.	31
Figure 4.29	Influence de la condition limite aux frontières sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 40AU_40UOx.	32
Figure 4.30	Influence de la condition limite aux frontières sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 40AU_40UOx.	32
Figure 4.31	Représentation visuelle du raffinement des <i>ListBU</i>	33
Figure 4.32	Influence du raffinement de <i>ListBU</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 22AU_22UOx.	34
Figure 4.33	Influence du raffinement de <i>ListBU</i> sur l'écart D5-S2 de $[^{155}\text{Gd}]$ pour la cellule 22AU_22UOx.	34
Figure 4.34	Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 40AU_40UOx.	35
Figure 4.35	Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 40AU_40UOx.	35
Figure 4.36	Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 de k_{eff} pour la cellule 39AWU_33Gd.	37
Figure 4.37	Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 de $[^{157}\text{Gd}]$ pour la cellule 39AWU_33Gd.	37
Figure 4.38	Influence de la dégradation de <i>ListAUTOP</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 39AWU_33Gd.	38
Figure 4.39	Influence de la dégradation de <i>ListAUTOP</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 39AWU_33Gd.	38
Figure 4.40	Influence de la dégradation de <i>ListAUTOP</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 39AWU_40UOx.	38
Figure 4.41	Influence de la dégradation de <i>ListAUTOP</i> sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx.	38

Figure 4.42	Influence du raffinement de <i>densur</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx, <i>an2d</i> =12.	39
Figure 4.43	Influence du raffinement de <i>densur</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx, <i>an2d</i> =18.	39
Figure 4.44	Influence du raffinement de <i>densur</i> sur l'écart D5-S2 de $[^{135}\text{Xe}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx, <i>an2d</i> =12.	39
Figure 4.45	Influence du raffinement de <i>densur</i> sur l'écart D5-S2 de $[^{155}\text{Gd}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx, <i>an2d</i> =18.	39
Figure 4.46	Influence du raffinement de <i>densur</i> sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx, <i>an2d</i> =12 et 18.	40
Figure 4.47	Influence du raffinement de <i>densur</i> sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx, <i>an2d</i> =12 et 18.	40
Figure 4.48	Influence du type de la méthode de résolution sur l'écart D5-S2 sur le k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx.	40
Figure 4.49	Influence de la méthode de résolution sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx.	40
Figure 4.50	k_{eff} : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules UOx.	41
Figure 4.51	$[^{235}\text{U}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules UOx.	41
Figure 4.52	$[^{239}\text{Pu}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules UOx.	42
Figure 4.53	$[^{155}\text{Gd}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules UOx.	42
Figure 4.54	k_{eff} : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules Gd.	43
Figure 4.55	$[^{235}\text{U}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules Gd.	43
Figure 4.56	$[^{241}\text{Pu}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules Gd.	43
Figure 4.57	$[^{157}\text{Gd}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ pour les cellules Gd.	43
Figure 5.1	Géométrie d'assemblage Serpent2 : KML2_22AU.	46
Figure 5.2	Géométrie d'assemblage Serpent2 : KML2_39AWU.	46
Figure 5.3	Représentation des stiffeners à l'intersection de trois assemblages en géométrie Serpent2.	46
Figure 5.4	Géométrie ALAMOS SSH des assemblages 22AU et 40AU.	48
Figure 5.5	Géométrie ALAMOS SSH de l'assemblage 398GO.	48
Figure 5.6	Géométrie ALAMOS SSH de l'assemblage 39AWU.	48
Figure 5.7	Chaînage des modules du schéma de calcul 100%ALAMOS.	49
Figure 5.8	Géométrie native de calcul d'autoprotection du schéma REL2005. Assemblage 22AU.	50
Figure 5.9	Géométrie native de calcul de flux du premier niveau du schéma REL2005. Assemblage 22AU.	50
Figure 5.10	Familles de cellules physiques des géométries natives du schéma REL2005. Assemblage 22AU.	50
Figure 5.11	Géométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau du schéma REL2005. Assemblage 22AU.	50
Figure 5.12	Familles de cellules physiques des géométries natives du schéma REL2005. Assemblage 398GO.	51
Figure 5.13	Geométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau du schéma REL2005. Assemblage 398GO.	51
Figure 5.14	Familles de cellules physiques des géométries natives du schéma REL2005. Assemblage 39AWU.	51
Figure 5.15	Geométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau du schéma REL2005. Assemblage 39AWU.	51
Figure 5.16	Chaînage des modules du schéma de calcul REL2005.	52
Figure 5.17	Principe de fonctionnement des procédures CLE-2000 mixHOM.c2m et mixLIBEQ.c2m dans le schéma REL2005.	53
Figure 5.18	Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	54

Figure 5.19	Évolution de $[^{235}\text{U}]$ de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	54
Figure 5.20	Évolution de $[^{239}\text{Pu}]$ de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	55
Figure 5.21	Évolution de $[^{135}\text{Xe}]$ de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	55
Figure 5.22	Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	56
Figure 5.23	Évolution de $[^{235}\text{U}]$ de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	56
Figure 5.24	Évolution de $[^{239}\text{Pu}]$ de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	56
Figure 5.25	Évolution de $[^{157}\text{Gd}]$ de 0 à 60 GWj.t ⁻¹ , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.	56
Figure 5.26	22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	58
Figure 5.27	22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	58
Figure 5.28	22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	58
Figure 5.29	22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	58
Figure 5.30	22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	59
Figure 5.31	22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	59
Figure 5.32	22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	59
Figure 5.33	22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	59
Figure 5.34	40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	60
Figure 5.35	40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	60
Figure 5.36	40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	61
Figure 5.37	40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	61
Figure 5.38	40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	61
Figure 5.39	40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	61
Figure 5.40	40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	62
Figure 5.41	40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	62
Figure 5.42	398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	63
Figure 5.43	398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	63
Figure 5.44	398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	63
Figure 5.45	398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	63
Figure 5.46	398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	64
Figure 5.47	398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	64
Figure 5.48	398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	64
Figure 5.49	398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	64
Figure 5.50	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	66
Figure 5.51	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	66
Figure 5.52	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	66
Figure 5.53	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	66
Figure 5.54	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	67
Figure 5.55	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.	67
Figure 5.56	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	67
Figure 5.57	39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.	67
Figure 6.1	Principe d'encapsulation des schémas de calcul Dragon 5.	71
Figure 6.2	Architecture logicielle détaillée du livrable.	72
Figure 6.3	Emplacement de l'archive dans l'arborescence de la Version 5 et éléments constitutifs de l'archive.	73
Figure 7.1	Diagramme de flux des modules de NJOY. [24]	74

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Caractéristiques des assemblages de référence.	4
Tableau 2.2	Caractéristiques des cellules de référence.	5
Tableau 2.3	Données géométriques pour la description des assemblages de référence de KML2.	5
Tableau 2.4	Données de géométrie et de composition des cellules combustibles de référence.	7
Tableau 2.5	Données de géométrie et de composition des tubes guides et du tube d'instrumentation central.	7
Tableau 3.1	Caractéristiques des serveurs de recherche de l'EPM	9
Tableau 3.2	Temps de calcul d'évolution Serpent2 à l'échelle de la cellule et de l'assemblage : 0 à 60 GWj.t ⁻¹	10
Tableau 3.3	Caractéristiques des travaux de référence de comparaison D5-S2 ou D5-stochastique [9], [23], [16], [15].	11
Tableau 3.4	Essais de raffinement de burn-up et temps de calcul associés.	11
Tableau 3.5	Raffinement du burn-up : modifications apportées entre les différentes listes.	12
Tableau 3.6	Caractéristiques des travaux de référence [9], [23], [16] et [15] et préconisations Serpent2.	15
Tableau 3.7	Essais de statistique neutronique et temps de calcul associés.	16
Tableau 3.8	Écarts sur les valeurs k_{eff} , [²⁴¹ Pu] et [¹⁵⁷ Gd] en fonction de la statistique utilisée.	18
Tableau 3.9	Essais de répartition d'une statistique de 8 millions de neutrons et temps de calculs associés.	19
Tableau 3.10	Écarts sur les valeurs k_{eff} , [²⁴¹ Pu] et [¹⁵⁷ Gd] en fonction de la répartition d'une statistique de 8 millions de neutrons.	19
Tableau 3.11	Discretisation en burn-up (GWj.t ⁻¹) utilisée pour les benchmarks UO ₂	20
Tableau 3.12	Discretisation en burn-up (GWj.t ⁻¹) utilisée pour les benchmarks UO ₂ + Gd ₂ O ₃	20
Tableau 4.1	Spécifications code Serpent2 : calculs à l'échelle de la cellule.	21
Tableau 4.2	Paramètres initiaux pour le schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.	24
Tableau 4.3	Écarts initiaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour la cellule 22AU_22UOx.	28
Tableau 4.4	Écarts initiaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.	30
Tableau 4.5	Écarts initiaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.	31
Tableau 4.6	Discretisation en burn-up (GWj.t ⁻¹) avec DRAGON5, utilisée pour les cellules sans gadolinium. Les pas de burn-up en orange sont ajoutés à la liste UOx pour former la liste UOx2. Les pas de burn-up en vert sont ajoutés à la liste UOx2 pour former la liste UOx4.	34
Tableau 4.7	Détail des options d'autoprotection pour une cellule sans gadolinium.	35
Tableau 4.8	Détail des options d'autoprotection pour une cellule avec gadolinium.	36
Tableau 4.9	Détail des <i>ListAUTOP</i>	37
Tableau 4.10	<i>ListAUTOP</i> retenues pour les calculs DRAGON5.	38
Tableau 4.11	Paramètres optimaux pour le schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.	41
Tableau 4.12	Écarts finaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules UOx.	42
Tableau 4.13	Écarts finaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules Gd.	44
Tableau 4.14	Validation des critères sur le k_{eff} et les N_i pour les sept cellules modélisées, avant et après l'optimisation effectuée sur le schéma de calcul D5.	44
Tableau 5.1	Cellules génératrices en fonction du type d'assemblage.	45
Tableau 5.2	Paramètres optimaux pour les schémas de calcul DRAGON5 à l'échelle de l'assemblage.	54
Tableau 5.3	Écarts finaux observés sur le k_{eff} et les N_i , entre D5 et S2, pour les assemblages sans gadolinium.	55
Tableau 5.4	Écarts finaux observés sur le k_{eff} et les N_i , entre D5 et S2, pour les assemblages avec gadolinium.	57

Tableau 5.5	Assemblage 22AU : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU_{0_60}}$ et les $\tau_{c,1,BU_{0_60}}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.	60
Tableau 5.6	Assemblage 40AU : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU_{0_60}}$ et les $\tau_{c,1,BU_{0_60}}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.	62
Tableau 5.7	Assemblage 398GO : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU_{0_60}}$ et les $\tau_{c,1,BU_{0_60}}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.	65
Tableau 5.8	Assemblage 39AWU : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU_{0_60}}$ et les $\tau_{c,1,BU_{0_60}}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.	68
Tableau 5.9	Synthèse des grandeurs globales pour les calculs d’assemblage.	68
Tableau 5.10	Synthèse des grandeurs locales pour les calculs d’assemblage.	69
Tableau 6.1	Fonctionnalités du livrable liées à l’architecture logicielle.	70
Tableau 6.2	Fonctionnalités du livrable liées aux capacités de simulation.	71
Tableau 6.3	Fonctionnalités du livrable liées aux capacités annexes à la simulation.	72
Tableau 7.1	Pistes d’amélioration du schéma de calcul Serpent2.	74
Tableau 7.2	Pistes d’amélioration des schémas de calcul DRAGON5.	75
Tableau 7.3	Pistes d’amélioration de l’expérience utilisateur du livrable.	76
Tableau 7.4	Perspectives d’évolution du projet.	76

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ALAMOS	: interface utilisateur graphique du CEA pour la construction des géométries et des maillages pour les calculs de transport à usage général
an2d	: Paramètre de quadrature angulaire du module de tracking
$[\frac{A}{Z}X]$: Concentration atomique de l'isotope $\frac{A}{Z}X$
BU	: Burn-up
BU0	: Burn-up initial : 0 GWj.t ⁻¹
BU _n	: Burn-up n : n GWj.t ⁻¹
CAMIVVER	: Codes And Methods Improvements for VVER
CEA	: Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives
CFD	: Computational Fluid Dynamics
D5	: DRAGON5
D5-S2	: DRAGON5 - Serpent2
densur	: Densité de lignes d'intégration du module de tracking
EAMEA	: École des Applications Militaires de l'Énergie Atomique
EPM	: École Polytechnique de Montréal
Gd	: Gadolinium
ListAUTOP	: Liste des pas de burn-up auxquels le calcul d'autoprotection est réalisé
ListBU	: Liste des pas de burn-up auxquels le calcul de flux est réalisé
KML2	: Khmelnitsky-2
k_{∞}	: Coefficient de multiplication infini
k_{eff}	: Coefficient de multiplication effectif
MC	: Monte-Carlo
MOC	: Method Of Characteristics
MULTICOMPO	: Bibliothèque de sections efficaces multi-paramétrée native de DRAGON5
N_i	: Concentrations isotopiques
Open-source	: Libre de droits
P_{ij}	: Méthode des probabilités de première interaction
pcm	: Pour cent mille (1.0×10^{-5})
REP	: Réacteur à Eau sous Pression
REL2005	: Schéma de calcul déterministe MOC à deux niveaux du CEA
S2	: Serpent2
SERMA	: Service d'Étude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées
SSH	: Self-shielding
Stiffener	: Plaque de maintien verticale d'assemblage de VVER
TG	: Tubes Guides

T_{mod} : Température du modérateur
TI : Tube d'Instrumentation
UOx : Oxyde d'Uranium
VVER : Vodo-Vodyanoi Energetichesky Reaktor

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

C'est après l'invasion de l'Ukraine par la Russie en février 2022, que la question de la dépendance de l'Europe à l'industrie nucléaire russe, existante depuis de nombreuses années, s'est rappelée à l'Europe. En 2023, huit pays d'Europe, dont cinq pays de l'Union, sont équipés, pour tout ou partie de leur parc, de réacteurs VVER. Plus de quarante réacteurs russes devraient fonctionner en Europe en 2026, dont la plus puissante centrale européenne, Zaporijia en Ukraine. Les importations de combustible et de technologies nucléaires russes dans l'Union européenne ont continué d'augmenter en 2022, malgré le conflit ukrainien. Géant mondial et leader incontesté dans l'exportation de centrales nucléaires dans le monde, Rosatom fournit du combustible à ces centrales d'Europe, des services de maintenance mais aussi de l'uranium naturel et enrichi, pour lequel il revendique plus de 30% de parts de marché en Europe. Le plan REPowerEU mentionne la nécessité de diversifier les sources d'approvisionnement dans l'industrie nucléaire auprès de pays alliés, mais compte tenu de l'ampleur des intérêts des États membres, et en particulier de ceux de la Hongrie, qui a confié la construction de l'extension de sa centrale nucléaire de Paks à Rosatom, les Européens ont renoncé à sanctionner le nucléaire russe. Les initiatives restent donc à la discrétion des États membres. Dès le début du conflit, la Finlande a mis fin à son contrat avec Rosatom pour la construction de la centrale de Hanhikivi I. Fin décembre 2022, la Bulgarie officialise sa contractualisation avec l'américain Westinghouse pour l'approvisionnement partiel en combustible de son unique centrale, Kozlodouy. Un autre contrat est attendu avec le français Framatome pour approvisionner le deuxième réacteur du site.

1.1 Projet CAMIVVER

C'est dans ce contexte que naît le projet CAMIVVER. Ce dernier, financé par la Commission européenne, est lancé dans le cadre du programme de recherche Horizon 2020. Le projet a débuté le 1^{er} septembre 2020 pour une durée de trois ans. Le budget total est de 3 988 547 €. Le projet est coordonné par Framatome en France. Le consortium du projet est composé de sept partenaires de cinq pays impliquant l'industrie, les organismes de recherche et les universités. Ces partenaires ont une forte culture de la sécurité nucléaire, une grande expérience de la conception et de l'exploitation des réacteurs de génération II et III, de l'analyse de la sécurité des réacteurs VVER et du développement et de la validation de codes et de méthodes de simulation numérique. Le parc nucléaire européen est composé de réacteurs de génération II et III. Ce parc fait actuellement l'objet de mises à niveau dans le cadre de l'exploitation à long terme (LTO), ce qui reste une préoccupation importante pour la Communauté européenne. La part des réacteurs VVER est d'environ 10% et constitue donc un élément non négligeable du parc européen. Plusieurs unités de réacteurs VVER sont prévues pour la construction au sein de l'UE et dans les pays voisins, dans un contexte où la durée de vie opérationnelle du VVER peut être prolongée jusqu'à 60 ans. De ce fait, et afin de soutenir le développement et la qualification du combustible et, plus généralement, de fournir les éléments requis pour le rapport d'analyse de sûreté (SAR), une place importante est réservée au développement, à l'amélioration, à la vérification et à la validation des codes et des méthodes utilisés dans l'analyse de sûreté du VVER. La mise à jour continue des codes et méthodes nécessaires pour répondre aux exigences réglementaires pour les réacteurs LTO est la base de la proposition du projet CAMIVVER. Ce projet encourage l'utilisation de méthodologies déterministes multidisciplinaires pour décrire l'interaction entre la thermohydraulique et la neutronique, et la validation par rapport à des calculs de haute-fidélité tels que Monte Carlo et la CFD.

1.2 Problématique actuelle et apport de l'École Polytechnique de Montréal

Une évolution possible pour le projet CAMIVVER serait de permettre aux pays possédant des réacteurs VVER de disposer davantage d'autonomie dans l'analyse de la sûreté et l'exploitation de leurs réacteurs. Pour cela, il est nécessaire que ces pays acquièrent des licences pour les codes de calcul, notamment en neutronique. Le code neutronique de réseau APOLLO3 étant un code propriétaire, non libre d'utilisation, son exportation hors du cercle des entités disposant d'un accès à ce dernier semble inenvisageable.

Le projet de l'École Polytechnique de Montréal est intéressant dans ce contexte, car il propose une solution alternative open-source de schémas de calcul d'assemblage de réacteur VVER, basée sur le code déterministe DRAGON5 et validée par le code Monte-Carlo Serpent2. L'objectif central du projet est d'évaluer la capacité de DRAGON5 à réaliser des simulations d'assemblages de réacteurs VVER-1000.

Le code stochastique Serpent2, utilisé afin de valider les schémas de calcul DRAGON5 est un code tridimensionnel de transport de neutrons et de photons, continu en énergie, développé au Centre de recherche technique VTT de Finlande depuis 2015. Le code déterministe DRAGON5 est un code de transport open-source développé et maintenu par l'École Polytechnique de Montréal depuis 2014.

1.3 Méthodologie

La validation des schémas de calcul DRAGON5 est réalisée sur des cellules seules et des assemblages complets de combustible. Sept cellules utilisées dans les différents assemblages du projet CAMIVVER ont été évaluées à l'aide d'un schéma à un niveau. Ces calculs ont été réalisés à l'aide des méthodes MOC et P_{ij} . Quatre assemblages, dont trois présents dans le projet CAMIVVER ont été simulés, à l'aide de schémas à un et deux niveaux. La méthode MOC a été utilisée pour les calculs d'assemblage.

Les 11 cas d'essai ont été implémentés dans le code Serpent2 et évalués, afin de servir de référence au code déterministe DRAGON5. Tant à l'échelle de la cellule qu'à l'échelle de l'assemblage, des travaux d'optimisation des schémas de calcul ont été réalisés tout au long du projet, afin de faire converger les résultats des deux codes de neutronique. La finalité du projet réside en la création d'un livrable Python, fournissant aux exploitants un outil numérique de schémas de calcul d'assemblage par le code déterministe DRAGON5.

1.4 Résultats de l'étude

Ce rapport présente uniquement les résultats permettant d'illustrer au mieux ses propos et ses conclusions. Toutefois, l'ensemble des résultats obtenus et des figures tracées au cours du projet sont accessibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

CHAPITRE 2 CHOIX DES ASSEMBLAGES

2.1 Introduction

Ce chapitre présente en détail l'approche adoptée pour la sélection des assemblages et des cellules afin de valider les calculs de DRAGON5. Comme mentionné précédemment dans la section 1.3, le processus de validation comporte deux étapes : une première à l'échelle de la cellule combustible et une deuxième à l'échelle de l'assemblage. Dans un souci de cohérence, les cellules de référence utilisées lors de la première étape proviennent des assemblages sélectionnés pour la seconde étape.

2.2 Choix des assemblages

Il est judicieux de sélectionner des assemblages du projet CAMIVVER [5] pour la validation des calculs DRAGON5, pour les raisons suivantes :

- les géométries et les compositions de ces assemblages sont soigneusement détaillées et leur maillage est disponible via la plateforme SALOME ;
- des calculs neutroniques ont déjà été réalisés sur ces assemblages, ce qui permet d'accéder à leurs résultats pour référence ;
- ces assemblages, actuellement chargés dans les réacteurs VVER-1000 des exploitants d'Europe de l'Est, sont considérés comme des assemblages réels ;
- des données physiques ont été recueillies suite à l'irradiation de ce type d'assemblages en réacteur, ce qui en fait d'excellentes références de benchmark.

Dans cette optique, nous avons choisi d'étudier les assemblages du réacteur KML2 (Khmelnitski-2), qui est le deuxième réacteur de la centrale nucléaire de Khmelnitski, située à Netichyn, dans l'oblast de Khmelnitski, en Ukraine. Les assemblages de KML2 peuvent être composés :

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

La sélection des assemblages de référence doit permettre de couvrir les différents cas rencontrés en réacteur, tels que décrits ci-dessus. Les assemblages de référence choisis pour la validation des calculs DRAGON5 sont les suivants : 22AU, 398GO, 398AWU, auxquels s'ajoute un quatrième assemblage, le 40AU, pour des raisons explicitées ultérieurement. Le 40AU est similaire au 22AU, à l'exception de l'enrichissement de son combustible, qui est de 4.0%.

Le 22AU et le 40AU sont des assemblages sans gadolinium, composés de cellules UOx avec un seul enrichissement, respectivement de 2.2% et 4.0%. Le 398GO est un assemblage comportant des cellules avec gadolinium et des cellules UOx avec un seul enrichissement de 4.0%. Enfin, le 39AWU est un assemblage comportant des cellules empoisonnées au gadolinium et des cellules UOx avec deux enrichissements différents, de 4.0% et 3.6%.

Les caractéristiques des assemblages de référence sont détaillées dans le tableau 2.1 et les assemblages sont illustrés dans les figures 2.1 à 2.4 ci-dessous, lesquelles sont extraites et adaptées du rapport CAMIVVER [5].

Assemblage	Cellules UO_2		Cellules $\text{UO}_2 + \text{Gd}_2\text{O}_3$		
	Nombre	Enrichissement en ^{235}U	Nombre	Enrichissement en ^{235}U	w% en Gd_2O_3
22AU	312	2.2%	0	0	0
40AU	312	4.0%	0	0	0
398GO	306	4.0%	6	3.3%	5.0%
39AWU	243	4.0%	9	3.3%	5.0%
	60	3.6%			

TABLE 2.1 – Caractéristiques des assemblages de référence.

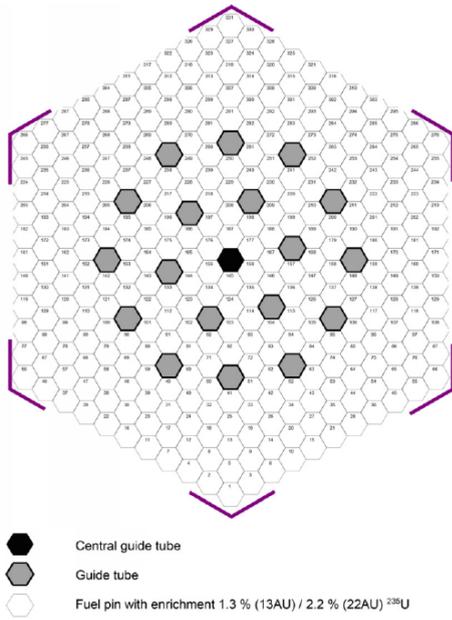


FIGURE 2.1 – Assemblage KML2 22AU. [5]

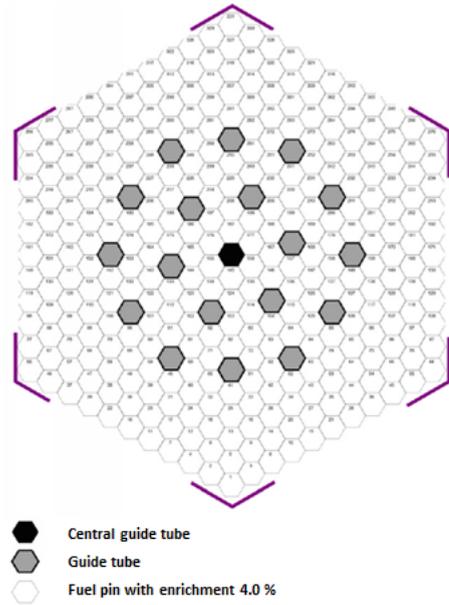


FIGURE 2.2 – Assemblage KML2 40AU. [5]

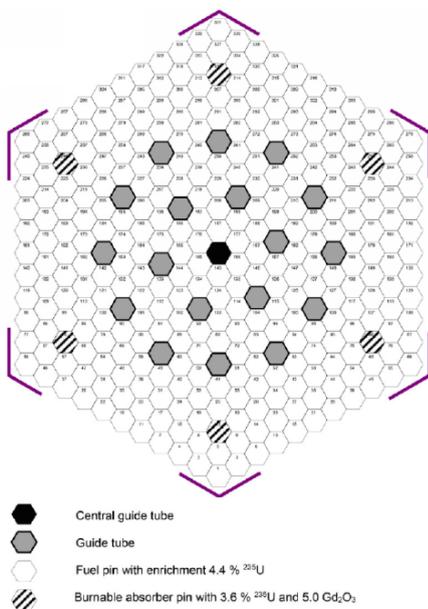


FIGURE 2.3 – Assemblage KML2 439GT. [5]

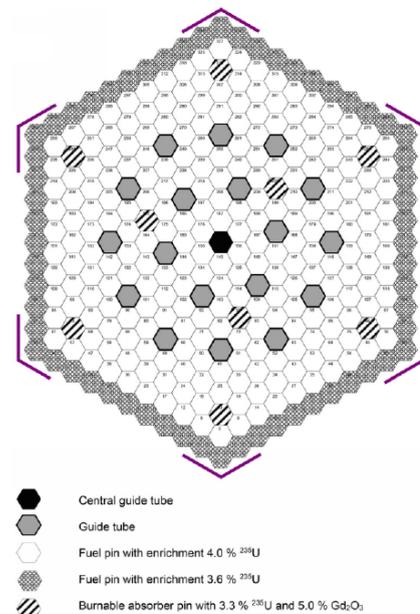


FIGURE 2.4 – Assemblage KML2 39AWU. [5]

D'un point de vue neutronique, les assemblages 22AU et 40AU se distinguent par leur homogénéité et leur simplicité, tandis que l'assemblage 39AWU présente la plus grande hétérogénéité et complexité. L'assemblage 398GO se situe quant à lui à un niveau de complexité intermédiaire. Il est donc prévu que la difficulté à modéliser ces assemblages avec le code DRAGON5 suive cette tendance.

2.3 Choix des cellules

Comme évoqué ci-dessus, les cellules utilisées pour la première étape de validation des calculs DRAGON5 sont les cellules issues des assemblages de référence, exception faite des cellules 439GT_44UOx et 439GT_36Gd. Il était initialement envisagé de simuler l'assemblage empoisonné au gadolinium 439GT. Pour des raisons d'impossibilité de lecture de ses jeux de données ALAMOS, cet assemblage a été abandonné. Il a été remplacé par le 398GO. Les calculs à l'échelle de la cellule ayant déjà été réalisés sur celles issues du 439GT et ayant permis de tirer de multiples conclusions, il a été décidé de les intégrer au rapport.

Les cellules de référence et leurs caractéristiques sont détaillées dans le tableau 2.2 ci-dessous.

Nom de cellule	Assemblage de provenance	Enrichissement en ^{235}U	$w\%$ en Gd_2O_3
22AU_22UOx	22AU	2.2%	0
40AU_40UOx	40AU	4.0%	0
439GT_44UOx	439GT	4.4%	0
439GT_36Gd		3.6%	5.0%
39AWU_40UOx (iso 398GO_40UOx)	39AWU	4.0%	0
39AWU_36UOx		3.6%	0
39AWU_33Gd (iso 398GO_33Gd)		3.3%	5.0%

TABLE 2.2 – Caractéristiques des cellules de référence.

Les deux cellules du 398GO (398GO_40UOx et 398GO_33Gd) sont identiques à celles du 39AWU, elles sont donc simulées une seule fois sous le nom de 39AWU_40UOx et 39AWU_33Gd. Parmi les sept cellules de référence, deux sont des cellules avec du gadolinium, la 439GT_36Gd et la 39AWU_33Gd.

2.4 Caractéristiques géométriques

Les données géométriques pour la description des assemblages KML2 en réseau 2D sont détaillées dans le tableau 2.3 ci-dessous.

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

TABLE 2.3 – Données géométriques pour la description des assemblages de référence de KML2.

2.4.1 Description des cellules

Le détail des géométries et des matériaux de composition des cellules est fourni dans les tableaux 2.4 et 2.5 ci-dessous. Les cellules sont illustrées dans les figures 2.6 à 2.8. Dans le cadre de ce projet, l'insertion des absorbants n'est pas prise en compte, les tubes guides sont pleins en eau.

Le rayon externe de la gaine du tube d'instrumentation central ($R_{ext,i} = 6.500$ mm) est supérieur à la distance entre le centre et le côté de l'hexagone ($R = 6.374$ mm) du motif élémentaire d'une cellule. Cette particularité géométrique n'est pas simulable avec DRAGON5. Il a donc été choisi de modifier les valeurs de rayon interne et externe du tube d'instrumentation central. Le rayon externe est égal à la distance entre le centre et le côté de l'hexagone ($R_{ext,i} = R = 6.374$ mm) et le rayon interne est ajusté de manière à conserver le rapport de modération ($R_{int,i} = 5.350$ mm).

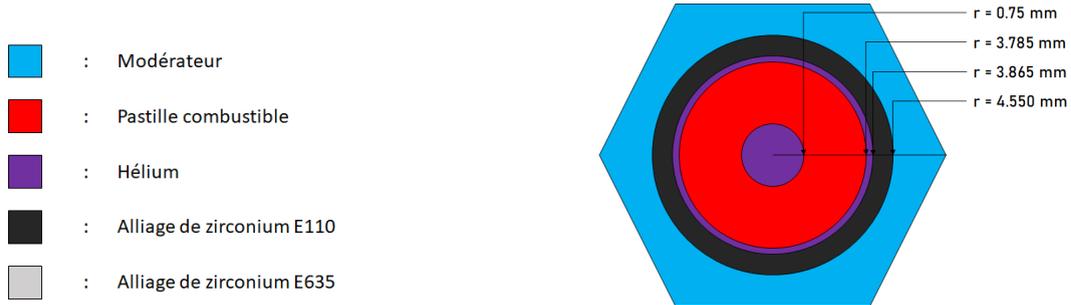


FIGURE 2.5 – Légende utilisée pour les figures 2.6 à 2.8.

FIGURE 2.6 – Géométrie d'une cellule combustible du réacteur KML2.

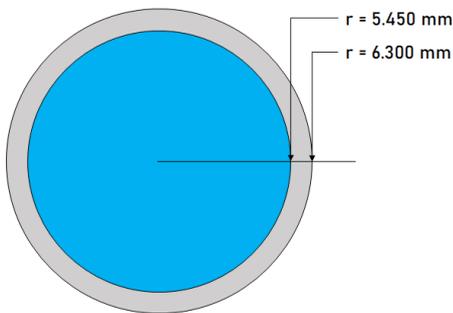


FIGURE 2.7 – Géométrie d'un tube guide du réacteur KML2.

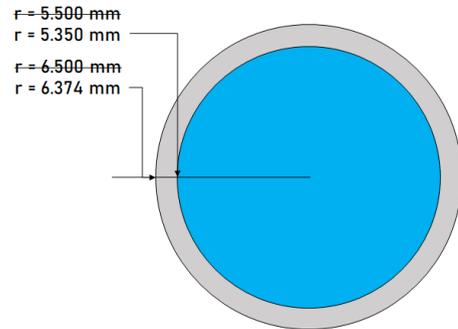


FIGURE 2.8 – Géométrie du tube d'instrumentation central du réacteur KML2.

Dans le cadre de la première étape de validation des calculs de DRAGON5, à l'échelle de la cellule, le gap entre la pastille combustible et la gaine est modélisé. Il ne l'est plus à l'échelle de l'assemblage afin de diminuer le temps de calcul. Le gap est comblé en égalisant le rayon interne de la gaine avec le rayon externe de la pastille combustible qui est fixé. La densité du matériau constituant la gaine est abaissée pour conserver la masse. Le processus est illustré en figure 2.9.

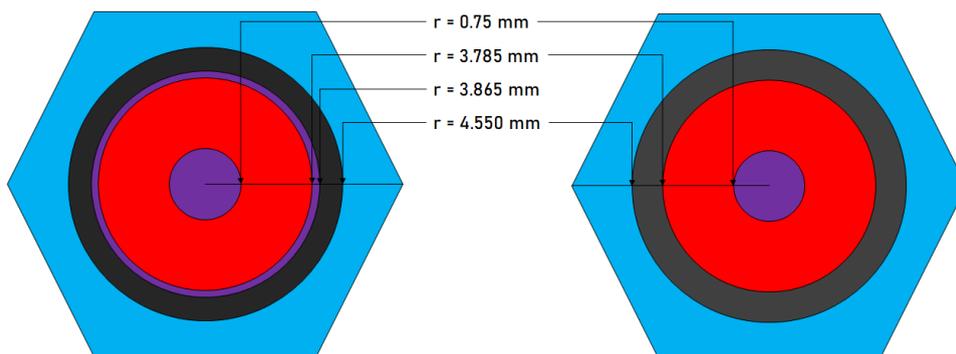


FIGURE 2.9 – À gauche : cellule combustible avec le gap, utilisée pour la première étape de validation. À droite : cellule combustible sans gap, utilisée pour la seconde étape de validation.

Pas du réseau (cm)	1.275
Rayon pastille combustible (mm)	3.785
Matériau pastille combustible	UO ₂ ou UO ₂ + Gd ₂ O ₃
Rayon trou central (mm)	0.750
Matériau trou central	Hélium
Rayon interne gaine (mm)	3.865
Rayon externe gaine (mm)	4.550
Matériau gaine	Alliage de zirconium E110
Matériau gap	Hélium

TABLE 2.4 – Données de géométrie et de composition des cellules combustibles de référence.

	Tube guide	Tube d'instrumentation central
Rayon interne gaine (mm)	5.450	5.500 5.350
Rayon externe gaine (mm)	6.300	6.500 6.374
Matériau gaine	Alliage zirconium E635	Alliage zirconium E635

TABLE 2.5 – Données de géométrie et de composition des tubes guides et du tube d'instrumentation central.

2.4.2 Stiffeners

L'une des particularités des assemblages KML2 réside dans l'inclusion de plaques latérales de renfort, également appelées *stiffeners* en anglais. Ces plaques, fabriquées en alliage de zirconium E635, sont présentes à chaque angle formé par l'assemblage, ce qui donne un total de six plaques par assemblage. Les détails géométriques de ces plaques sont fournis dans les figures 2.10 et 2.11.

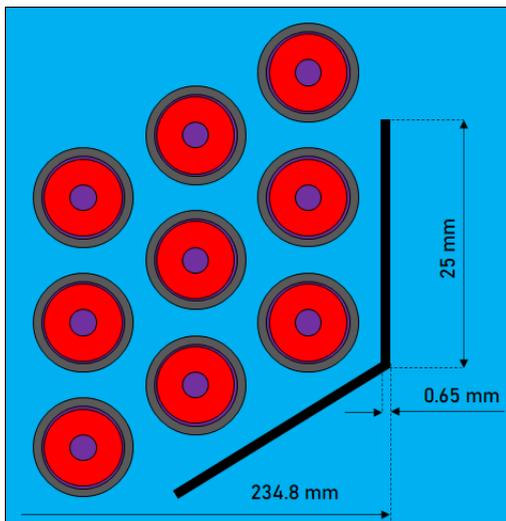


FIGURE 2.10 – Détail de la géométrie d'un stiffener du réacteur KML2.

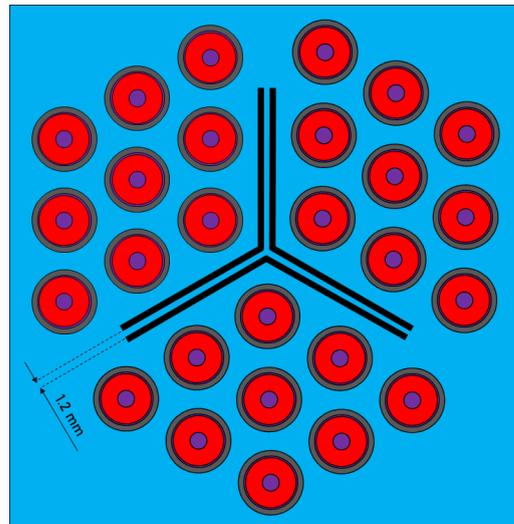


FIGURE 2.11 – Organisation géométrique des assemblages du cœur avec les stiffeners.

Dans les schémas de calcul DRAGON5, leur modélisation est finement prise en compte grâce à l'utilisation des maillages ALAMOS. Ce point est détaillé plus loin dans le rapport en section 5.3. Dans les schémas de calcul Serpent2, elle est intégrée de manière native.

2.4.3 Composition des matériaux et conditions nominales

Les compositions des matériaux, combustible ou de structure, ainsi que les conditions nominales de fonctionnement du réacteur ne sont pas détaillées dans ce rapport. Elles sont disponibles dans le rapport CAMIVVER [5].

2.5 Conclusion

Dans l'ensemble, cette description claire du processus de sélection des assemblages et des cellules de référence, ainsi que l'explication des raisons justifiant ces choix, garantissent une approche solide pour la validation des calculs DRAGON5.

CHAPITRE 3 PARAMÉTRISATION DU CODE SERPENT2

3.1 Introduction : justification du travail d’optimisation

L’excellente précision apportée par les codes de calculs stochastiques, Serpent2 dans le cadre de cette étude, nécessite des temps de simulation conséquents. Les deux contraintes majeures imposées par le projet sont les suivantes :

- durée définie : 6 mois ;
- efficacité limitée des serveurs de l’École Polytechnique de Montréal.

Les caractéristiques des serveurs de l’EPM sont résumé dans le tableau 3.1 ci-après.

Caractéristiques : Système		
	Boltzmann	Doppler
Nom	boltzmann.recherche.polymtl.ca	doppler.recherche.polymtl.ca
Système d’exploitation	Linux	
Version	3.10.0-1160.81.1.el7.x86_64	
Matériel	x86_64	
Machine	x86_64	
Distribution	Red Hat Enterprise Linux Server	
Version	7.9	
Nom code	Maipo	

Caractéristiques : Processeur et mémoire		
	Boltzmann	Doppler
vendor_id	GenuineIntel	
Modèle	CPU 5160 @3.00GHz	CPU X5650 @2.67GHz
CPU MHz	2992.529	2667.000
Nombre de processeur	4	24
Mémoire totale	6975892 kB	164880648 kB

TABLE 3.1 – Caractéristiques des serveurs de recherche de l’EPM

Afin d’obtenir une première idée des temps de calculs nécessaires à la simulation en évolution d’un assemblage du projet CAMIVVER composé de 312 cellules, des premiers calculs sont effectués à l’échelle de la cellule avec les paramètres suivants :

- burn-up : 0 à 60 GWj.t⁻¹ ;
- nombre de pas de burn-up : 34 ;
- nombre de cycles par pas de burn-up : 4 000 ;
- nombre de neutrons par cycle : 4 000 ;
- population neutronique totale : 16 000 000 ;
- population non comptabilisée : 80 000.

Ces premiers résultats, illustrés par le tableau 3.2 et mis en regard des contraintes imposées par le projet, imposent un travail d’optimisation du temps de calcul, tout en conservant une précision suffisante des résultats obtenus par le code Serpent2. Afin de répondre au besoin d’optimisation, les deux paramètres principaux à quantifier sont les suivants :

- la discrétisation en pas de burn-up ;

Simulation	Temps de calcul effectif
Cellule hexagonale	2 jours et 18 heures
Temps de calcul estimé	
Assemblage hexagonal / Symétrie triangle	125 jours et 16 heures
Assemblage hexagonal / Symétrie losange	251 jours et 8 heures

TABLE 3.2 – Temps de calcul d’évolution Serpent2 à l’échelle de la cellule et de l’assemblage : 0 à 60 GWj.t^{-1} .

— la statistique neutronique :

- population neutronique totale ;
- répartition du nombre de cycles et du nombre de neutrons par cycle.

Pour les calculs d’évolution, les temps de simulation étant directement proportionnels au nombre de pas de burn-up et à la population neutronique utilisés, l’étude d’optimisation est menée de manière distincte sur les cellules avec et sans gadolinium.

Les contraintes imposées par la présence de gadolinium dans une cellule combustible rendent l’étude d’optimisation nettement plus sensible que pour une cellule sans poison consommable, c’est pourquoi seule l’étude d’optimisation d’une cellule empoisonnée est détaillée dans ce rapport.

Les résultats de l’étude d’optimisation reposent sur les temps nécessaires à l’exécution du calcul d’évolution et l’analyse de la convergence des paramètres suivants :

- k_{eff} ;
- N_i :
 - vecteur uranium : ^{235}U , ^{238}U ;
 - vecteur plutonium : ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu ;
 - vecteur gadolinium : ^{155}Gd , ^{157}Gd ;
 - poisons : ^{135}Xe , ^{149}Sm .

La détermination des paramètres d’optimisation du code de calcul Serpent2 repose sur des seuils d’acceptation des écarts sur le k_{eff} et les N_i entre deux calculs Serpent2. Ces seuils sont définis à partir des incertitudes générées par le code stochastique Serpent2. Pour les paramètres énoncés ci-avant, Serpent2 génère des incertitudes uniquement sur le calcul du k_{eff} , les valeurs des N_i étant directement calculées à partir de la résolution des équations de Bateman. Pour l’ensemble des cellules simulées, la valeur maximale de l’incertitude du code Serpent2, Δk_{S2} sur la valeur du k_{eff} est $\Delta k_{S2} = \pm 20$ pcm. Les seuils d’acceptation pour la valeur du k_{eff} sont définis comme suit :

- $\max(\Delta k_{eff}) \leq 3 \times \max(\Delta k_{S2}) \iff \max(\Delta k_{eff}) \leq 60$ pcm ;
- $\text{moy}(\Delta k_{eff}) \leq 2 \times \max(\Delta k_{S2}) \iff \text{moy}(\Delta k_{eff}) \leq 40$ pcm.

Les seuils d’acceptation pour les valeurs des N_i sont définis comme suit :

- $\max(\Delta N_i) \leq 0.5$ % ;
- $\text{moy}(\Delta N_i) \leq 0.1$ %.

3.2 Choix et méthodes : optimisation des pas de burn-up

La première étape du travail d’optimisation du temps de calcul consiste à déterminer le nombre minimum de pas de burn-up nécessaires à l’obtention de résultats satisfaisant les critères de validation énoncés dans la section 3.1 précédente.

Pour déterminer la discrétisation en burn-up, cette étude est basée sur les travaux [9], [23], [16] et [15] d’analyse comparative entre DRAGON et différents codes stochastiques, notamment Serpent. Les

paramètres de burn-up utilisés dans ces travaux, pour une cellule unique, sont résumés dans le tableau 3.3.

Travaux de référence	[9]	[23]	[16]	[15]
BU (GWj.t ⁻¹)	0 à 60	0 à 60	0 à 15.5 0 à 47	0 à 40
Nombre de pas de BU	103	30	20 28	80
Raffinement	0 à 5 GWj.t ⁻¹ : 31 pas 5 à 10 GWj.t ⁻¹ : 20 pas 10 à 20 GWj.t ⁻¹ : 31 pas 20 à 60 GWj.t ⁻¹ : 21 pas	1 pas de BU tous les 2 GWj.t ⁻¹	Inconnu	0 à 15 GWj.t ⁻¹ : 60 pas 15 à 40 GWj.t ⁻¹ : 20 pas

TABLE 3.3 – Caractéristiques des travaux de référence de comparaison D5-S2 ou D5-stochastique [9], [23], [16], [15].

Ainsi, onze essais de raffinement de burn-up sont réalisés, comptant tous une statistique similaire de 8 millions de neutrons. Les paramètres des essais ainsi que les temps de calculs associés sont résumés dans le tableau 3.4.

Nombre de pas	BU (GWj.t ⁻¹)	Temps de calcul
Option 1 : 14 pas		11 h 47 min
Option 1b : 21 pas		19 h 27 min
Option 2 : 28 pas		23 h 11 min
Option 2b : 42 pas	0 à 60	1 j 17 h 05 min
Option 3 : 56 pas		1 j 21 h 47 min
Option 3b : 73 pas		2 j 11 h 37 min
Option 4 : 91 pas		3 j 09 h 18 min
Essai 0 : 53 pas	0 à 12	2 j 13 h 05 min
Essai 1 : 106 pas		5 j 01 h 43 min
Essai 2 : 40 pas	0 à 60	1 j 18 h 10 min
Essai 3 : 32 pas		1 j 10 h 08 min

TABLE 3.4 – Essais de raffinement de burn-up et temps de calcul associés.

Parmi les essais ci-avant, ceux indicés "b" modifient la répartition des pas de burn-up de 0 à 12 GWj.t⁻¹, en début d'évolution, quand les autres la modifient de 12 à 60 GWj.t⁻¹, en fin de combustion. Les modifications apportées entre les différents essais sont résumées dans le tableau 3.5. Le burn-up est davantage discrétisé en début d'irradiation du fait de l'apparition de nouveaux isotopes par transmutation, dont les effets neutroniques sont importants. C'est en particulier le cas des poisons neutroniques tels que le ¹³⁵Xe et le ¹⁴⁹Sm.

Première partie de combustion : 0 à 12 GWj.t ⁻¹		
Discrétisation pas de BU		Modifications apportées
Option 1 : 14 pas	Option 1b : 21 pas	Ajout de 7 pas de 0 à 12 GWj.t ⁻¹
Option 2 : 28 pas	Option 2b : 42 pas	Ajout de 14 pas de 0 à 12 GWj.t ⁻¹
Option 3 : 56 pas	Option 3b : 73 pas	Ajout de 17 pas de 0 à 6 GWj.t ⁻¹
Option 1 : 14 pas	Option 3b : 73 pas	Ajout de 38 pas de 0 à 12 GWj.t ⁻¹ Ajout de 21 pas de 12 à 60 GWj.t ⁻¹
Essai 0 : 53 pas	Essai 1 : 106 pas	Ajout de 53 pas de 0 à 12 GWj.t ⁻¹
Seconde partie de combustion : 12 à 60 GWj.t ⁻¹		
Discrétisation pas de BU		Modifications apportées
Option 1b : 21 pas	Option 2 : 28 pas	Ajout de 7 pas de 12 à 60 GWj.t ⁻¹
Option 2b : 42 pas	Option 3 : 56 pas	Ajout de 14 pas de 12 à 60 GWj.t ⁻¹
Option 3b : 73 pas	Option 4 : 91 pas	Ajout de 18 pas de 6 à 20 GWj.t ⁻¹
Option 2 : 28 pas	Essai 2 : 40 pas	Ajout de 12 pas de 16 à 60 GWj.t ⁻¹
Option 1 : 14 pas	Essai 3 : 32 pas	Ajout de 18 pas de 16 à 60 GWj.t ⁻¹

TABLE 3.5 – Raffinement du burn-up : modifications apportées entre les différentes listes.

Les résultats obtenus lors de ces différentes simulations sont illustrés dans la section 3.3. L'analyse de ces résultats permet de déterminer les pas de burn-up utilisés pour les calculs d'évolution à l'échelle de la cellule et de l'assemblage, empoisonné ou non, et détaillés dans la section 3.7.

3.3 Convergence : pas de burn-up

Les tendances de convergence sont similaires pour tous les isotopes d'intérêt, présentés dans la section 3.1. Afin de faciliter la lecture du rapport, il a été choisi de discuter de la convergence des résultats au travers du k_{eff} , de [²⁴¹Pu] et de [¹⁵⁷Gd].

3.3.1 Coefficient de multiplication effectif : k_{eff}

Cette sous-section traite de la convergence du k_{eff} dans le code Serpent2 en fonction de la discrétisation du burn-up. Pour l'ensemble des résultats suivants, l'incertitude du code Serpent2 (Δk_{S2}) maximale observée est de ± 20 pcm, sur l'ensemble de l'irradiation.

3.3.1.1 Première partie d'irradiation : de 0 à 12 GWj.t⁻¹

L'impact sur le k_{eff} de la discrétisation du burn-up sur les premiers pas, de 0 à 12 GWj.t⁻¹, est illustré par la figure 3.1 ci-dessous. Les quatre options de burn-up présentées sont toutes comparées à une même référence, celle de l'essai 1, correspondant à une discrétisation sur 106 pas de burn-up de 0 à 12 GWj.t⁻¹.

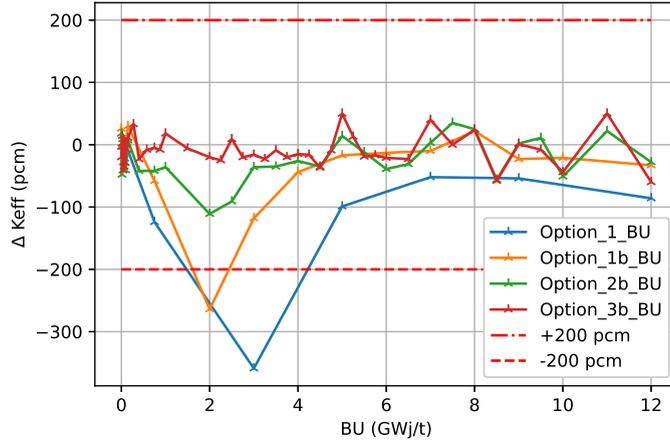


FIGURE 3.1 – Écarts sur le k_{eff} entre les options de burn-up 1 à 3b et la référence de l'essai 1, de 0 à 12 GWj.t⁻¹.

Les pics initiaux observés pour les options 1, 1b et 2b attestent de la nécessité de discrétiser fortement le burn-up sur les premiers pas pour obtenir un écart inférieur à 60 pcm sur le k_{eff} en tout point de burn-up et en moyenne inférieur à 40 pcm. La courbe représentant l'option 3b montre quant à elle une convergence suffisante des résultats, ces derniers respectant les seuils définis dans la section 3.1. En effet, bien que des écarts perdurent, ces derniers sont de 60 pcm en extremum et 20 pcm en moyenne malgré l'augmentation de 45 à 106 pas sur les seuls 12 premiers GWj.t⁻¹ de combustion. L'option de discrétisation 3b est suffisante.

3.3.1.2 Seconde partie d'irradiation : de 12 à 60 GWj.t⁻¹

L'impact sur le k_{eff} de la discrétisation du burn-up sur les pas suivants, de 12 à 60 GWj.t⁻¹ est illustré par la figure 3.2 ci-dessous. Les trois options de burn-up présentées sont toutes comparées à une même référence, celle de l'option 4, correspondant à une discrétisation sur 37 pas de burn-up de 12 à 60 GWj.t⁻¹.

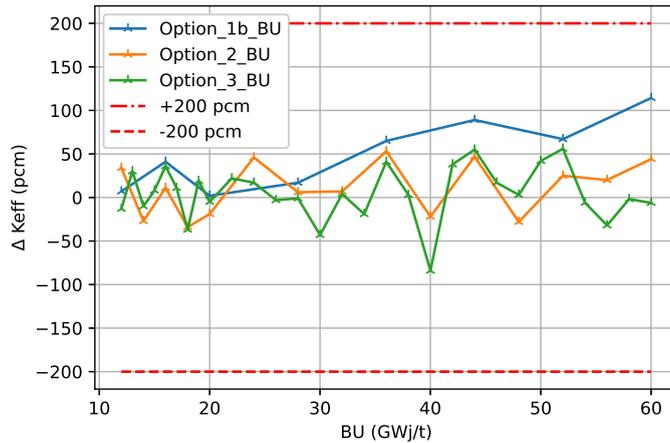


FIGURE 3.2 – Écarts sur le k_{eff} entre les options de burn-up 1b à 3 et la référence de l'option 4, de 12 à 60 GWj.t⁻¹.

Les courbes de la figure 3.2 illustrent le plus faible impact de la discrétisation du burn-up à partir de 12 GWj.t⁻¹. De plus, ces dernières témoignent de la très bonne convergence observée dès l'utilisation de l'option 2, en deuxième partie de combustion, avec un écart maximal observé sur le k_{eff} de 50 pcm à partir de 12 GWj.t⁻¹, validant le critère $\max(\Delta k_{eff}) \leq 60$ pcm. Il n'est pas nécessaire de discrétiser

davantage que l'option 2 à partir de cette valeur de burn-up.

3.3.2 Concentrations isotopiques : $[^{157}\text{Gd}]$ et $[^{241}\text{Pu}]$

Cette sous-section traite de la convergence des concentrations isotopiques du ^{157}Gd et du ^{241}Pu dans le code Serpent2, en fonction de la discrétisation du burn-up.

3.3.2.1 Première partie d'irradiation : de 0 à 12 GWj.t^{-1}

L'impact initial, de 0 à 12 GWj.t^{-1} , de la discrétisation du burn-up sur $[^{157}\text{Gd}]$ et $[^{241}\text{Pu}]$ est illustré par les figures 3.3 et 3.4 ci-dessous. Les options de burn-up présentées sont similaires à celles introduites en partie 3.3.1.1.

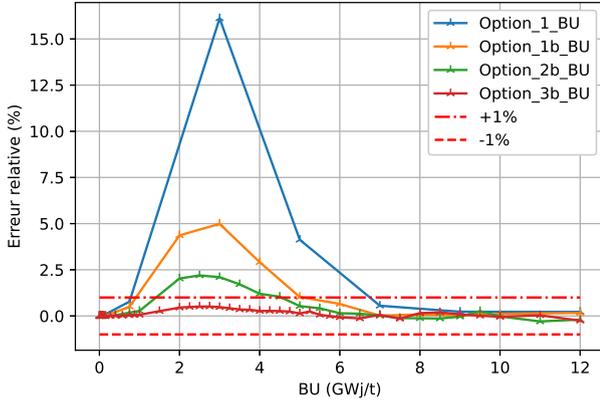


FIGURE 3.3 – Écarts sur $[^{157}\text{Gd}]$ entre les options de burn-up 1 à 3b et la référence de l'essai 1, de 0 à 12 GWj.t^{-1} .

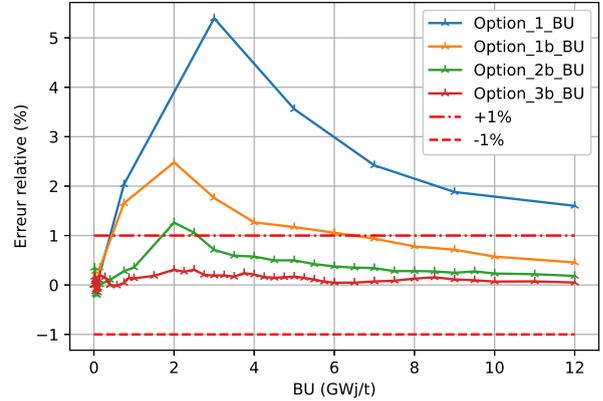


FIGURE 3.4 – Écarts sur $[^{241}\text{Pu}]$ entre les options de burn-up 1 à 3b et la référence de l'essai 1, de 0 à 12 GWj.t^{-1} .

Les résultats observés sur l'ensemble des vecteurs isotopiques, illustrés ici par les concentrations isotopiques du ^{157}Gd et du ^{241}Pu confortent les conclusions tirées précédemment. Il est nécessaire de discrétiser fortement le burn-up en début de combustion pour observer des écarts maximaux inférieurs à 0.5% sur les concentrations isotopiques. Il est nécessaire de discrétiser au minimum conformément à l'option 3b, soit 45 pas de burn-up entre 0 et 12 GWj.t^{-1} pour obtenir $\max(\Delta N_i) \leq 0.5\%$ et $\text{moy}(\Delta N_i) \leq 0.1\%$.

3.3.2.2 Seconde partie d'irradiation : de 12 à 60 GWj.t^{-1}

L'impact sur $[^{157}\text{Gd}]$ et $[^{241}\text{Pu}]$ de la discrétisation du burn-up en deuxième partie de combustion, de 12 à 60 GWj.t^{-1} est illustré par les figures 3.5 et 3.6 ci-dessous. Les options de burn-up présentées sont similaires à celles introduites en partie 3.3.1.2.

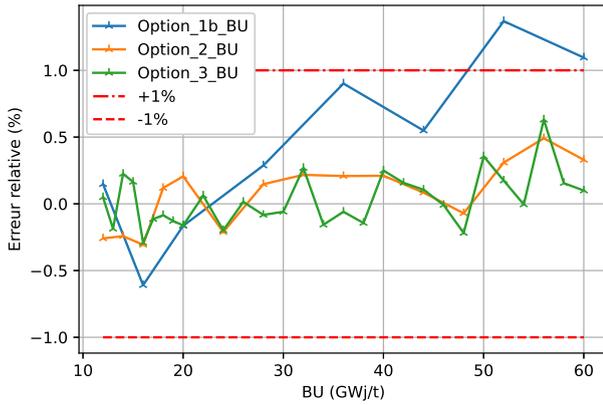


FIGURE 3.5 – Écarts sur $[^{157}\text{Gd}]$ entre les options de burn-up 1b à 3 et la référence de l’option 4, de 12 à 60 GWj.t^{-1} .

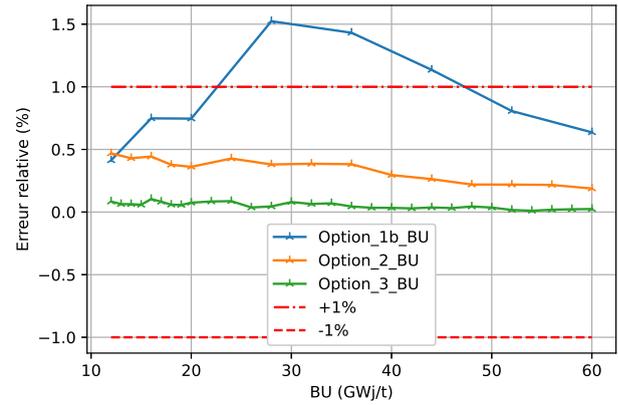


FIGURE 3.6 – Écarts sur $[^{241}\text{Pu}]$ entre les options de burn-up 1b à 3 et la référence de l’option 4, de 12 à 60 GWj.t^{-1} .

Tout comme observé avec le k_{eff} , les figures ci-avant illustrent le plus faible impact de la discrétisation du burn-up à partir de 12 GWj.t^{-1} . Les figures 3.5 et 3.6 témoignent de la très bonne convergence observée dès l’utilisation de l’option 2b en deuxième partie de combustion avec un écart maximal observé sur les concentrations isotopiques inférieur à 0.5%.

3.3.3 Conclusion partielle : burn-up

Les conclusions suivantes sont tirées des sous-sections 3.3.1 et 3.3.2 :

1. **discrétisation de 0 à 12 GWj.t^{-1}** : la discrétisation minimale pour une précision satisfaisante sur une cellule Gd est l’option 3b (45 pas sur cette plage de burn-up) ;
2. **discrétisation de 12 à 60 GWj.t^{-1}** : la discrétisation minimale pour une précision satisfaisante sur une cellule Gd est l’option 2b (15 pas sur cette plage de burn-up) ;
3. la sensibilité aux pas de burn-up est accrue en début de combustion (0 à 12 GWj.t^{-1}).

3.4 Choix et méthodes : optimisation de la statistique

La seconde étape du travail d’optimisation du temps de calcul consiste à déterminer la statistique minimale nécessaire à l’obtention de résultats acceptables au regard des seuils établis en section 3.1. Pour déterminer la statistique nécessaire à une convergence suffisante, cette étude reste basée sur les travaux [9], [23], [16] et [15] ainsi que sur les préconisations faites dans le Serpent Wiki. Les paramètres statistiques utilisés dans ces travaux sont résumés dans le tableau 3.6.

Travaux et préconisations	[9]	[23]	[16]	[15]	Serpent Wiki
Cycles	4 000	Inconnu (références utilisées : [16] et [15])	200	400	500
Neutrons par cycle	4 000	Inconnu (références utilisées : [16] et [15])	100 000	100 000	5 000
Population totale	16 000 000		20 000 000	40 000 000	2 500 000

TABLE 3.6 – Caractéristiques des travaux de référence [9], [23], [16] et [15] et préconisations Serpent2.

Ainsi, 17 essais de population neutronique sont réalisés en modifiant à la fois le nombre de cycles et le nombre de neutrons par cycles. Ceci permet d’observer l’effet global de la statistique totale sur la convergence des résultats Serpent2. Le burn-up est discrétisé conformément à l’option 2b, soit 42 pas sur la plage de combustion allant de 0 à 60 GWj.t^{-1} . Les paramètres des essais ainsi que les temps de calculs associés sont résumés dans le tableau 3.7.

Statistique totale	Statistique écartée	Cycles / neutrons par cycle	Temps de calcul
4 000	2 000	40 / 100	22 min
20 000	10 000	40 / 500	29 min
30 000		60 / 500	31 min
100 000	20 000	100 / 1 000	1 h 34 min
300 000		300 / 1 000	2 h 47 min
500 000		500 / 1 000	4 h 15 min
1 000 000	40 000	500 / 2 000	5 h 38 min
1 500 000	60 000	500 / 3 000	8 h 04 min
2 000 000	80 000	500 / 4 000	9 h 44 min
3 000 000		760 / 4 000	11 h 06 min
4 000 000		1 000 / 4 000	11 h 06 min
6 000 000		1 500 / 4 000	1 j 04 h 27 min
8 000 000		2 000 / 4 000	1 j 17 h 05 min
12 000 000		3 000 / 4 000	2 j 09 h 07 min
16 000 000		4 000 / 4 000	2 j 22 h 33 min
24 000 000	120 000	4 000 / 6 000	4 j 22 h 44 min
32 000 000	160 000	4 000 / 8 000	5 j 18 h 52 min

TABLE 3.7 – Essais de statistique neutronique et temps de calcul associés.

Les résultats obtenus lors de ces différentes simulations sont illustrés dans la partie suivante. Leur analyse permet de définir la statistique totale retenue pour les calculs d'évolution à l'échelle de la cellule et de l'assemblage, empoisonné ou non.

3.5 Convergence : la statistique neutronique totale

Afin d'illustrer l'effet de la statistique neutronique totale sur les résultats obtenus, les trois paramètres suivants sont présentés : le k_{eff} et les concentrations isotopiques du ^{157}Gd et du ^{241}Pu , pour les choix de population neutronique suivants :

- 100 cycles de 1 000 neutrons par cycle : 100 000 neutrons ;
- 500 cycles de 4 000 neutrons par cycle : 2 000 000 neutrons ;
- 1 000 cycles de 4 000 neutrons par cycle : 4 000 000 neutrons ;
- 2 000 cycles de 4 000 neutrons par cycle : 8 000 000 neutrons ;
- 4 000 cycles de 8 000 neutrons par cycle : 32 000 000 neutrons.

Compte tenu de la documentation scientifique à disposition et des indications d'utilisation du code Serpent2, la convergence des résultats obtenus est réalisée par rapport aux résultats de référence d'une population neutronique de 32 millions répartie en 4 000 cycles de 8 000 neutrons. Ces cinq options de statistique permettent à elles seules de déterminer la population neutronique minimale nécessaire à une convergence suffisante.

3.5.1 Coefficient de multiplication effectif : k_{eff}

Les figures 3.7 et 3.8 ci-dessous imagent l'évolution de la convergence du k_{eff} pour des populations neutroniques allant de 100 000 à 8 millions.

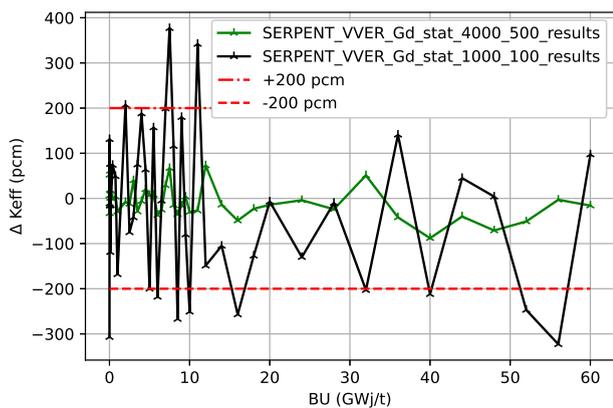


FIGURE 3.7 – Écarts sur le k_{eff} entre des statistiques de 100 000 et 2 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.

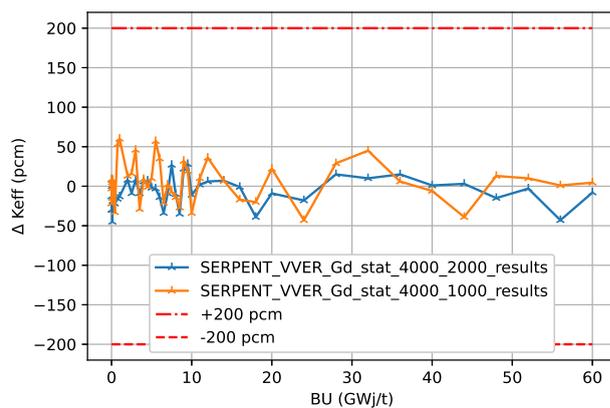


FIGURE 3.8 – Écarts sur le k_{eff} entre des statistiques de 4 millions et 8 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.

La figure 3.7 atteste d'écarts trop importants obtenus pour des populations neutroniques de 100 000 et 2 millions de neutrons par rapport à la population de référence de 32 millions. En effet, les écarts maximums sont respectivement de 300 pcm et 90 pcm pour certains pas de burn-up. Les écarts sont bien moindres pour des populations de 4 millions et 8 millions, comme le montre la figure 3.8 mais restent parfois supérieurs à 60 pcm dans le cas d'une population de 4 millions de neutrons. Concernant le k_{eff} , une population de 8 millions de neutrons est suffisante pour obtenir une précision de calcul répondant aux seuils définis par rapport à une population de référence de 32 millions de neutrons : $\max(\Delta k_{eff}) \leq 60$ pcm et $\text{moy}(\Delta k_{eff}) \leq 40$ pcm.

3.5.2 Concentrations isotopiques : [^{157}Gd] et [^{241}Pu]

Les observations effectuées sur les concentrations isotopiques du ^{157}Gd et du ^{241}Pu confirment les résultats obtenus pour le k_{eff} , comme l'illustrent les figures 3.9 à 3.12 ci-dessous.

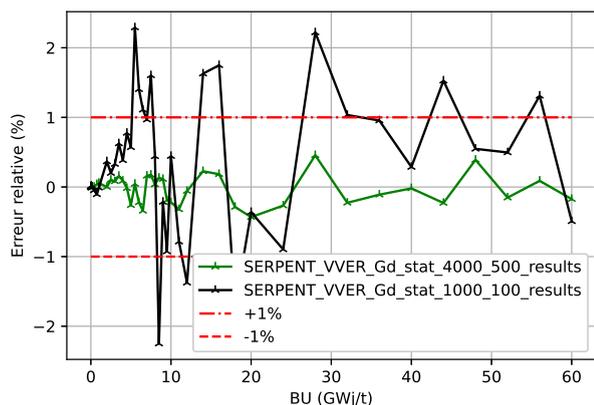


FIGURE 3.9 – Écarts sur [^{157}Gd] entre des statistiques de 100 000 et 2 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.

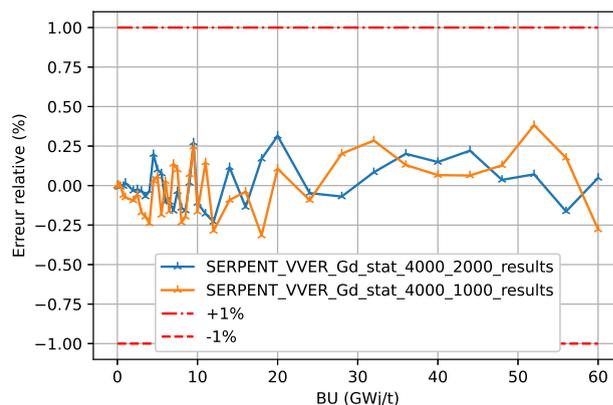


FIGURE 3.10 – Écarts sur [^{157}Gd] entre des statistiques de 4 millions et 8 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.

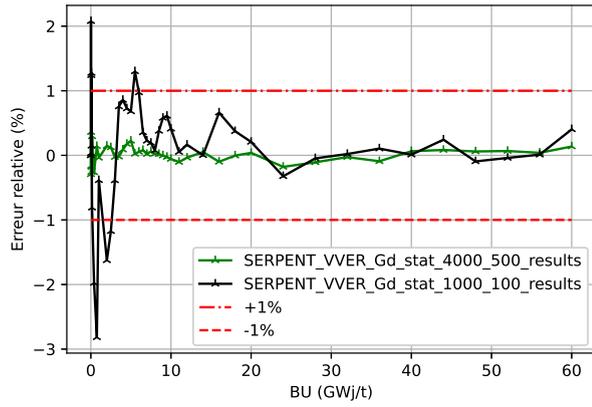


FIGURE 3.11 – Écarts sur $[^{241}\text{Pu}]$ entre des statistiques de 100 000 et 2 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.

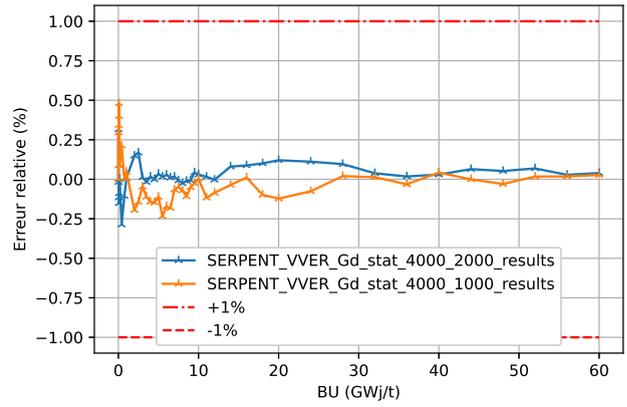


FIGURE 3.12 – Écarts sur $[^{241}\text{Pu}]$ entre des statistiques de 4 millions et 8 millions de neutrons avec une référence de 32 millions de neutrons.

À partir d'une population de 2 millions de neutrons (figures 3.9 et 3.11) les résultats répondent aux seuils définis pour l'optimisation, notant cependant un écart type conséquent pour des populations neutroniques allant de 2 à 4 millions de neutrons. Encore une fois, la population neutronique optimale est de 8 millions de neutrons (figures 3.10 et 3.12), assurant en tout point de burn-up, un écart absolu à la référence inférieur à 0.5% et un écart moyenné sur le burn-up inférieur à 0.1%.

3.5.3 Conclusion partielle : statistique

En conclusion, le tableau 3.8 ci-après permet de statuer sur la statistique minimale qu'il convient d'utiliser pour assurer une précision suffisante du code Serpent2, qui sert de référence pour la validation des calculs DRAGON5. Les statistiques présentées dans des cadres colorés sont celles comparées à la statistique de référence de 32 millions de neutrons, répartis en 4 000 cycles de 8 000 neutrons. Parmi celles-ci, les lignes en gras sont celles présentées dans les figures 3.7 à 3.12. Les résultats présentés sont **très mauvais**, **bons** et **excellents**.

Comparaison des statistiques				k_{eff}		$[^{241}\text{Pu}]$		$[^{157}\text{Gd}]$	
Statistique 1		Statistique 2							
Cycl.	n/Cycl.	Cycl.	n/Cycl.	$ \Delta_{\text{moy}} $ (pcm)	Δ_{max} (pcm)	$ \Delta_{\text{moy}} $ (%)	Δ_{max} (%)	$ \Delta_{\text{moy}} $ (%)	Δ_{max} (%)
40	100	40	500	562	2 715	3.63	12.73	5.90	21.10
100	1 000	300	1 000	143	439	0.59	3.41	0.87	3.25
500	1 000	500	2 000	85	316	0.40	1.36	0.34	-1,67
500	3 000	500	4 000	49	166	0.14	-0.66	0.20	-1,05
500	4 000	1 000	4 000	31	-89	0.18	-0.74	0.19	-0.54
1 000	4 000	1 500	4 000	25	86	0.12	0.37	0.17	0.54
1 500	4 000	4 000	4 000	20	-52	0.07	0.24	0.13	-0.43
100	1 000	4 000	8 000	141	377	0.48	-2.82	0.76	2.29
500	3 000	4 000	8 000	37	117	0.12	-0.51	0.16	-0.83
760	4 000	4 000	8 000	28	-80	0.09	-0.51	0.13	-0.71
1 000	4 000	4 000	8 000	21	60	0.11	0.48	0.12	0.38
1 500	4 000	4 000	8 000	18	42	0.06	0.46	0.13	-0.53
2 000	4 000	4 000	8 000	15	-45	0.06	0.31	0.09	0.31
4 000	4 000	4 000	8 000	10	47	0.04	0.25	0.08	-0.39

TABLE 3.8 – Écarts sur les valeurs k_{eff} , $[^{241}\text{Pu}]$ et $[^{157}\text{Gd}]$ en fonction de la statistique utilisée.

Comme évalué dans les sous-sections précédentes, une statistique de 8 millions de neutrons est optimale, elle valide les critères suivants, tout en tenant compte des incertitudes du code Serpent2 sur les valeurs du k_{eff} :

- écart maximum observé sur le k_{eff} inférieur à 60 pcm ;
- écart moyen observé sur le k_{eff} inférieur à 40 pcm ;
- écart maximum observé sur toutes les concentrations isotopiques (y compris celles non mentionnées dans le tableau) inférieur à 0.5% ;
- écart moyen observé sur toutes les concentrations isotopiques (y compris celles non mentionnées dans le tableau) inférieur à 0.1%.

Des statistiques de 4 à 6 millions pourraient convenir du fait de résultats satisfaisants en moyenne, comme indiqué dans le tableau précédent. Cependant, afin de se prémunir de résultats incorrects à l'échelle de l'assemblage, entraînant la nécessité de relancer des simulations avec une statistique supérieure et dans un temps imparti très contraint, des simulations avec 8 millions de neutrons sont réalisées dans la suite de l'étude.

3.6 Optimisation de la répartition du nombre de cycles et du nombre de neutrons par cycle

Enfin, il faut statuer sur la répartition de la statistique entre le nombre de cycles utilisés sur Serpent2 et le nombre de neutrons par cycle. Le tableau 3.9 présente la durée de calcul associée à chaque répartition choisie. Pour une statistique neutronique totale équivalente de 8 millions de neutrons, le temps de calcul augmente avec le nombre de neutrons par cycle.

Statistique		
Cycles	Neutrons par cycle	Temps de calcul
2 000	4 000	1 j 17 h 05 min
1 000	8 000	1 j 22 h 35 min
500	16 000	1 j 23 h 10 min
200	40 000	2 j 00 h 50 min

TABLE 3.9 – Essais de répartition d'une statistique de 8 millions de neutrons et temps de calculs associés.

Le tableau 3.10 présente les écarts observés sur les différents paramètres étudiés en fonction de la répartition statistique. Aucune influence notable de la répartition statistique n'est observée sur la précision des calculs.

Comparaison des statistiques				k_{eff}		$[^{241}\text{Pu}]$		$[^{157}\text{Gd}]$	
Statistique 1		Statistique 2							
Cycl.	n/Cycl.	Cycl.	n/Cycl.	$ \Delta_{moy} $ (pcm)	Δ_{max} (pcm)	$ \Delta_{moy} $ (%)	Δ_{max} (%)	$ \Delta_{moy} $ (%)	Δ_{max} (%)
2 000	4 000	4 000	8 000	15	-45	0.06	0.31	0.09	0.31
1 000	8 000	4 000	8 000	16	-38	0.06	-0.30	0.07	0.27
500	16 000	4 000	8 000	15	-40	0.05	0.25	0.09	0.40
200	40 000	4 000	8 000	22	55	0.06	0.24	0.07	0.45

TABLE 3.10 – Écarts sur les valeurs k_{eff} , $[^{241}\text{Pu}]$ et $[^{157}\text{Gd}]$ en fonction de la répartition d'une statistique de 8 millions de neutrons.

Finalement, le choix effectué pour le reste de l'étude se base sur les recommandations du guide d'utilisation de Serpent2 d'une part, qui préconise l'augmentation du nombre de neutrons par cycle plutôt

que celle du nombre de cycles ainsi que sur les répartitions utilisées dans [16] et [15]. La statistique utilisée dans la suite de l'étude se répartie en 500 cycles de 16 000 neutrons.

3.7 Paramètres finaux de l'étude

En conclusion, concernant la discrétisation en BU, les éléments suivants sont retenus pour les assemblages $\text{UO}_2 + \text{Gd}_2\text{O}_3$:

- discrétiser en BU au minimum selon l'option 3b jusqu'à 12 GWj.t^{-1} : choix effectué de 58 pas ;
- nécessité de discrétiser en BU au minimum selon l'option 2b à partir de 12 GWj.t^{-1} : choix effectué de 21 pas.

Pour les assemblages UOx , d'après les études effectuées, mais non présentées dans le rapport, il est nécessaire de discrétiser au minimum selon l'option 2b sur l'ensemble du burn-up, soit un choix effectué de 48 pas de burn-up.

Les discrétisations en burn-up utilisées pour les assemblages UO_2 et $\text{UO}_2 + \text{Gd}_2\text{O}_3$ sont présentées dans les tableaux 3.11 et 3.12.

0.0	0.03	0.05	0.075	0.15	0.25	0.5	0.75	1.0	2.0
2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0
7.5	8.0	8.5	9.0	9.5	10.0	11.0	12.0	13.0	14.0
15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	22.0	24.0	26.0	28.0
30.0	32.0	36.0	40.0	44.0	48.0	52.0	56.0	60.0	

TABLE 3.11 – Discrétisation en burn-up (GWj.t^{-1}) utilisée pour les benchmarks UO_2 .

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

TABLE 3.12 – Discrétisation en burn-up (GWj.t^{-1}) utilisée pour les benchmarks $\text{UO}_2 + \text{Gd}_2\text{O}_3$.

Concernant la statistique, les éléments suivants sont retenus :

- statistique minimale de 8 millions de neutrons ;
- privilégier la répartition suivante : 500 cycles de 16 000 neutrons.

Les paramètres présentés ci-dessus sont les paramètres minimaux permettant d'atteindre la précision de calcul souhaitée dans le cadre de ce projet. Une précision supérieure peut-être obtenue, en utilisant des paramètres de burn-up et de statistique plus fins, mais au prix d'un coût de calcul plus élevé.

CHAPITRE 4 À L'ÉCHELLE DE LA CELLULE

4.1 Introduction

Tout comme dans les documents [9] et [23], le processus de validation de DRAGON5 par Serpent2 est initialement effectué à l'échelle de la cellule. Cette validation est nécessaire avant de pouvoir s'intéresser aux assemblages complets. En effet, cette dernière permet d'obtenir des premiers résultats avec des temps de calculs assez faibles, facilitant par conséquent le travail d'optimisation. Tant que les résultats ne convergent pas à l'échelle de la cellule, il n'est pas recommandé de chercher un accord à l'échelle de l'assemblage, du fait de l'ajout du tube d'instrumentation central, des tubes guides, de la lame d'eau ou encore des stiffeners.

La démarche de validation consiste à vérifier l'accord entre les valeurs de k_{eff} sur l'ensemble de la combustion ainsi que les valeurs des concentrations des différents isotopes mentionnés dans la section 3.1. Les cellules simulées sont les cellules de référence présentées dans la sous-section 2.4.1 ci-avant.

Tous les calculs DRAGON5 et Serpent2, à l'échelle de la cellule et de l'assemblage, sont effectués avec des bibliothèques issues de la bibliothèque de données nucléaires JEFF 3.1.1. Il est rappelé que l'ensemble des résultats obtenus et des courbes tracées au cours du projet, sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

Les seuils de validation des comparaisons entre les valeurs globales de DRAGON5 et de Serpent2 sont les suivants :

- $\Delta k_{eff} < 300$ pcm ;
- $\Delta N_i < 2.00\%$.

4.2 Schéma de calcul Serpent2

Les paramètres Serpent2 utilisés pour les calculs de cellules sont détaillés dans le tableau 4.1 ci-dessous.

Température modérateur	560.0 K	
Température : Doppler broadening	300.0 K (<i>.03c</i>)	Interpolation type MC
Température : Thermal scattering	560.0 K (<i>lwj3.09t lwj3.11t</i>)	Interpolation type makxsf code
Energy grid : 2 groups	0 à 625 meV	625 meV à 19.64 MeV
Few-group structure	2 groups (<i>set nfg 0 0.625</i>)	
Résolution des équations d'évolution	Méthode de CRAM à l'ordre 2 (<i>set bumode 2</i>)	

TABLE 4.1 – Spécifications code Serpent2 : calculs à l'échelle de la cellule.

Dans les codes stochastiques, Serpent2 en particulier, une interpolation est effectuée pour la prise en compte de l'effet Doppler, permettant de travailler avec les bibliothèques indentées tous les 300.0 K. Il n'est possible de travailler qu'avec une température des tables inférieure à la température du modérateur, d'où le choix de la température *Doppler broadening* de 300.0 K. De plus, pour la prise en compte des sections efficaces de diffusion thermique aux faibles énergies, les codes stochastiques peuvent effectuer deux types d'interpolation, dont celle retenue dans cette étude, utilisant la méthode du code makxsf. La méthode d'interpolation restant perfectible, si la température du modérateur est très proche d'une température existante dans la bibliothèque, alors une seule température peut être indiquée. C'est le cas pour les calculs réalisés dans cette étude, où le modérateur est considéré à 560.0K. La première température disponible dans la bibliothèque est suffisamment proche, elle vaut 573.6K. Le biais alors créé est peu influent à l'échelle de la cellule, bien que l'interpolation ne soit pas systématiquement réalisée.

4.2.1 Géométries des cellules dans Serpent2

Pour chaque type de cellule (avec ou sans gadolinium), une unique géométrie est générée et exploitée dans le schéma de calcul Serpent2. Le combustible des cellules UOx et Gd est discrétisé, respectivement en quatre et six couronnes conformément aux travaux [14] et comme illustré dans les figures 4.1 et 4.2.

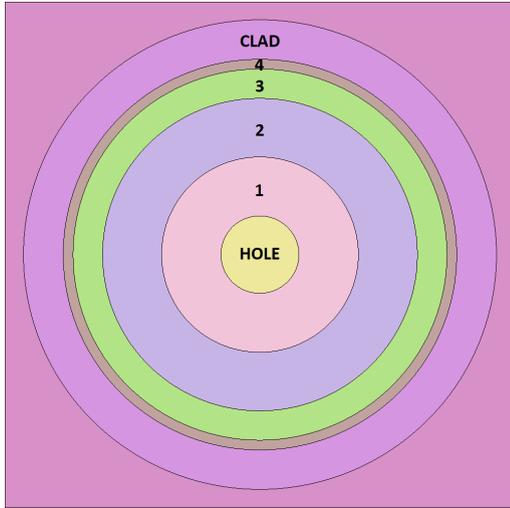


FIGURE 4.1 – Cellule UOx : trou central, combustible discrétisé en quatre couronnes et gaine.

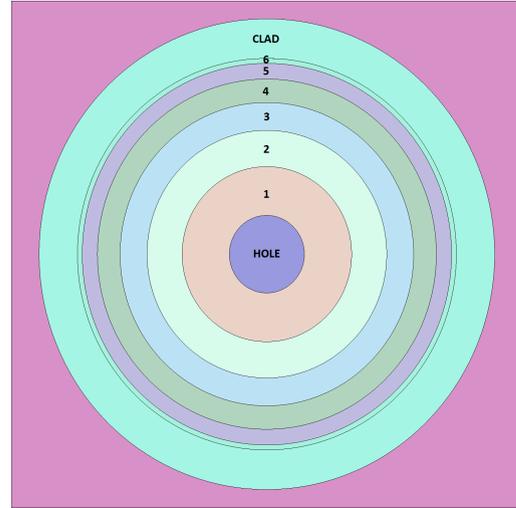


FIGURE 4.2 – Cellule Gd : trou central, combustible discrétisé en six couronnes et gaine.

4.3 Schéma de calcul DRAGON5

Cette section présente le schéma de calcul DRAGON5 développé pour la simulation des cellules de KML2. L'objectif est de fournir au lecteur une description globale de ces schémas sans pour autant en détailler de manière exhaustive tous les aspects. Les points suivants sont abordés :

- les différentes géométries utilisées : autoprotection et calcul de flux ;
- les modules de DRAGON5 et leur chaînage pour former le schéma de calcul.

4.3.1 Géométries des cellules dans DRAGON5

Pour chaque type de cellule (avec ou sans gadolinium), deux géométries sont générées et exploitées dans le schéma de calcul DRAGON5. Ces deux géométries sont représentées sur les figures 4.3 et 4.4 pour les cellules sans gadolinium, et sur les figures 4.5 et 4.6 pour les cellules avec gadolinium.

La première géométrie est celle sur laquelle est effectué le calcul d'autoprotection des résonances. Elle présente un raffinement sommaire. Seul le combustible est radialement discrétisé afin de donner une représentation précise de l'absorption de l' ^{238}U et des isotopes du gadolinium à l'intérieur des crayons. Au cours de l'irradiation de la cellule, l'évolution isotopique des couronnes est par conséquent différente. Ces couronnes sont au nombre de quatre pour une cellule sans gadolinium (figure 4.3) et au nombre de six pour une cellule avec gadolinium (figure 4.5).

La deuxième géométrie est celle sur laquelle est effectué le calcul de flux. Elle présente un raffinement plus important. Sur les figures 4.4 et 4.6 le modérateur est radialement discrétisé pour prendre en compte la dépendance radiale du flux en son sein. L'ensemble de la cellule est également angulairement sectorisée en six cadrans pour prendre en compte la dépendance angulaire du flux. Ce dernier raffinement ne présente aucun intérêt pour une cellule seule en milieu infini. Il présente toutefois un intérêt majeur à l'échelle d'un assemblage, où certaines cellules combustibles sont entourées d'éléments hétérogènes : trous d'eau, absorbants, cellules avec gadolinium, stiffeners, etc.

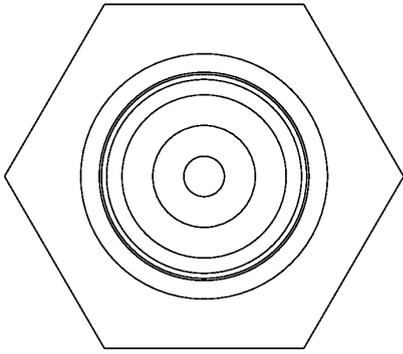


FIGURE 4.3 – Géométrie d'autoprotection pour les cellules sans gadolinium.

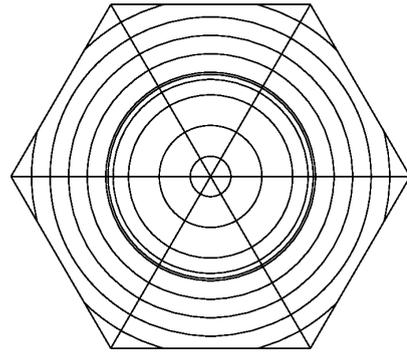


FIGURE 4.4 – Géométrie de calcul de flux pour les cellules sans gadolinium.

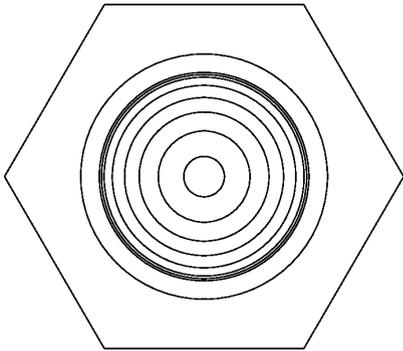


FIGURE 4.5 – Géométrie d'autoprotection pour les cellules avec gadolinium.

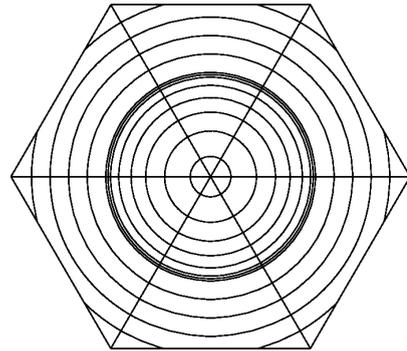


FIGURE 4.6 – Géométrie de calcul de flux pour les cellules avec gadolinium.

4.3.2 Chaînage des modules dans DRAGON5

Le chaînage des modules réalisé pour former le schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule est présenté en figure 4.7 ci-dessous.

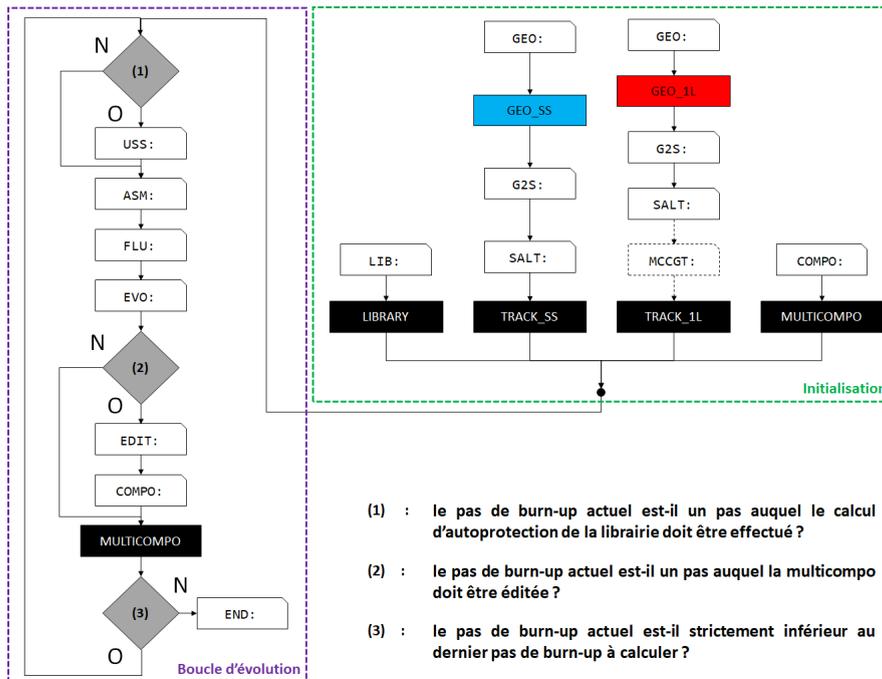


FIGURE 4.7 – Chaînage des modules du schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.

Le schéma de calcul des cellules est un schéma à simple niveau de calcul de flux, utilisant les géométries natives présentées dans la sous-section 4.3.1. La méthode de résolution de l'équation du transport est la méthode de première collision, dite des P_{ij} . La condition de réflexion aux frontières est isotrope (TISO). Le couple de tracking, formé par le paramètre de quadrature angulaire (an2d) et la densité des lignes d'intégration (densur), est égal à (8 ; 10). Seul ^{235}U et ^{238}U sont autoprotégés, à chaque pas de burn-up. Les listes des pas de burn-up (*ListBU*) sont celles définies en section 3.7 pour les calculs Serpent2. Les listes des pas de burn-up auxquels le calcul d'autoprotection est effectué (*ListAUTOP*) sont égales aux *ListBU* : chaque pas de burn-up est autoprotégé.

Le tableau 4.2 ci-dessous résume les paramètres de calcul utilisés pour les premiers calculs à l'échelle de la cellule. Il sera mis à jour (tableau 4.11) à la lumière des travaux d'optimisation menés en section 4.5. Une description plus détaillée des différents paramètres et de leur signification est fournie dans cette même section.

Cellule	Méthode	Condition limite	(an2d ; densur)	Isotopes autoprotégés	ListBU	ListAUTOP
Sans gadolinium	P_{ij}	TISO	(8 ; 10)	$^{235}\text{U}+^{238}\text{U}$	UOx	autop0
Avec gadolinium	P_{ij}	TISO	(8 ; 10)	$^{235}\text{U}+^{238}\text{U}$	Gd	autop0

TABLE 4.2 – Paramètres initiaux pour le schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.

4.4 Résultats initiaux

Cette section présente les premiers résultats obtenus à l'échelle de la cellule entre les codes Serpent2 et DRAGON5 sans optimisation des paramètres du code déterministe.

4.4.1 Analyse physique des résultats

En préambule de toute comparaison entre les résultats obtenus à l'échelle de la cellule des codes DRAGON5 et Serpent2, une analyse physique succincte des résultats est réalisée pour vérifier leur cohérence. Sur l'ensemble du burn-up, l'aspect des courbes ainsi que les valeurs associées du k_{eff} , de ^{235}U , de ^{241}Pu , de ^{157}Gd , de ^{135}Xe et de ^{149}Sm sont commentées.

Les figures 4.8 et 4.9 représentent l'évolution du k_{eff} calculé par DRAGON5 et Serpent2, respectivement pour une cellule sans gadolinium et une cellule avec gadolinium. Sur la figure 4.8, la chute initiale brutale du k_{eff} de -3500 pcm s'explique par l'établissement des poisons neutroniques, en particulier le ^{135}Xe et le ^{149}Sm . Une fois cet établissement effectif, on observe une décroissance progressive du k_{eff} due à la baisse globale du nombre de noyaux fissiles dans l'assemblage.

Dans le cas de la cellule Gd, en figure 4.9, l'augmentation initiale de k_{eff} jusqu'à 15 GWj.t⁻¹ s'explique par la consommation des isotopes du gadolinium. En effet, ces derniers disparaissent par captures, permettant à davantage de neutrons thermiques d'être candidats à la fission et de neutrons rapides d'être candidats au ralentissement. L'augmentation induite du facteur d'utilisation thermique et du facteur antitrappe dans la formule des quatre facteurs explique l'augmentation du k_{eff} . On retrouve ensuite une décroissance du k_{eff} , avec une pente similaire à la figure 4.8, d'une cellule UOx. Le burn-up correspondant au début de cette décroissance est corrélé à la disparition du ^{155}Gd , comme le montre la figure 4.17. Le ^{157}Gd disparaît légèrement plus tôt du fait de sa section efficace de capture supérieure dans le domaine thermique, comme illustré figure 4.16. Enfin, cette courbe de k_{eff} n'est pas représentative d'un assemblage réel puisque l'on ne s'intéresse qu'à une unique cellule gadolinium, là où, dans un assemblage réel, on retrouve une dizaine de cellules gadolinium sur plus de 300 cellules. Ceci explique la sous-criticité de la cellule tout au long de l'irradiation.

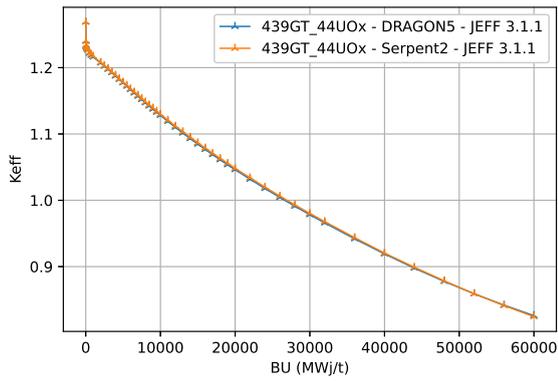


FIGURE 4.8 – Évolution du k_{eff} D5 et S2. Irradiation de 439GT_44UOx : 0 à 60 GWj.t⁻¹.

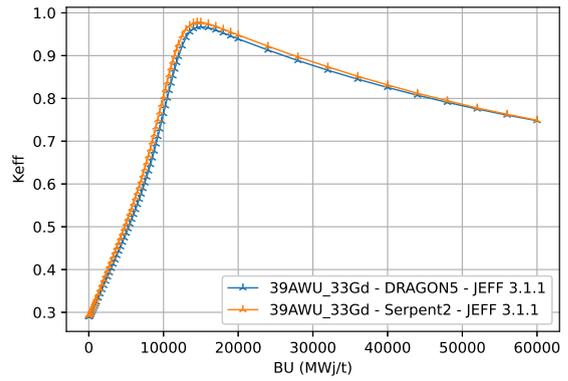


FIGURE 4.9 – Évolution du k_{eff} D5 et S2. Irradiation de 39AWU_33Gd : 0 à 60 GWj.t⁻¹.

Les figures 4.11 et 4.12 illustrent respectivement l'évolution de ^{235}U et de ^{241}Pu calculées par DRAGON5 et Serpent2, pour la cellule 39AWU_33Gd. La figure 4.11 montre que ^{235}U , noyau fissile, décroît par absorption, majoritairement par fission. Le ^{241}Pu , quant à lui non présent à l'état initial, augmente du fait de sa formation telle qu'explicitée figure 4.10, par capture radiative ou réaction ($n, 2n$), suivies de décroissances successives à partir de noyaux tels que ^{235}U ou ^{238}U . Cependant, sa pente de croissance diminue tout au long du burn-up, ceci du fait de sa consommation par fission. Le ^{241}Pu est davantage consommé en fin de burn-up du fait de la disparition de ^{235}U .

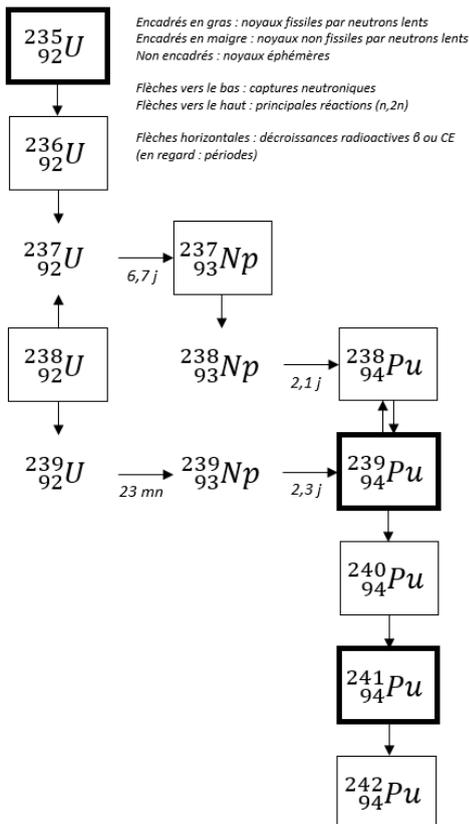


FIGURE 4.10 – Chaîne d'évolution des actinides.

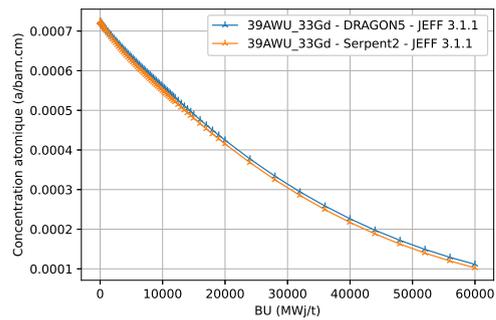


FIGURE 4.11 – Évolution de ^{235}U avec D5 et S2. Irradiation cellule 39AWU_33Gd : 0 à 60 GWj.t⁻¹.

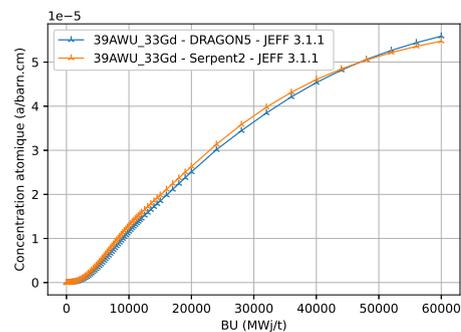


FIGURE 4.12 – Évolution de ^{241}Pu avec D5 et S2. Irradiation cellule 39AWU_33Gd : 0 à 60 GWj.t⁻¹.

Concernant les poisons, les figures 4.13 et 4.14 illustrent respectivement l'évolution de ^{135}Xe et de ^{149}Sm calculées par DRAGON5 et Serpent2, pour la cellule 39AWU_33Gd. Le ^{135}Xe s'établit plus rapidement que le ^{149}Sm , comme l'attestent les figures 4.13 et 4.14, du fait de constantes de

décroissances beaucoup plus faibles dans le cas de la formation du ^{135}Xe , respectivement 9 et 53 heures.

Les concentrations du ^{135}Xe et du ^{149}Sm sont calculées respectivement par les formules 1 et 2 obtenues par résolution des équations d'évolution simplifiées de ces deux isotopes. La décroissance du ^{135}Xe en deuxième partie d'irradiation s'explique par la formule 1. En effet, pour les valeurs de flux observées, la concentration du ^{135}Xe dépend de Φ et de Σ_f . Là où, la valeur du ^{149}Sm ne dépend pas de Φ , comme le montre la formule 2, mais uniquement de Σ_f , expliquant sa quasi stabilité en deuxième partie de burn-up.

$$Xe_{eq} = \frac{(\gamma_I + \gamma_{Xe}) \cdot \Sigma_f \cdot \Phi}{\lambda_{Xe} + \sigma_{c,Xe} \cdot \Phi} \quad (1)$$

$$Sm_{eq} = \frac{\gamma_P \cdot \Sigma_f}{\sigma_{c,Sm}} \quad (2)$$

Avec :

- Σ_f : section efficace macroscopique totale de fission ;
- Φ : flux neutronique ;
- γ_I : rendement de fission de l' ^{135}I ;
- γ_{Xe} : rendement de fission du ^{135}Xe ;
- γ_P : rendement de fission du ^{149}Pm ;
- λ_{Xe} : constante de décroissance du ^{135}Xe ;
- $\sigma_{c,Xe}$: section efficace microscopique de capture du ^{135}Xe ;
- $\sigma_{c,Sm}$: section efficace microscopique de capture du ^{149}Sm .

Dans le cas d'une cellule Gd, la décroissance brutale observée en première partie de burn-up de [^{135}Xe] et de [^{149}Sm] provient de la consommation du Gd et donc de l'augmentation des captures neutroniques par le ^{135}Xe et le ^{149}Sm impliquant une diminution des concentrations stabilisées des poisons.

Enfin, dans le cas d'une cellule UOx, après l'établissement initial des poisons, on constate d'abord une augmentation de ces derniers, sur des échelles de temps certes différentes. Pour le ^{135}Xe cette dernière s'explique par l'augmentation du produit $\Sigma_f \cdot \Phi$. Pour le ^{149}Sm , cette augmentation s'explique par l'augmentation de Σ_f .

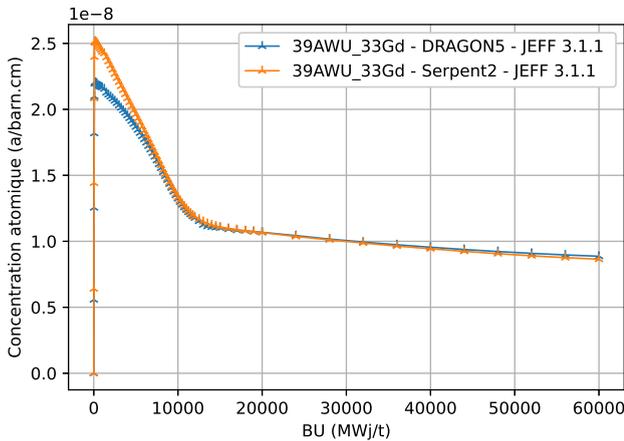


FIGURE 4.13 – Évolution de [^{135}Xe] calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$.

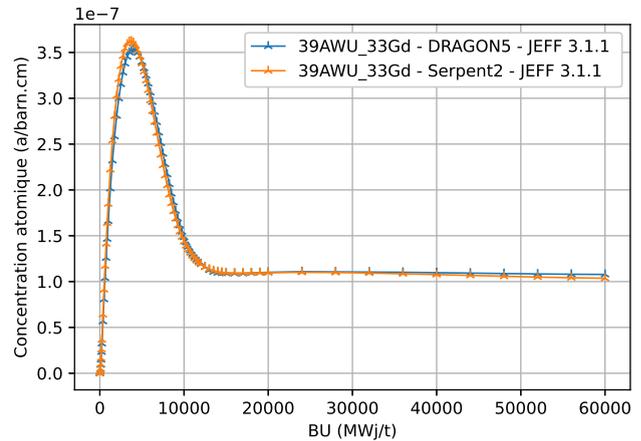


FIGURE 4.14 – Évolution de [^{149}Sm] calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$.

Le choix a été fait de ne s'intéresser qu'aux isotopes ^{155}Gd et ^{157}Gd du vecteur gadolinium du fait de la prédominance de leurs sections efficaces totales de capture dans le domaine thermique comme l'indique la figure 4.18.

Les figures 4.15 et 4.16 représentent l'évolution de ^{157}Gd calculée par DRAGON5 et Serpent2, respectivement pour une cellule sans gadolinium et une cellule avec gadolinium. La figure 4.17 représente l'évolution de ^{155}Gd calculée par DRAGON5 et Serpent2 pour une cellule avec gadolinium. Les allures des courbes du ^{155}Gd et ^{157}Gd sont très similaires. Pour la cellule sans gadolinium, en figure 4.15, on observe une très faible augmentation de gadolinium, davantage est formé qu'il n'y en a de consommé par capture. Concernant la cellule 39AWU_33Gd, en figure 4.16, la forte concentration initiale en ^{155}Gd et ^{157}Gd explique leur très nette décroissance en début de burn-up par capture.

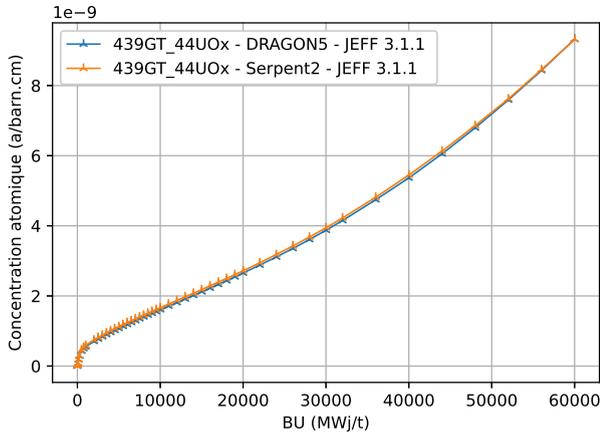


FIGURE 4.15 – Évolution de ^{157}Gd calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 439GT_44UOx de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$.

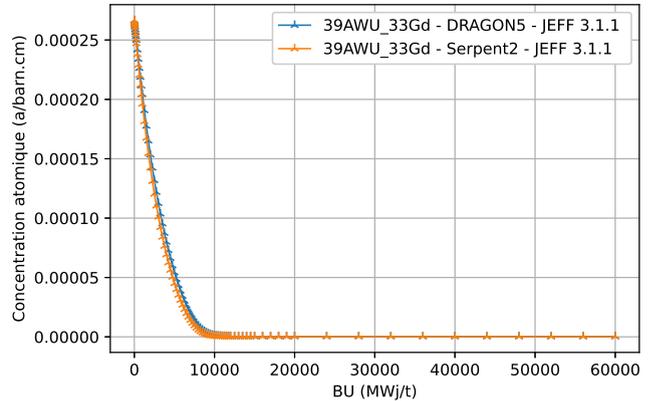


FIGURE 4.16 – Évolution de ^{157}Gd calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$.

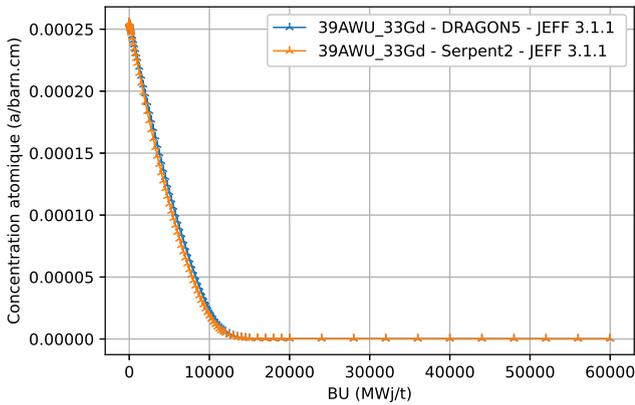


FIGURE 4.17 – Évolution de ^{155}Gd calculée par D5 et S2. Irradiation de la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$.

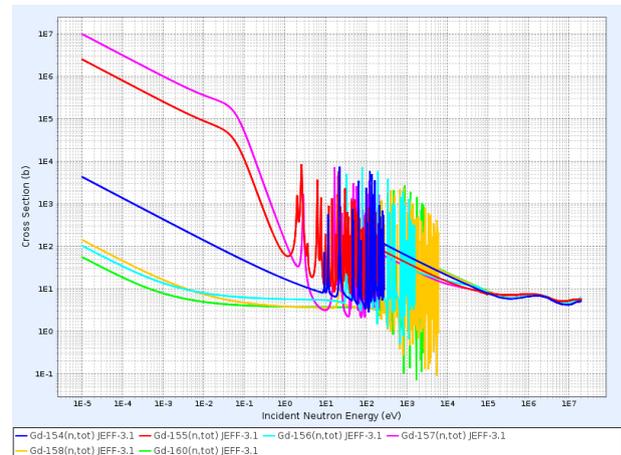


FIGURE 4.18 – Sections efficaces microscopiques totales : vecteur isotopique du gadolinium.

4.4.2 Comparaison initiale des résultats DRAGON5 et Serpent2

Les résultats initiaux obtenus pour les différentes cellules référencées dans le tableau 2.2 sont présentés en trois temps : la cellule 22AU_22UOx seule, puis les cellules UOx plus fortement enrichies, entre 3,6% et 4,4%, et enfin les deux cellules gadolinium, 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.

4.4.2.1 Cellule UOx faiblement enrichie : 22AU_22UOx

Pour cette cellule, dont l'enrichissement en ^{235}U est de 2.2%, l'écart observé sur le k_{eff} est inférieur à 300 pcm jusqu'à la moitié du burn-up, comme le montre la figure 4.19. Une divergence progressive des résultats entre DRAGON5 et Serpent2 est observée tout au long du burn-up. L'accord sur le k_{eff} n'est pas obtenu en évolution.

La courbe 4.20 corrobore ces résultats puisque la divergence obtenue sur l' ^{235}U est l'image de celle observée sur le k_{eff} . En effet, l'écart observé est supérieur à 2.0% à partir de 30 GWj.t $^{-1}$. L'écart maximum sur la concentration en ^{235}U est supérieur à 9.0% en fin de burn-up. L'accord sur ^{235}U n'est pas obtenu en évolution.

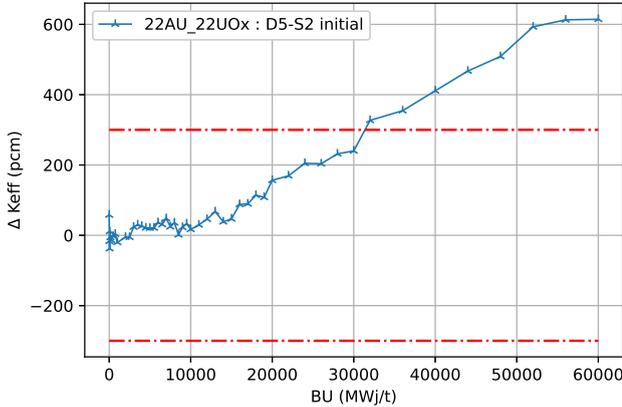


FIGURE 4.19 – k_{eff} : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$ pour la cellule 22AU_22UOx.

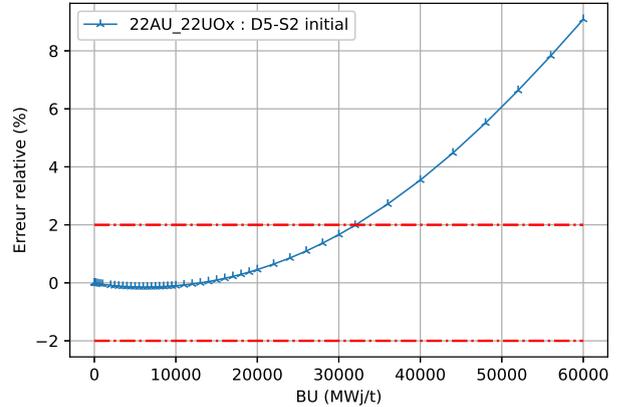


FIGURE 4.20 – ^{235}U : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t $^{-1}$ pour la cellule 22AU_22UOx.

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 4.3 rend compte des résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

Isotopes	
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{236}U , ^{238}U , ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{135}Xe
Absence d'accord : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{235}U , ^{239}Pu , ^{242}Pu , ^{149}Sm , ^{155}Gd et ^{157}Gd
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$, moyenné sur les actinides	3.7%
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$	^{235}U : 9.0% en fin de BU

TABLE 4.3 – Écarts initiaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour la cellule 22AU_22UOx.

4.4.2.2 Cellules UOx plus fortement enrichies

Les figures 4.21 à 4.24 illustrent les résultats obtenus pour des cellules dont l'enrichissement en ^{235}U est plus élevé et varie entre 3.6% et 4.4%.

La figure 4.21 témoigne de l'accord obtenu sur le k_{eff} ($\Delta k_{eff} < 300$ pcm) sur la quasi-totalité du burn-up pour les quatre cellules, excepté pour la plus faiblement enrichie en fin de combustion. Une divergence progressive similaire à la cellule précédente est obtenue sur l'ensemble du burn-up. L'accord sur le k_{eff} est obtenu en évolution à partir d'un enrichissement en ^{235}U de 4.0%.

La forme des résultats obtenus en figure 4.22 pour l' ^{235}U est similaire, ces derniers sont inférieurs à 2.0% pour la cellule 439GT_44UOx uniquement. L'accord sur ^{235}U en évolution est seulement obtenu pour l'enrichissement maximal considéré.

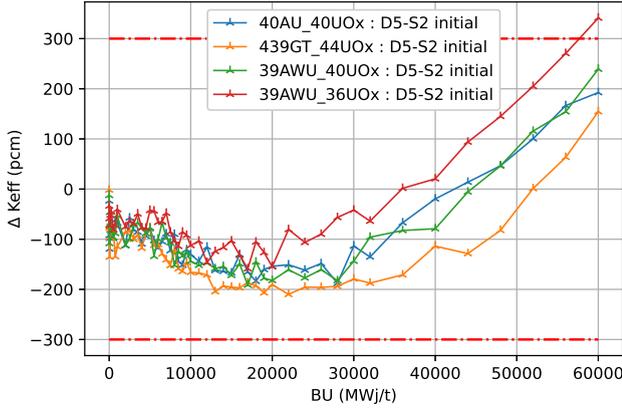


FIGURE 4.21 – k_{eff} : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.

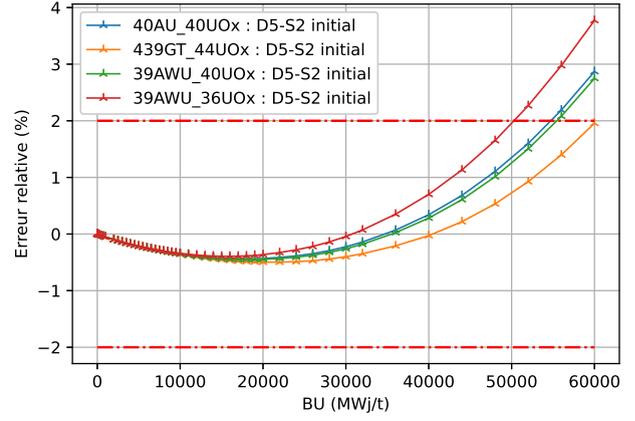


FIGURE 4.22 – ^{235}U : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.

Les figures 4.23 et 4.24 rendent compte des écarts pour les isotopes ^{239}Pu et ^{155}Gd . Les écarts maximums observés sur l'ensemble du burn-up sont respectivement de 4.0% et 3.0%, si les pics observés au départ sont négligés. Ces derniers sont le résultat d'écarts numériques conjugués à la manière dont est calculée l'erreur relative, conformément à la formule 3. Ils sont observés sur les isotopes initialement absents du combustible, créés par transmutation lors de l'irradiation. Lors des premiers pas de burn-up, malgré un faible écart sur les N_i calculées par DRAGON5 et Serpent2, la division par $N_{i,S2}(BU)$ génère des écarts relatifs importants. De plus, la différence de précision supportée par les codes Serpent2 et DRAGON5 sur les nombres réels tend à accentuer les écarts observés aux premiers instants de l'irradiation. Même sans prendre en compte ces pics initiaux, l'accord n'est pas obtenu sur ^{239}Pu et ^{155}Gd en évolution.

$$\epsilon = \frac{N_{i,D5}(BU) - N_{i,S2}(BU)}{N_{i,S2}(BU)} \quad (3)$$

Les figures 4.23 et 4.24 témoignent de l'impact de l'enrichissement en ^{235}U sur les accords entre DRAGON5 et Serpent2. Plus l'enrichissement est élevé, proche de 4.4%, plus les résultats sont similaires entre les codes de calcul et inférieurs aux seuils souhaités, soit $\Delta k_{eff} < 300$ pcm et $\Delta N_i < 2.0\%$.

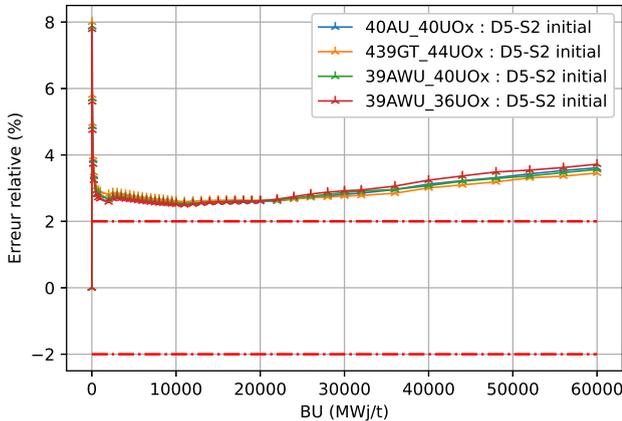


FIGURE 4.23 – ^{239}Pu : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.

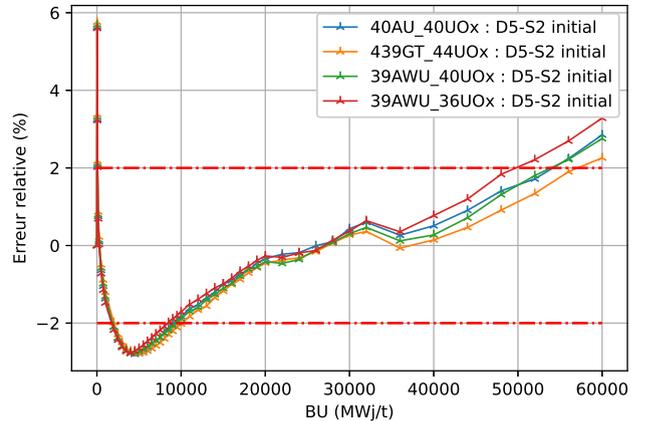


FIGURE 4.24 – ^{155}Gd : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 4.4 rend compte des

résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

Isotopes	
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{236}U , ^{238}U , ^{240}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe
Absence d'accord : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{155}Gd et ^{157}Gd
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$, moyenné sur les actinides	3.0%
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$	^{157}Gd : 6.0% en début de BU

TABLE 4.4 – Écarts initiaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules 40AU_40UOx, 439GT_44UOx, 39AWU_40UOx et 39AWU_36UOx.

4.4.2.3 Cellules Gd : 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd

Les figures 4.25 à 4.28 illustrent les résultats obtenus pour des cellules gadolinium dont l'enrichissement en ^{235}U varie entre 3.3% et 3.6%.

La figure 4.25 atteste d'écarts obtenus sur le k_{eff} toujours supérieurs à 300 pcm entre les résultats DRAGON5 et Serpent2 sur l'ensemble du burn-up. Le minimum, à 10 GWj.t⁻¹, témoigne d'un écart de -4000 pcm. La forme de la courbe s'explique par la disparition totale des isotopes ^{155}Gd et ^{157}Gd autour de 12 GWj.t⁻¹ d'où la diminution de l'écart entre DRAGON5 et Serpent2. On retrouve, en fin de burn-up, des écarts similaires à ceux obtenus pour des cellules UOx. L'accord sur le k_{eff} n'est pas obtenu en évolution.

Les écarts observés sur le k_{eff} sont de deux natures. L'un, dès le premier pas de burn-up (≈ -600 pcm), est imputé au calcul d'autoprotection. L'autre, en évolution et en présence de gadolinium (≈ -4000 pcm), est imputé au modèle de dépôt d'énergie de Serpent2. Ces conclusions ont été établies en fin de projet, durant l'exploration des pistes d'amélioration, et n'ont pu être appliquées aux calculs antérieurs.

Comme le montre la figure 4.26, la forme des écarts obtenus pour l' ^{235}U est inversée en présence de Gd, cette dernière est de nouveau convexe lorsque le gadolinium a totalement disparu, aux alentours de 12 GWj.t⁻¹. L'accord sur $[^{235}\text{U}]$ n'est pas obtenu en évolution et avoisine les 9.0% en fin de burn-up.

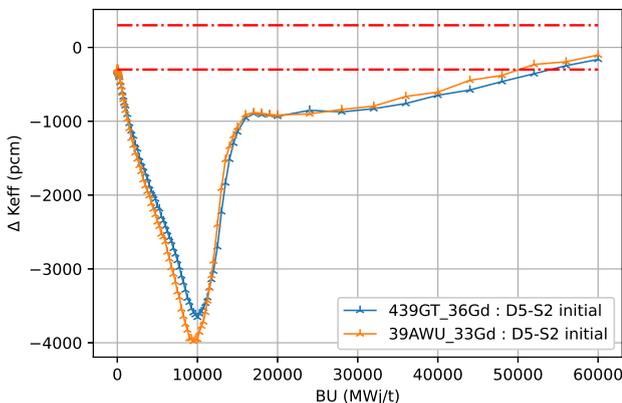


FIGURE 4.25 – k_{eff} : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.

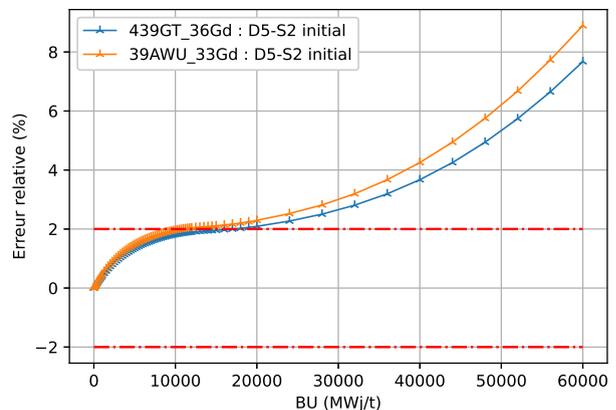


FIGURE 4.26 – $[^{235}\text{U}]$: écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.

Les figures 4.27 et 4.28 illustrent respectivement les écarts initiaux sur $[^{241}\text{Pu}]$ et $[^{157}\text{Gd}]$ calculés entre les codes DRAGON5 et Serpent2 pour les cellules gadolinium. Concernant le ^{241}Pu , l'écart observé sur

la figure 4.27 entre les deux codes est inférieur à 2.0% uniquement en fin de burn-up. L'écart maximal observé est supérieur à 35.0% pour la cellule 39AWU_33Gd. On observe de nouveau une cassure de la pente autour de 12 GWj.t⁻¹ lors de la disparition des isotopes du gadolinium.

Enfin, l'accord n'est jamais obtenu pour le ¹⁵⁷Gd, comme illustré par la figure 4.28. L'écart maximal observé atteint pratiquement 80.0% avant de décroître du fait de la disparition du gadolinium par capture. À partir de 20 GWj.t⁻¹, l'écart reste néanmoins stable à 30.0% lorsque l'équilibre entre production par fission ou désintégration et disparition par capture est atteint. L'accord sur [²⁴¹Pu] et [¹⁵⁷Gd] n'est pas obtenu.

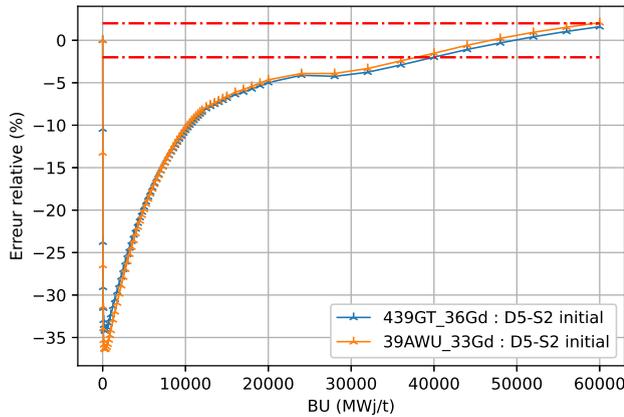


FIGURE 4.27 – [²⁴¹Pu] : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.

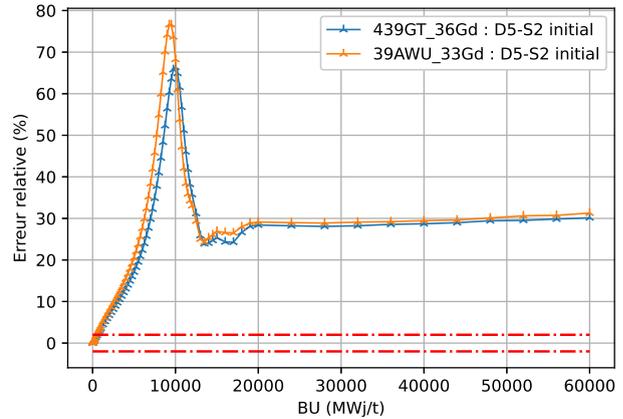


FIGURE 4.28 – [¹⁵⁷Gd] : écarts initiaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t⁻¹ pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.

Ces figures témoignent de l'impact de la présence de gadolinium dans les cellules sur les accords entre DRAGON5 et Serpent2, en particulier la difficulté à converger sur le calcul des concentrations des transuraniens. En effet, les écarts observés sont nettement supérieurs en présence de gadolinium, pour le k_{eff} et les N_i . Cependant, dans les cellules étudiées, la forte concentration en gadolinium n'est pas l'image d'un assemblage réel où seules six à neuf cellules gadolinium sont présentes sur un total de 312 cellules combustibles.

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 4.5 rend compte des résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

Isotopes	
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	²³⁸ U
Absence d'accord : $\Delta N_i > 2.0\%$	²³⁵ U, ²³⁶ U, ²³⁹ Pu, ²⁴⁰ Pu, ²⁴¹ Pu, ²⁴² Pu, ¹⁵⁵ Gd, ¹⁵⁷ Gd, ¹⁴⁹ Sm et ¹³⁵ Xe
$max(\Delta N_i(BU))$, moyenné sur les actinides	27.1%
$max(\Delta N_i(BU))$	¹⁵⁷ Gd : 76.0% à 10 GWj.t ⁻¹ (disparition Gd)

TABLE 4.5 – Écarts initiaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules 439GT_36Gd et 39AWU_33Gd.

4.5 Optimisation DRAGON5

Afin de réduire les écarts observés dans la section précédente, tant sur le k_{eff} que sur les N_i , une étude d'optimisation des calculs DRAGON5 est menée et détaillée dans cette section. Elle fait mention de

l'impact des paramètres identifiés comme ayant une influence majeure sur les résultats du schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.

4.5.1 Démarche d'optimisation

Les paramètres du schéma de calcul DRAGON5 identifiés comme ayant une influence majeure sur la précision des résultats sont les suivants :

- le type de condition limite aux frontières de la géométrie : isotrope (TISO) ou spéculaire (TSPC) ;
- la liste des valeurs de burn-up auxquelles sont effectués les calculs : *ListBU* ;
- la liste des valeurs de burn-up auxquelles la librairie d'isotopes est autoprotégée : *ListAUTOP* ;
- la liste des isotopes autoprotégés ;
- les paramètres de tracking : le nombre d'angles de tracking (*an2d*) et la densité surfacique (*densur*) ;
- le type de méthode utilisée pour la résolution de l'équation du transport : P_{ij} ou MOC.

L'étude d'optimisation consiste à faire varier séparément chacun de ces paramètres afin d'apprécier leur impact individuel sur les résultats des calculs DRAGON5. Chaque cellule a été optimisée vis-à-vis de chaque paramètre. Dans cette section, pour chaque paramètre majeur, ne sont présentés que les résultats de la cellule la plus représentative de l'optimisation réalisée. À la fin de cette section, dans le tableau 4.11, un jeu de paramètres optimaux est retenu pour chaque type cellule de référence puis repris pour effectuer les premiers calculs d'assemblage.

4.5.2 Condition limite aux frontières : TISO ou TSPC

Le module SALT: [8] permet de réaliser le tracking d'une géométrie avec une condition de réflexion aux frontières de type isotrope (mot clé TISO) ou spéculaire (mot clé TSPC). La condition de réflexion spéculaire est celle approchant au mieux le comportement d'un neutron au sein du réacteur mais également celle approchant au mieux les modèles de transport neutronique de Serpent2. À ce titre, elle présente un intérêt indéniable. La réalisation d'un tracking SALT: en réflexion spéculaire sur une géométrie hexagonale est désormais possible grâce à un développement récent de la Version5 par l'École Polytechnique de Montréal, pour les besoins spécifiques du projet.

Cette sous-section compare les résultats des calculs DRAGON5 avec le mot clé TISO et TSPC. Pour chaque mot clé, un jeu de paramètres optimaux est utilisé. Les résultats de cette étude pour la cellule 40AU_40UOx sont illustrés en figure 4.29 et 4.30 ci-dessous.

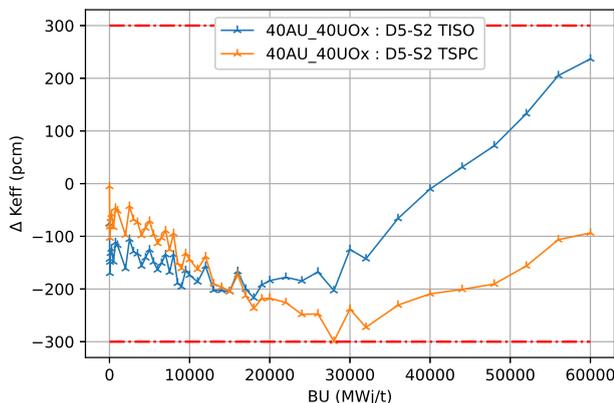


FIGURE 4.29 – Influence de la condition limite aux frontières sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 40AU_40UOx.

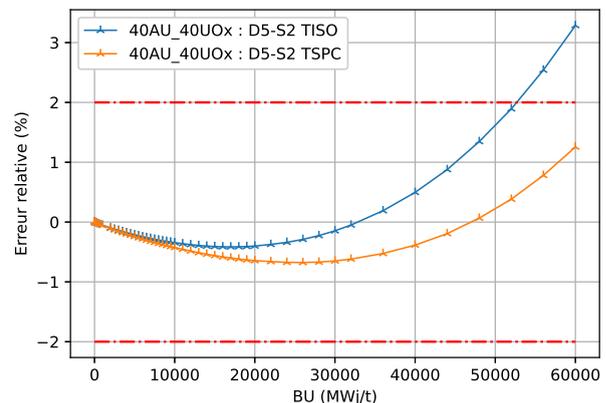


FIGURE 4.30 – Influence de la condition limite aux frontières sur l'écart D5-S2 de ^{235}U pour la cellule 40AU_40UOx.

On constate sur les figures 4.29 et 4.30 que le calcul TSPC permet de minimiser l'écart sur le k_{eff} en début d'irradiation mais également de réduire la dérive des résultats DRAGON5 sur le k_{eff} et les N_i . **L'emploi du mot-clé TSPC est à privilégier.**

4.5.3 Pas de burn-up : *ListBU*

Le choix des listes de pas de burn-up a été détaillé en section 3.2. Ce choix, applicable aux calculs Serpent2, est issu d'une optimisation du temps de calcul vis-à-vis de leur précision. Pour les calculs DRAGON5, le choix peut être fait d'utiliser des pas de burn-up plus raffinés afin de réduire l'erreur faite au cours de l'irradiation de la cellule. C'est ce raffinement de *ListBU* qui est étudié dans cette section.

4.5.3.1 Cellules sans gadolinium

La cellule présentée pour l'optimisation de *ListBU* est 22AU_22UOx, qui est la plus représentative de la dérive des paramètres au cours de l'irradiation.

À partir de la *ListBU* UOx utilisée par Serpent2 pour les cellules sans gadolinium (tableau 3.11), on construit deux autres *ListBU*, UOx2 et UOx4 :

- UOx2 est obtenue en raffinant par pas de 2 GWj.t⁻¹ la liste entre 30 GWj.t⁻¹ et 60 GWj.t⁻¹ ;
- UOx4 est obtenue en raffinant par pas de 1 GWj.t⁻¹ la liste entre 20 GWj.t⁻¹ et 60 GWj.t⁻¹.

Une représentation visuelle des trois *ListBU* est fournie en figure 4.31 ci-dessous.

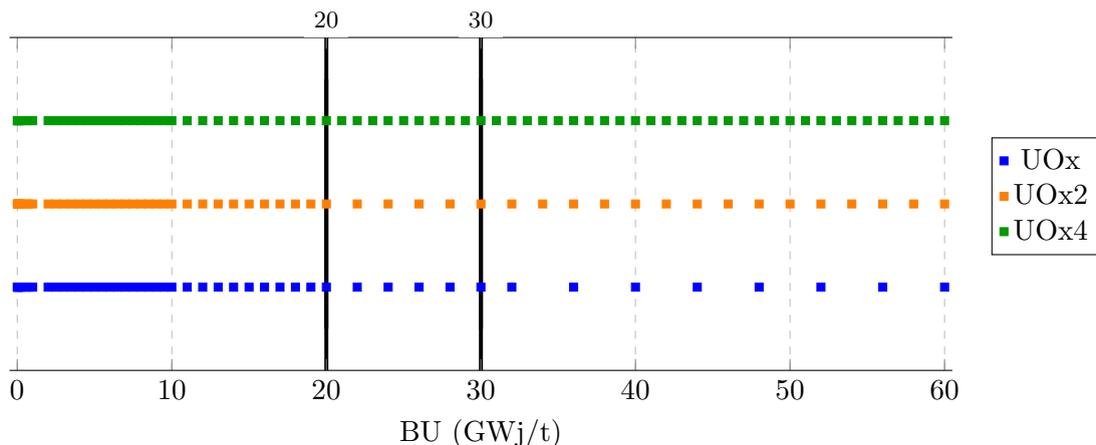


FIGURE 4.31 – Représentation visuelle du raffinement des *ListBU*.

Les figures 4.32 et 4.33 présentent respectivement l'influence du raffinement de *ListBU* sur l'écart DRAGON5-Serpent2 du k_{eff} et de $[^{155}\text{Gd}]$, pour la cellule 22AU_22UOx, de 0 à 60 GWj.t⁻¹. On constate les points suivants :

- le raffinement de *ListBU* permet de diminuer l'écart DRAGON5-Serpent2 en fin d'irradiation ;
- jusqu'à 35 GWj.t⁻¹, les courbes UOx2 et UOx4 sont identiques : le raffinement par pas de 1 GWj.t⁻¹ entre 20 GWj.t⁻¹ et 35 GWj.t⁻¹ n'est pas nécessaire ;
- l'écart entre la courbe UOx d'une part et les courbes UOx2 et UOx4 d'autre part est principalement observé à partir de 30 GWj.t⁻¹.

Les *ListBU* retenues pour les cellules sans gadolinium sont UOx4 pour 22AU_22UOx et UOx2 pour les autres. Elles sont détaillées dans le tableau 4.6 ci-dessous.

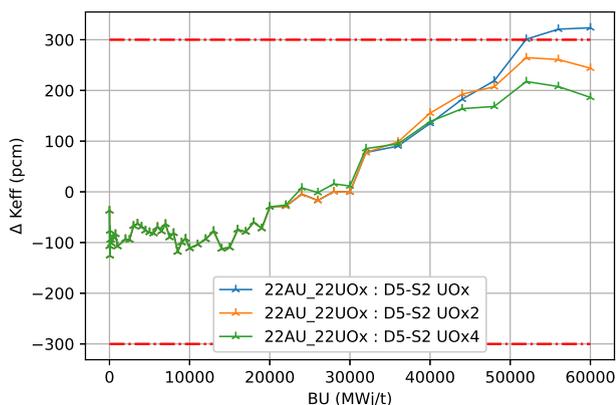


FIGURE 4.32 – Influence du raffinement de *ListBU* sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 22AU_22UOx.

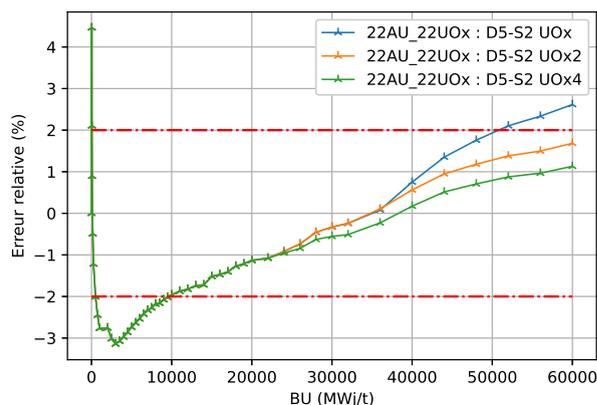


FIGURE 4.33 – Influence du raffinement de *ListBU* sur l'écart D5-S2 de $[^{155}\text{Gd}]$ pour la cellule 22AU_22UOx.

0.0	0.03	0.05	0.075	0.15	0.25	0.5	0.75	1.0	2.0
2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0
7.5	8.0	8.5	9.0	9.5	10.0	11.0	12.0	13.0	14.0
15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	22.0	24.0	26.0	28.0
30.0	32.0	33.0	34.0	35.0	36.0	37.0	38.0	39.0	40.0
41.0	42.0	43.0	44.0	45.0	46.0	47.0	48.0	49.0	50.0
51.0	52.0	53.0	54.0	55.0	56.0	57.0	58.0	59.0	60.0

TABLE 4.6 – Discrétisation en burn-up (GWj.t^{-1}) avec DRAGON5, utilisée pour les cellules sans gadolinium. Les pas de burn-up en orange sont ajoutés à la liste UOx pour former la liste UOx2. Les pas de burn-up en vert sont ajoutés à la liste UOx2 pour former la liste UOx4.

4.5.3.2 Cellules avec gadolinium

La même étude d'optimisation a été menée sur les deux cellules avec gadolinium. L'augmentation du nombre de pas de *ListBU*, en particulier en début d'irradiation, accentue l'amplitude du pic précédemment constaté en figure 4.25. La diminution du nombre de pas de *ListBU* diminue l'amplitude de ce pic, mais en crée un deuxième dans les valeurs positives qui compense l'erreur soustraite au premier pic. Il a donc été choisi de garder, pour les calculs DRAGON5, la même *ListBU* que pour les calculs Serpent2 (tableau 3.2). **La *ListBU* retenue pour les cellules avec gadolinium est la liste Gd.**

4.5.4 Isotopes autoprotégés

L'autoprotection est une étape primordiale du calcul déterministe dont les paramètres d'exécution peuvent faire varier le résultat de plusieurs centaines de pcm. Cette sous-section évalue l'impact du choix des isotopes à autoprotéger sur la précision des calculs DRAGON5. L'étude est menée de manière différenciée sur les cellules avec et sans gadolinium.

4.5.4.1 Cellules sans gadolinium

Pour les cellules sans gadolinium, cinq options d'autoprotection sont étudiées et détaillées dans le tableau 4.7 : miniUOx, interUOx_1, interUOx_2, interUOx_3 et maxUOx. Ces cinq options permettent d'évaluer le poids de chaque groupe identifié d'isotopes d'intérêt.

Les figures 4.34 et 4.35 comparent respectivement l'écart DRAGON5-Serpent2, des calculs réalisés avec les cinq options d'autoprotection, sur le k_{eff} et $[^{235}\text{U}]$, pour la cellule 40AU_40UOx, de 0 à 60

Cellules sans gadolinium						
Élément	Isotope	miniUOx	interUOx_1	interUOx_2	interUOx_3	maxUOx
U	²³⁸ U	x	x	x	x	x
	²³⁶ U					x
	²³⁵ U	x	x	x	x	x
Pu	²⁴² Pu			x	x	x
	²⁴¹ Pu		x	x	x	x
	²⁴⁰ Pu			x	x	x
	²³⁹ Pu		x	x	x	x
Zr	⁹⁶ Zr				x	x
	⁹⁴ Zr				x	x
	⁹² Zr		x	x	x	x
	⁹¹ Zr		x	x	x	x
	⁹⁰ Zr		x	x	x	x
Gd	¹⁶⁰ Gd					x
	¹⁵⁸ Gd					x
	¹⁵⁷ Gd					x
	¹⁵⁶ Gd					x
	¹⁵⁵ Gd					x
	¹⁵⁴ Gd					x

TABLE 4.7 – Détail des options d'autoprotection pour une cellule sans gadolinium.

GWj.t^{-1} . On constate que l'option `interUOx_1` présente un gain substantiel sur le k_{eff} , d'environ 100 pcm, par rapport à l'option `miniUOx`. De même, l'option `interUOx_2` permet de gagner environ 20 pcm sur le k_{eff} . Le gain réalisé avec l'option `maxUOx` est négligeable. Ces figures nous permettent de conclure sur la nécessité d'autoprotéger en plus de l'²³⁸U et l'²³⁵U, l'ensemble des isotopes du zirconium présents dans les gaines du réacteur. **Pour les cellules sans gadolinium, la liste des isotopes à autoprotéger correspond à la colonne `interUOx_3` du tableau 4.7.**

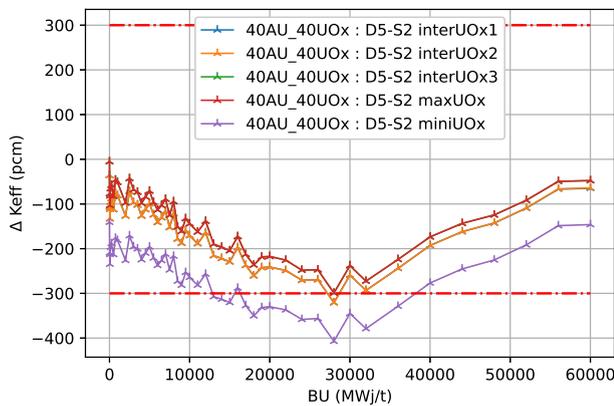


FIGURE 4.34 – Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 40AU_40UOx.

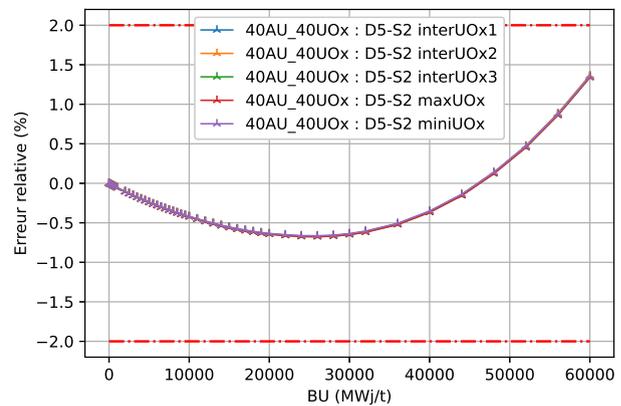


FIGURE 4.35 – Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 40AU_40UOx.

4.5.4.2 Cellules avec gadolinium

Pour les cellules avec gadolinium, les résultats de l'étude sur les cellules sans gadolinium sont repris pour former la liste minimale d'isotopes à autoprotéger : miniGd. Huit options d'autoprotection sont étudiées afin d'évaluer le poids de chacun des isotopes du gadolinium présents dans les crayons de KML2. Ces options sont détaillées dans le tableau 4.8 ci-dessous.

Cellules avec gadolinium									
Élément	Isotope	miniGd	Gd_1	Gd_2	Gd_3	Gd_4	Gd_5	Gd_6	maxGd
U	²³⁸ U	x	x	x	x	x	x	x	x
	²³⁶ U								x
	²³⁵ U	x	x	x	x	x	x	x	x
Pu	²⁴² Pu								x
	²⁴¹ Pu	x	x	x	x	x	x	x	x
	²⁴⁰ Pu								x
	²³⁹ Pu	x	x	x	x	x	x	x	x
Zr	⁹⁶ Zr	x	x	x	x	x	x	x	x
	⁹⁴ Zr	x	x	x	x	x	x	x	x
	⁹² Zr	x	x	x	x	x	x	x	x
	⁹¹ Zr	x	x	x	x	x	x	x	x
	⁹⁰ Zr	x	x	x	x	x	x	x	x
Gd	¹⁶⁰ Gd							x	x
	¹⁵⁸ Gd						x	x	x
	¹⁵⁷ Gd					x	x	x	x
	¹⁵⁶ Gd				x	x	x	x	x
	¹⁵⁵ Gd			x	x	x	x	x	x
	¹⁵⁴ Gd		x	x	x	x	x	x	x

TABLE 4.8 – Détail des options d'autoprotection pour une cellule avec gadolinium.

Les figures 4.36 et 4.37 comparent respectivement l'écart DRAGON5-Serpent2 sur le k_{eff} et [¹⁵⁷Gd] pour la cellule 39AWU_33Gd de 0 à 60 GWj.t⁻¹, des calculs réalisés avec les huit options d'autoprotection.

On constate sur ces figures que les options d'autoprotection mini_Gd, Gd_1 et Gd_2 présentent des résultats similaires et qui s'écartent considérablement des résultats de Serpent2. Autoprotéger seulement les isotopes 155 et 157 du gadolinium n'est pas suffisant. À partir de l'option Gd_3, les résultats de DRAGON5 montrent de nets signes d'amélioration, en particulier en fin d'irradiation.

Au vu des résultats de cette étude, il est nécessaire d'autoprotéger l'ensemble des isotopes du gadolinium présents dans les crayons de KML2 pour minimiser les écarts avec Serpent2. **L'option d'autoprotection retenue pour les cellules avec du gadolinium est Gd_6.**

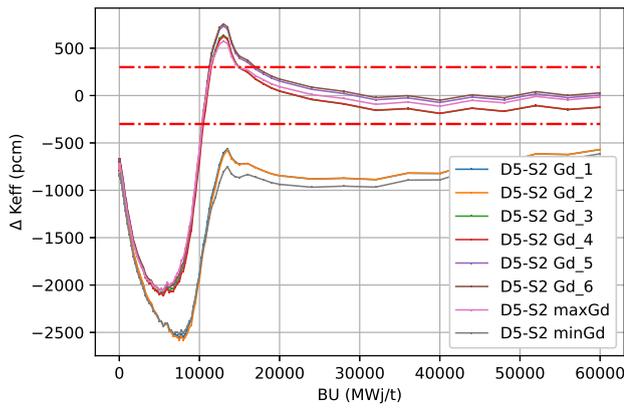


FIGURE 4.36 – Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 de k_{eff} pour la cellule 39AWU_33Gd.

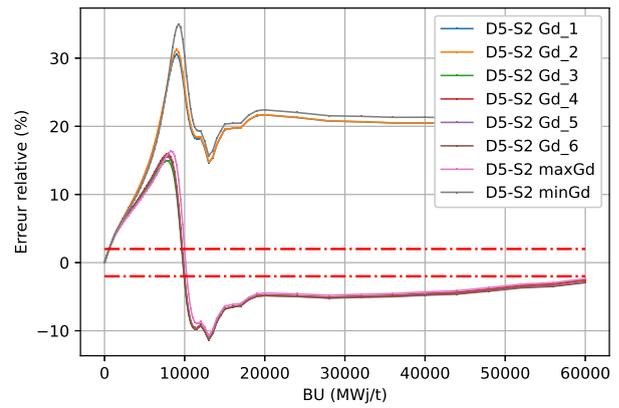


FIGURE 4.37 – Influence de la liste des isotopes autoprotégés sur l'écart D5-S2 de $[^{157}\text{Gd}]$ pour la cellule 39AWU_33Gd.

4.5.5 Pas d'autoprotection : *ListAUTOP*

L'étape d'autoprotection, réalisée de manière fine, est coûteuse en temps de calcul. Lorsque la concentration des isotopes résonants ne varie pas trop brusquement, il est alors intéressant de ne pas autoprotéger la librairie d'isotopes à chaque pas de *ListBU*. Cette sous-section présente l'étude de la dégradation de *ListAUTOP*, la liste des pas de burn-up auxquels est effectué le calcul d'autoprotection, sur les résultats de DRAGON5. L'étude est réalisée de manière différenciée pour des cellules sans et avec gadolinium. Le détail des *ListAUTOP* est fourni dans le tableau 4.9. Les figures 4.38 et 4.39 présentent les résultats pour une cellule avec gadolinium, les figures 4.40 et 4.41 les résultats pour une cellule sans gadolinium.

Type de cellule	Nom <i>ListAUTOP</i>	Pas de BU autoprotégés
Avec gadolinium	autop0	Tous : 79 pas
	autop1 - autop3	Variable de 20 pas à 3 pas
	autop4	BU0 : 1 pas
Sans gadolinium	autop0	Tous : 48 pas
	autop2 - autop13	Variable de 24 pas à 3 pas
	autop14	BU0 : 1 pas

TABLE 4.9 – Détail des *ListAUTOP*.

Pour les cellules gadolinium, on constate sur les figures 4.38 et 4.39 que l'option autop4 dégrade notablement les calculs. Toutes les autres *ListAUTOP* sont sensiblement équivalentes et ne dégradent que faiblement les calculs (k_{eff} : +30 pcm et $[^{235}\text{U}]$: +0.1%). Pour les cellules sans gadolinium, on constate sur les figures 4.40 et 4.41 que toutes les options dégradées de *ListAUTOP* sont sensiblement équivalentes et ne dégradent que faiblement les calculs (k_{eff} : +40 pcm et $[^{235}\text{U}]$: +0.3%).

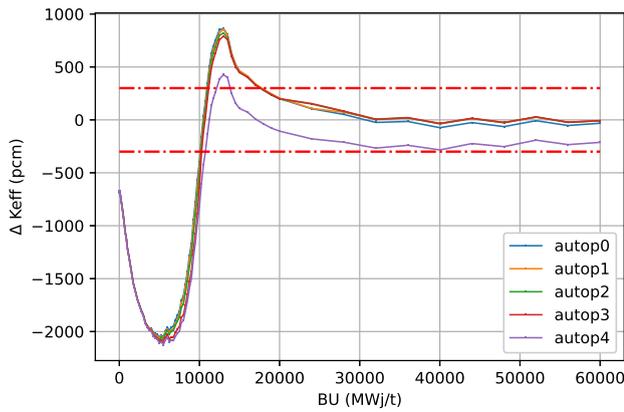


FIGURE 4.38 – Influence de la dégradation de *ListAUTOP* sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 39AWU_33Gd.

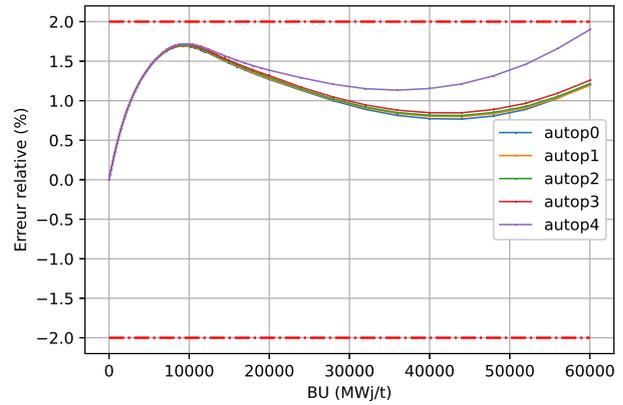


FIGURE 4.39 – Influence de la dégradation de *ListAUTOP* sur l'écart de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_33Gd.

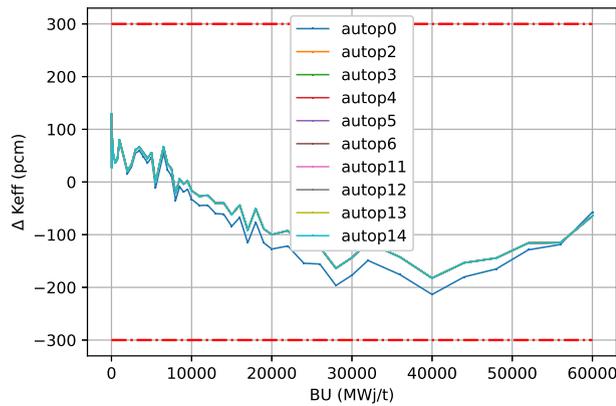


FIGURE 4.40 – Influence de la dégradation de *ListAUTOP* sur l'écart D5-S2 du k_{eff} de la cellule 39AWU_40UOx.

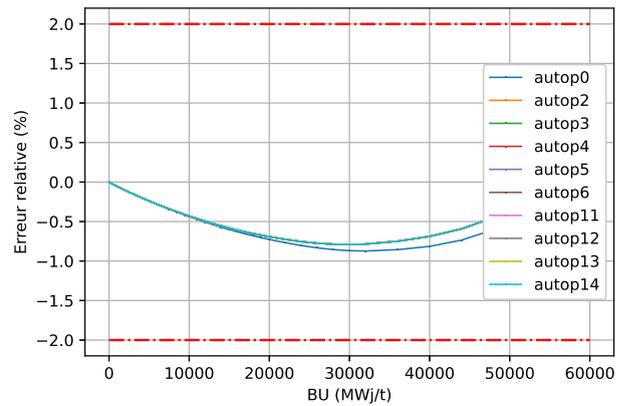


FIGURE 4.41 – Influence de la dégradation de *ListAUTOP* sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx.

Les *ListAUTOP* retenues pour les calculs DRAGON5 sont présentées dans le tableau 4.10 ci-dessous.

Type de cellule	<i>ListAUTOP</i> retenue	Pas de BU autoprotégés
Avec gadolinium	autop3	3 pas : 1.0 - 10.0 - 20.0 GWj.t ⁻¹
Sans gadolinium	autop5	3 pas : 5.5 - 17.0 - 34.0 GWj.t ⁻¹

TABLE 4.10 – *ListAUTOP* retenues pour les calculs DRAGON5.

4.5.6 Paramètres de tracking ($an2d$; $densur$)

Lorsque le tracking est effectué avec le module SALT:, deux paramètres jouent un rôle majeur sur la précision des calculs [8] :

- $an2d$: paramètre de quadrature angulaire, dans le cas d'une réflexion spéculaire en réseau hexagonal 2D, les valeurs peuvent être 3, 6, 12 ou 18;
- $densur$: valeur réelle représentant la densité des lignes d'intégration.

Ces deux paramètres doivent être étudiés de manière conjointe car ils forment un couple qui détermine le nombre de lignes d'intégration générées pour le tracking. Cette sous-section présente l'impact de ce

couple de paramètres sur la précision des calculs DRAGON5.

Les figures 4.42 (resp. 4.43) et 4.44 (resp. 4.45) illustrent l'influence du raffinement de *densur* sur l'écart DRAGON5-Serpent2 pour la cellule 39AWU_40UOx, lorsque les calculs sont réalisés avec *an2d*=12 (resp. 18). On constate sur ces figures que les couples supérieurs à (12; 25) et (18; 25) permettent d'améliorer de manière significative la précision des calculs, tant sur le k_{eff} que sur les N_i .

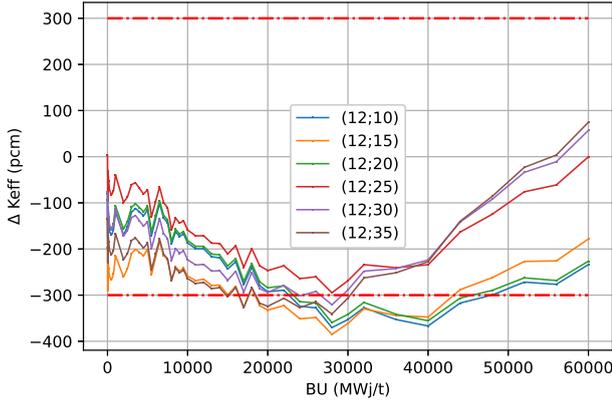


FIGURE 4.42 – Influence du raffinement de *densur* sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx, *an2d*=12.

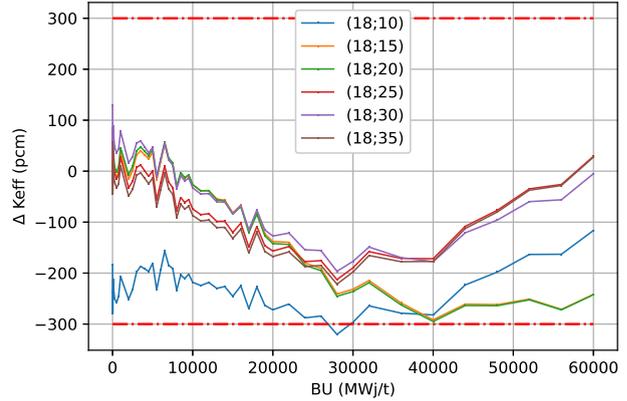


FIGURE 4.43 – Influence du raffinement de *densur* sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx, *an2d*=18.

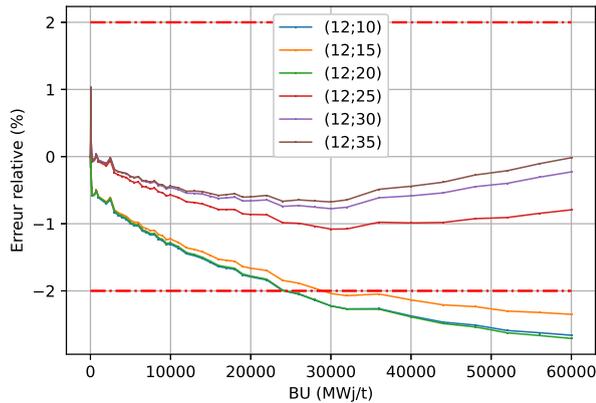


FIGURE 4.44 – Influence du raffinement de *densur* sur l'écart D5-S2 de $[^{135}\text{Xe}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx, *an2d*=12.

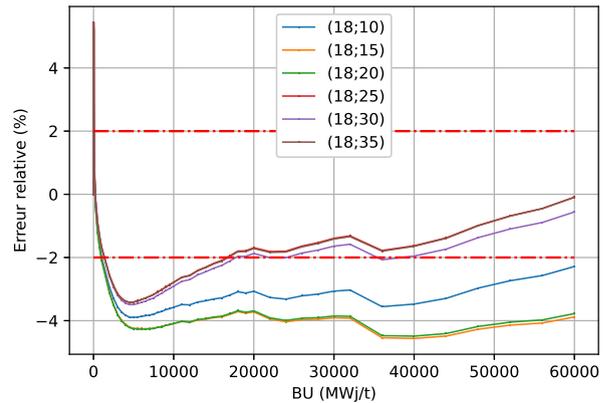


FIGURE 4.45 – Influence du raffinement de *densur* sur l'écart D5-S2 de $[^{155}\text{Gd}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx, *an2d*=18.

Afin de définir le couple optimal, les figures 4.46 et 4.47 ci-dessous reprennent les résultats des meilleurs couples définis ci-dessus. On constate que les couples (18; 25) et (18; 35) donnent des résultats similaires, tant sur le k_{eff} que sur les N_i , et plus précis que ceux des couples (12; 30) et (12; 35). **Lorsque le coût de calcul est raisonnable, les paramètres de tracking (18; 25) sont à privilégier pour améliorer la précision des résultats DRAGON5.**

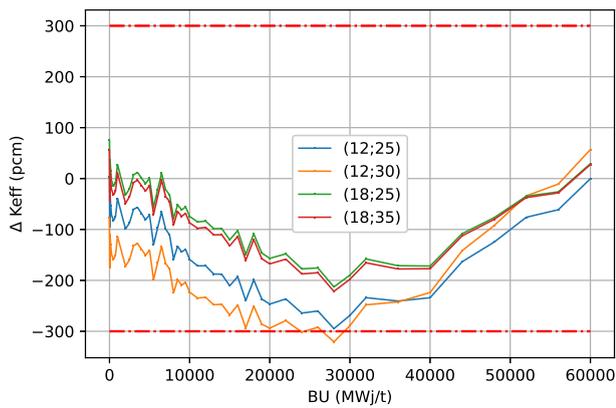


FIGURE 4.46 – Influence du raffinement de *densur* sur l'écart D5-S2 du k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx, $an2d=12$ et 18.

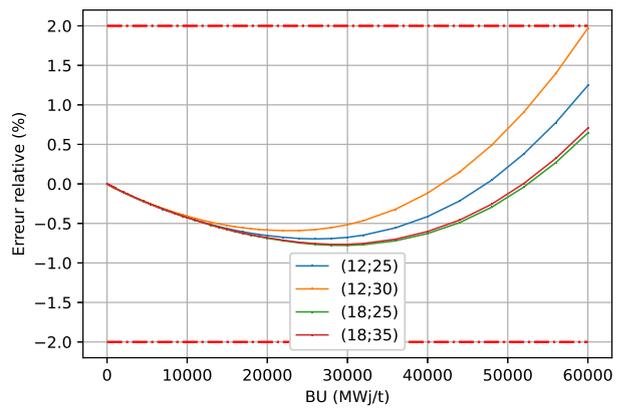


FIGURE 4.47 – Influence du raffinement de *densur* sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx, $an2d=12$ et 18.

4.5.7 Méthode de résolution : P_{ij} ou MOC

Le choix de la méthode de résolution de l'équation du transport revêt une importance majeure. Alors que la méthode P_{ij} simplifie les interactions neutroniques, la méthode MOC offre une modélisation plus précise en prenant en compte l'anisotropie de la diffusion et permet une réduction du coût de calcul si le nombre de volumes est élevé. Ces propriétés inhérentes à la méthode MOC sont particulièrement intéressantes à l'échelle de l'assemblage, objet qui présente de nombreuses hétérogénéités spatiales, surtout lorsqu'il contient des crayons empoisonnés au gadolinium. Cette sous-section compare les résultats des calculs DRAGON5 par la méthode P_{ij} ou MOC sur une cellule sans gadolinium : 39AWU_40UOx. Pour chaque méthode de résolution, un jeu de paramètres optimisés TSPC est utilisé. Les résultats de cette étude sont illustrés sur les figures 4.48 et 4.49 ci-dessous.

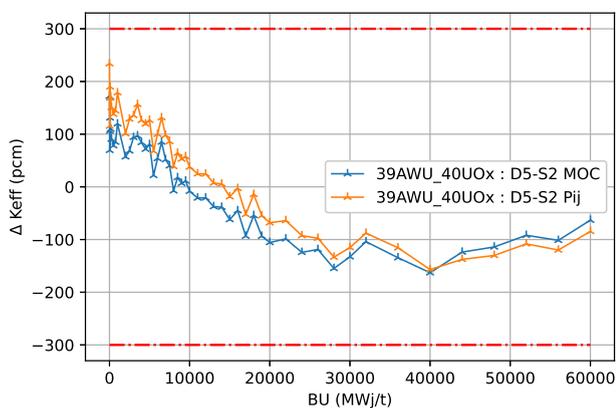


FIGURE 4.48 – Influence de la méthode de résolution sur l'écart D5-S2 sur le k_{eff} pour la cellule 39AWU_40UOx.

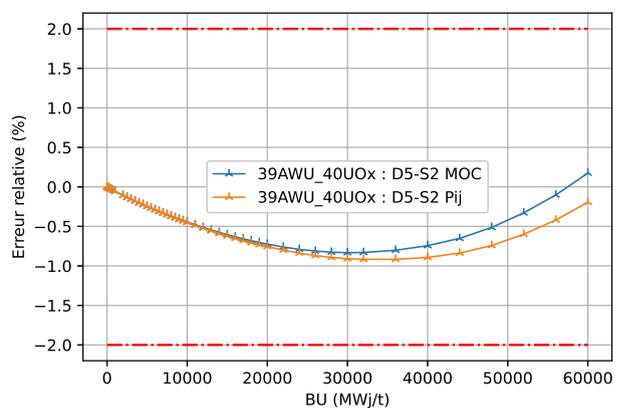


FIGURE 4.49 – Influence de la méthode de résolution sur l'écart D5-S2 de $[^{235}\text{U}]$ pour la cellule 39AWU_40UOx.

Les résultats obtenus sont proches. Le seul avantage présenté par la méthode MOC, à l'échelle de la cellule, est une meilleure évaluation du k_{eff} en début d'irradiation, d'environ 50 pcm. Toutefois, pour les raisons évoquées au paragraphe précédent, **il est décidé de garder la méthode MOC en vue de la réalisation des calculs à l'échelle de l'assemblage.**

4.5.8 Résultats de l'optimisation à l'échelle de la cellule

Les résultats de l'étude d'optimisation à l'échelle de la cellule sont résumés dans le tableau 4.11 ci-dessous qui détaille le jeu de paramètres optimaux pour chaque type de cellule identifié. Ces jeux de

paramètres sont repris pour effectuer les premiers calculs d'assemblage. Ces paramètres peuvent être modifiés dans l'optique d'une réduction des écarts à la référence Serpent2 ou d'une réduction du temps de calcul.

Cellule	Méthode	Condition limite	(an2d ; densur)	Isotopes autoprotégés	ListBU	ListAUTOP
22AU_22UOx	MOC	TSPC	(18 ; 25)	interUOx_3	UOx4	autop5
40AU_40UOx	MOC	TSPC	(18 ; 25)	interUOx_3	UOx2	autop5
439GT_44UOx	MOC	TSPC	(18 ; 25)	interUOx_3	UOx2	autop5
39AWU_40UOx	MOC	TSPC	(18 ; 25)	interUOx_3	UOx2	autop5
39AWU_36UOx	MOC	TSPC	(18 ; 25)	interUOx_3	UOx2	autop5
439GT_36Gd	MOC	TSPC	(18 ; 25)	Gd_6	Gd	autop3
39AWU_33Gd	MOC	TSPC	(18 ; 25)	Gd_6	Gd	autop3

TABLE 4.11 – Paramètres optimaux pour le schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule.

4.6 Résultats finaux

Les résultats finaux, obtenus pour les cellules de référence, sont présentés en deux temps. Tout d'abord les cellules UOx, enrichies entre 2.2% et 4.4% d' ^{235}U , puis les deux cellules Gd.

4.6.1 Cellules sans gadolinium

Les figures 4.50 et 4.51 illustrent respectivement les écarts finaux sur le k_{eff} et ^{235}U entre les codes DRAGON5 et Serpent2 pour les cellules UOx. Pour la cellule 22AU_22UOx, l'écart observé sur le k_{eff} dans la figure 4.50 reste inférieur à 200 pcm sur la totalité du burn-up après optimisation, là où ce dernier dépassait les 300 pcm dès 30 GWj.t^{-1} et atteignait plus de 600 pcm en fin de burn-up. Concernant les observations sur l' ^{235}U pour cette même cellule, l'écart sur ^{235}U dépasse toujours les 2.0% mais plus tard dans le burn-up, à 47 GWj.t^{-1} au lieu des 33 GWj.t^{-1} initiaux, comme le montre la figure 4.51. L'écart maximal est quant à lui réduit, passant de 8.5% à 3.5% en fin de combustion. La forme globale est inchangée.

Les résultats sur le k_{eff} des cellules plus fortement enrichies, autour de 4.0%, sont nettement améliorés, validant toujours la condition $\Delta k_{eff} < 300$ pcm. Les courbes 4.50 sont globalement aplanies et l'écart type est diminué de moitié. L'accord sur le k_{eff} est obtenu en évolution.

La forme des résultats obtenus pour l' ^{235}U , après optimisation, est similaire avec un écart type plus faible. Les écarts sont inférieurs à 1.0% pour un enrichissement supérieur à 2.2%. L'accord sur ^{235}U est obtenu en évolution, excepté pour la cellule 22AU_22UOx.

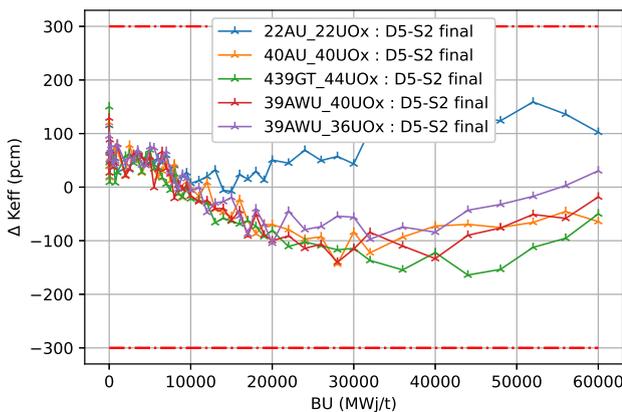


FIGURE 4.50 – k_{eff} : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules UOx.

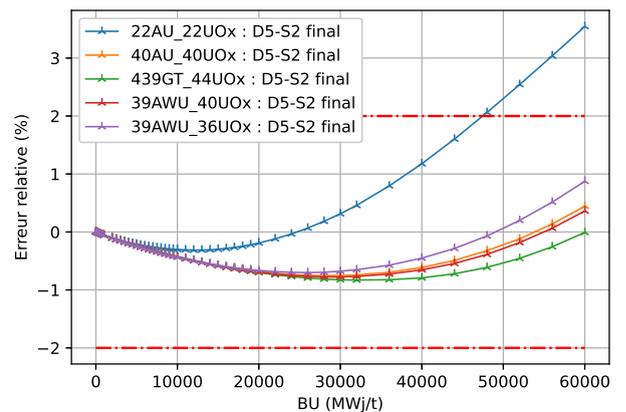


FIGURE 4.51 – ^{235}U : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules UOx.

Les figures 4.52 et 4.53 rendent compte des écarts pour les isotopes ^{239}Pu et ^{155}Gd . Excepté le pic initial, le critère $[\text{}^{239}\text{Pu}] < 2.0\%$ est validé sur l'ensemble du burn-up, là où l'accord n'était jamais obtenu pour les résultats initiaux, comme illustré sur la figure 4.23. De nouveau, la moyenne des écarts diminue, passant de 3.0% initialement à 1.0% après les travaux d'optimisation. Enfin, une légère dégradation des écarts sur le ^{155}Gd est observé en début de burn-up, cependant l'écart type est nettement diminué à partir de 15 GWj.t^{-1} affichant une valeur absolue quasi stationnaire à 2.0%. L'accord est obtenu sur $[\text{}^{239}\text{Pu}]$ en évolution mais ne l'est toujours pas sur $[\text{}^{155}\text{Gd}]$.

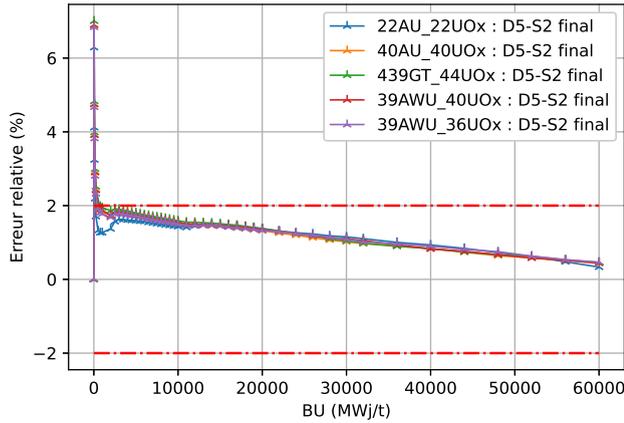


FIGURE 4.52 – $[\text{}^{239}\text{Pu}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules UOx.

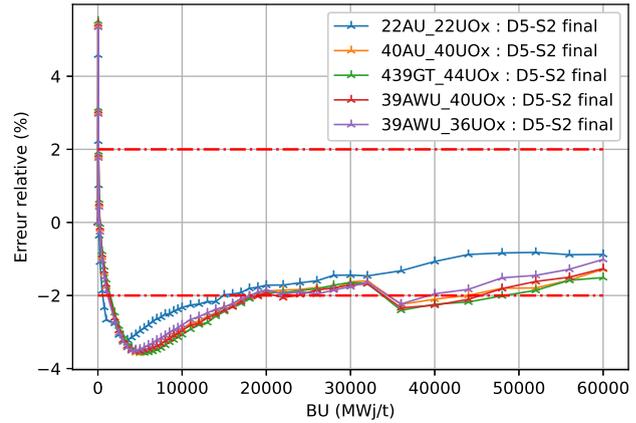


FIGURE 4.53 – $[\text{}^{155}\text{Gd}]$: écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules UOx.

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 4.12 rend compte des résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

Isotopes	
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe
Absence d'accord : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{235}U , ^{155}Gd et ^{157}Gd
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$, moyenné sur les actinides	2.6%
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$	^{157}Gd : 6.0% en début de BU

TABLE 4.12 – Écarts finaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules UOx.

Les résultats finaux après optimisation mettent en exergue les points suivants :

- amélioration des résultats sur le k_{eff} : $\Delta k_{eff} < 200$ pcm ;
- amélioration des résultats sur l'ensemble des N_i : accords supplémentaires sur trois isotopes (en **gras** dans le tableau 4.12) ;
- impact majeur du raffinement des pas de burn-up à partir de 30 GWj.t^{-1} ;
- impact moindre des paramètres de tracking, d'autoprotection, de conditions aux frontières et de solveur.

4.6.2 Cellules avec gadolinium

Les figures 4.54 à 4.57 illustrent les résultats obtenus, après optimisation, pour des cellules gadolinium dont l'enrichissement en ^{235}U varie entre 3.3% et 3.6%.

Tout comme dans la partie 4.4.2.3, avant les travaux d'optimisation, les écarts observés sur le k_{eff} en figure 4.54 restent localement supérieurs à 300 pcm. L'écart maximal, à 10 GWj.t^{-1} , est moitié moins

élevé, $\Delta k_{eff} = 2000$ pcm. La courbe est davantage stabilisée en fin de burn-up, l'écart type décroît. On observe toutefois $\Delta k_{eff} < 300$ pcm à partir de 18 GWj.t^{-1} . L'écart à burn-up initial (≈ -700 pcm), imputé au calcul d'autoprotection, est encore présent. L'accord sur le k_{eff} n'est toujours pas obtenu en évolution.

Tout comme observé sur les cellules UOx, la forme des écarts obtenus pour l' ^{235}U dans la figure 4.55 est aplanie après optimisation. L'amélioration des écarts est conséquente avec un écart maximal abaissé à 1.7% à 10 GWj.t^{-1} . L'accord sur ^{235}U est obtenu en évolution.

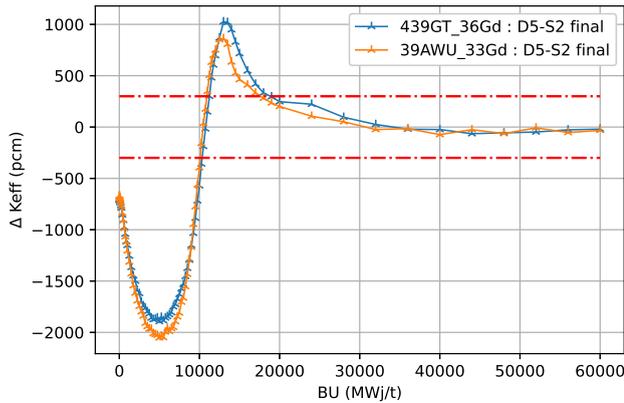


FIGURE 4.54 – k_{eff} : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules Gd.

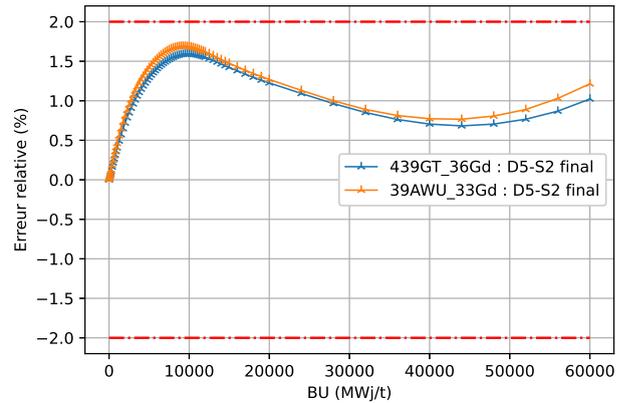


FIGURE 4.55 – ^{235}U : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules Gd.

Concernant le ^{241}Pu , les améliorations sont négligeables. Malgré le lissage de la courbe 4.56 en fin de burn-up, il est difficile de déceler de nettes améliorations du fait du pic initial inchangé. L'écart maximal observé est supérieur à 35.0% pour la cellule 39AWU_33Gd.

Enfin, l'écart maximal observé sur le ^{157}Gd diminue fortement, atteignant moins de 15.0% dans la figure 4.57. À partir de 20 GWj.t^{-1} , le palier initial à 30.0% tombe à 5.0% d'écart absolu. L'accord sur ^{241}Pu et ^{157}Gd reste mauvais en évolution.

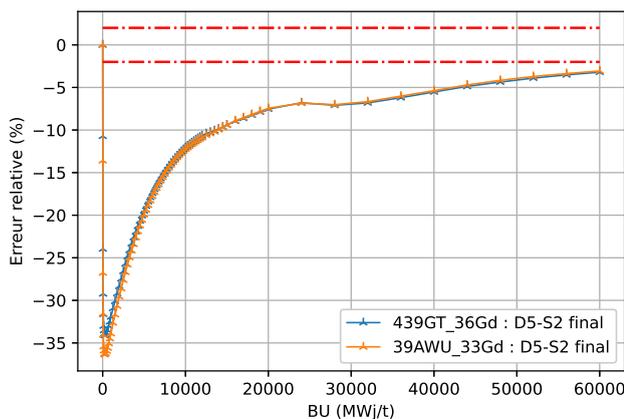


FIGURE 4.56 – ^{241}Pu : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules Gd.

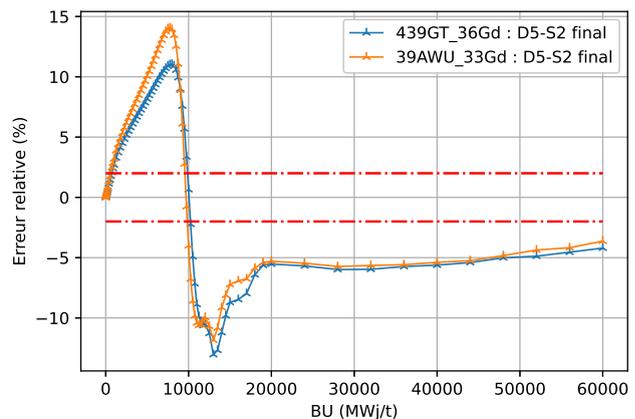


FIGURE 4.57 – ^{157}Gd : écarts finaux D5-S2 de 0 à 60 GWj.t^{-1} pour les cellules Gd.

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 4.13 rend compte des résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

Pour conclure sur les cellules gadolinium, malgré de très nettes améliorations tant sur le k_{eff} que sur les N_i , comme en témoignent les figures et le tableau précédents, la discordance des résultats

Isotopes	
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{235}U , ^{238}U
Absence d'accord : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{236}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{149}Sm et ^{135}Xe
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$, moyenné sur les actinides	18.2%
$\max(\Delta N_i(\text{BU}))$	^{242}Pu : 41.2% début de BU

TABLE 4.13 – Écarts finaux observés sur les N_i entre D5 et S2 pour les cellules Gd.

DRAGON5 et Serpent2 reste conséquente à l'échelle de la cellule. Les objectifs initiaux, $\Delta k_{eff} < 300$ pcm et $\Delta N_i < 2.0\%$, ne sont pas respectés.

4.7 Conclusion

Le tableau 4.14 résume l'évolution des accords obtenus entre les résultats DRAGON5 et Serpent2 après l'optimisation du schéma de calcul DRAGON5 à l'échelle de la cellule. Le symbole \rightarrow signifie que l'accord a été obtenu après l'optimisation DRAGON5. En absence de \rightarrow , l'accord est inchangé.

Cellule	k_{eff}	^{235}U	^{236}U	^{238}U	^{239}Pu	^{240}Pu	^{241}Pu	^{242}Pu	^{135}Xe	^{149}Sm	^{155}Gd	^{157}Gd
22AU_22UOx	x→v	x	v	v	x→v	v	v	x→v	v	x→v	x	x
40AU_40UOx	v	x→v	v	v	x→v	v	x→v	x→v	v	v	x	x
439GT_44UOx	v	v	v	v	x→v	v	x→v	x→v	v	v	x	x
39AWU_36UOx	x→v	x→v	v	v	x→v	v	x→v	x→v	v	v	x	x
39AWU_40UOx	v	x→v	v	v	x→v	v	x→v	x→v	v	v	x	x
439GT_36Gd	x	x→v	x	v	x	x	x	x	x	x	x	x
39AWU_33Gd	x	x→v	x	v	x	x	x	x	x	x	x	x

TABLE 4.14 – Validation des critères sur le k_{eff} et les N_i pour les sept cellules modélisées, avant et après l'optimisation effectuée sur le schéma de calcul D5.

Comme explicité dans le tableau 4.14, après les travaux d'optimisation détaillés dans la section 4.5, l'écart maximal sur le k_{eff} ne dépasse jamais les 300 pcm sur les cellules UOx. Pour ces mêmes cellules, un écart relatif inférieur à 2.0% est observé sur tous les isotopes à l'exception de ceux du gadolinium et de ^{235}U pour la cellule 22AU_22UOx. Ces résultats obtenus pour les cellules sans gadolinium présagent de bons accords à l'échelle de l'assemblage, tant sur les valeurs globales, telles que le k_{eff} et les N_i , que sur les valeurs locales, telles que les taux de réactions, pour les assemblages sans cellule gadolinium.

Concernant les cellules avec gadolinium, l'optimisation permet uniquement d'obtenir un accord supplémentaire sur ^{235}U . Le k_{eff} et la majorité des isotopes ne respectent toujours pas les critères de validation. Cependant, ces résultats permettent de valider les travaux de comparaison à l'échelle de la cellule et de s'intéresser dorénavant à l'échelle de l'assemblage. En effet, comme mentionné dans le tableau 2.2 de la section 2.1, les assemblages étudiés contiennent un maximum de neuf cellules avec gadolinium sur les 312 cellules combustibles. Ainsi, les résultats obtenus à l'échelle de la cellule laissent présager de bons accords à l'échelle de l'assemblage sur les valeurs globales, mais d'une convergence limitée sur les valeurs locales à proximité des hétérogénéités, telles que les cellules contenant du gadolinium.

CHAPITRE 5 À L'ÉCHELLE DE L'ASSEMBLAGE

5.1 Introduction

La première étape du processus de validation de DRAGON5 par Serpent2 à l'échelle de la cellule est acquise. La seconde et ultime étape réside dans la validation des résultats à l'échelle de l'assemblage complet.

Cette étape de validation est effectuée selon deux axes. Premièrement, tout comme pour les travaux à l'échelle de la cellule, la démarche de validation consiste à obtenir l'accord entre les valeurs globales (k_{eff} et N_i), sur l'ensemble de la combustion. Les isotopes étudiés sont identiques à ceux validés à l'échelle de la cellule. Ensuite, pour les calculs d'assemblage, s'ajoute à l'accord sur les valeurs globales celui sur les valeurs locales, pour chaque cellule de l'assemblage et sur l'ensemble de la combustion. Le choix est fait de s'intéresser aux taux de réaction moyennés sur les isotopes d'intérêt :

- taux de fission : ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu ;
- taux de capture radiative : ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu , ^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{135}Xe et ^{149}Sm .

Les taux de réaction sont notés τ_{r,i,BU_n} , avec les notations suivantes :

- r : le type de réaction, f pour la fission et c pour la capture radiative ;
- i : le numéro du groupe d'énergie, 1 pour le groupe rapide et 2 pour le groupe lent ;
- BU_n : le $n^{\text{ème}}$ pas de burn-up.

Cette comparaison est faite à deux groupes d'énergie, un groupe lent et un groupe rapide dont la frontière est établie à 625 meV. Les assemblages simulés sont les assemblages de référence présentés dans la section 2.2. Une présentation des schémas de calcul Serpent2 et DRAGON5 est effectuée dans les sections 5.2 et 5.3, suivie de l'exploitation des résultats obtenus.

5.2 Schéma de calcul Serpent2

Cette section présente les principales options utilisées dans le schéma de calcul Serpent2 afin d'assurer une précision des résultats suffisante tout en optimisant les temps de calculs. Elle introduit les géométries d'assemblages, au travers des symétries triangle et losange. Les particularités des géométries, comme la présence des stiffeners, sont ainsi développées. Enfin, les détecteurs utilisés dans Serpent2 afin d'assurer la comparaison avec le code DRAGON5, sont détaillés.

Pour les calculs d'assemblage, les géométries des cellules Serpent2 présentées en sous-section 4.2.1 sur les figures 4.1 et 4.2 sont légèrement modifiées. En effet, le gap, non simulé à l'échelle de l'assemblage, est homogénéisé avec la gaine pour conserver la masse, conformément à la sous-section 2.4.1. Dans le code Serpent2, les cellules des assemblages sont décrites individuellement et la composition des matériaux renseignée cellule par cellule puis couronne par couronne. Le nombre de cellules distinctes varie selon que la symétrie soit triangulaire, avec rotation de 60° , ou losangique avec rotation de 120° , comme illustré dans le tableau 5.1.

	Symétrie triangle	Symétrie losange
Assemblages	22AU, 40AU et 398GO	39AWU
Nombre de cellules génératrices	52 (numérotées de 002 à 065)	104 (numérotées de 002 à 111)

TABLE 5.1 – Cellules génératrices en fonction du type d'assemblage.

Les figures 5.1 et 5.2 représentent respectivement les géométries tracées par Serpent2 pour les assemblages KML2_22AU, symétrie triangulaire et KML2_39AWU, symétrie losangique. Les cellules de même coloris sur les figures sont celles définies avec un numéro similaire dans le schéma de calcul Serpent2, car situées dans un environnement strictement identique.

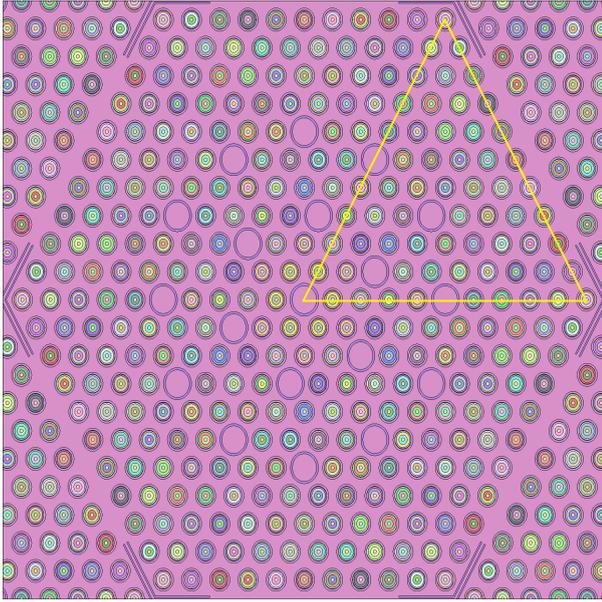


FIGURE 5.1 – Géométrie d'assemblage Serpent2 : KML2_22AU.

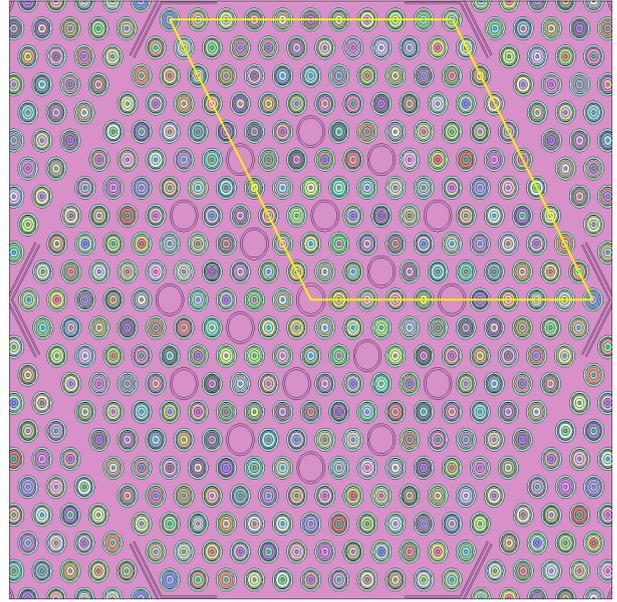


FIGURE 5.2 – Géométrie d'assemblage Serpent2 : KML2_39AWU.

Les formes hexagonales dans les angles des assemblages représentent les stiffeners, introduits dans la sous-section 2.4.2. La figure 5.3 donne un aperçu précis de ces éléments de maintien. La couleur de ces derniers est identique à celle des TG et du TI car ils sont composés du même matériau de cladding E_635, décrit dans le document [5]. Cette figure atteste de la bonne représentation de ces derniers par le code de calcul Serpent2.

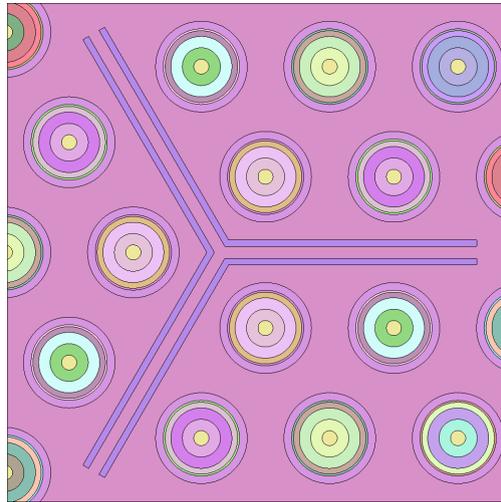


FIGURE 5.3 – Représentation des stiffeners à l'intersection de trois assemblages en géométrie Serpent2.

Enfin, les paramètres des détecteurs utilisés dans le schéma de calcul Serpent2 sont justifiés par l'optimisation du temps de calcul et la possibilité d'une utilisation ultérieure des résultats à l'échelle du cœur entier. Ainsi, et afin de représenter les nappes de puissance, les choix suivants sont réalisés dans l'exploitation des détecteurs :

- détecteurs à deux groupes d'énergie : 1^{er} groupe de 1.100×10^{-11} à 6.250×10^{-7} MeV et 2^{ème} groupe de 6.250×10^{-7} à 1.964×10^1 MeV ;
- homogénéisation des quatre couronnes pour le calcul des valeurs locales (taux de réaction).

La principale justification de l'utilisation de deux groupes d'énergie provient de l'utilisation des résultats à deux groupes lors du passage à l'échelle du cœur entier.

5.3 Schémas de calcul DRAGON5

Cette section présente les schémas de calcul DRAGON5 développés pour la simulation des assemblages de KML2. L'objectif est de fournir au lecteur une description globale de ces schémas sans pour autant en détailler de manière exhaustive tous les aspects. Les points suivants sont abordés :

- les différentes géométries utilisées : autoprotection, calcul de premier niveau et de deuxième niveau ;
- les données d'entrée lorsqu'il en existe, en particulier les géométries issues de l'interface graphique ALAMOS ;
- les modules de DRAGON5 et leurs options majeures ainsi que le chaînage des modules.

Deux schémas de calcul ont été développés pour ce projet, chacun est traité de manière indépendante :

- un schéma de calcul à un seul niveau s'appuyant uniquement sur des données géométriques non-natives issues d'ALAMOS. Il est noté 100%ALAMOS ;
- un schéma de calcul à deux niveaux, semblable au schéma REL2005 [14], s'appuyant sur des données géométriques natives DRAGON5 et non-natives issues d'ALAMOS. Par souci de simplification, il est noté REL2005.

5.3.1 Schéma de calcul 100%ALAMOS

ALAMOS est la nouvelle interface utilisateur graphique (GUI), développée au CEA/SERMA à Saclay, utilisée pour construire des géométries et des maillages pour les calculs de transport de réseau à usage général (neutrons et photons) [6]. L'interface ALAMOS génère deux fichiers exploités par le schéma de calcul. Un fichier .ap3 décrivant la géométrie à proprement parler et un fichier .za qui assigne une mixture à chaque région. On distingue deux types de géométries ALAMOS, les géométries d'autoprotection (SSH) et les géométries de calcul de flux (MOC) qui sont davantage discrétisées. Ainsi, pour chaque assemblage, quatre fichiers générés par ALAMOS sont exploités par le schéma de calcul.

5.3.1.1 Géométries

Le schéma de calcul 100%ALAMOS utilise exclusivement des géométries non-natives de DRAGON5, issues de l'interface ALAMOS. L'utilisation de ces géométries présente trois avantages majeurs :

- s'affranchir de la construction de géométries natives, souvent fastidieuse, à partir des modules de DRAGON5 ;
- permettre de simuler des objets géométriques complexes, tels que les stiffeners, qu'il est impossible de générer à partir des modules de DRAGON5 ;
- s'assurer de l'exacte similitude de la géométrie utilisée par deux codes différents.

La numérotation différente des mixtures entre les géométries SSH et MOC d'ALAMOS rend pour l'instant impossible l'exploitation simultanée des deux géométries dans le même schéma de calcul DRAGON5. La même géométrie doit être utilisée pour le calcul d'autoprotection et pour le calcul de flux. Le coût de calcul de l'autoprotection sur la géométrie MOC étant bien trop grand, il est décidé, dans le cadre de ce projet, d'utiliser uniquement la géométrie SSH. Les répercussions en terme de précision des calculs sont discutées dans la section 5.5.

Les géométries ALAMOS SSH des assemblages de référence sont illustrées sur les figures 5.4 à 5.6

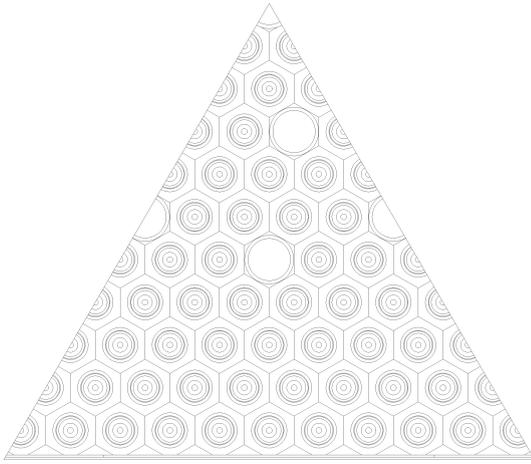


FIGURE 5.4 – Géométrie ALAMOS SSH des assemblages 22AU et 40AU.

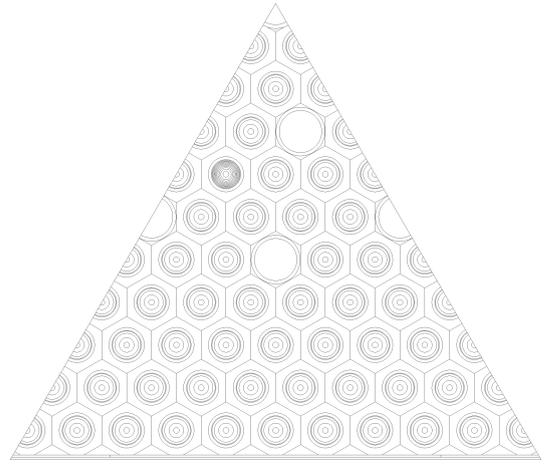


FIGURE 5.5 – Géométrie ALAMOS SSH de l'assemblage 398GO.

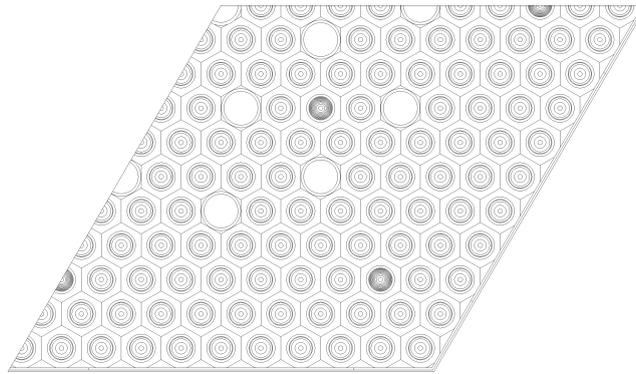


FIGURE 5.6 – Géométrie ALAMOS SSH de l'assemblage 39AWU.

5.3.1.2 Modules et chaînage

Les modules de DRAGON5 utilisés et leur chaînage pour former le schéma de calcul 100%ALAMOS sont représentés sur la figure 5.7 ci-dessous. GEO_SS et GEO_1L, apparaissant en entrée du schéma de calcul, sont formés par les fichiers .ap3 et .za de la géométrie SSH ALAMOS correspondante. Ce sont deux objets identiques mais ayant des fonctions différentes dans le schéma de calcul.

5.3.2 Schéma de calcul REL2005

Le schéma de calcul REL2005 du CEA [14] vise à améliorer l'efficacité des calculs d'assemblages en réduisant le temps de calcul. Pour atteindre cet objectif, le schéma adopte une approche à deux niveaux pour le calcul de réseau. Dans la première étape, un calcul fin en énergie mais assez grossier en espace est effectué en utilisant la méthode à courants d'interface. Avec les flux calculés au premier niveau, les sections efficaces sont condensées, sans aucune homogénéisation spatiale, selon un maillage énergétique optimisé à 26 groupes. Dans la seconde étape, un calcul assez grossier en énergie mais fin en espace est réalisé sur la géométrie exacte. Ce schéma de calcul permet de réduire le nombre de groupes d'énergie à 26, tout en conservant la méthode MOC sur une discrétisation spatiale fine, pour prendre en compte les hétérogénéités locales de manière précise. Il permet ainsi de réaliser des calculs d'assemblage en évolution de manière plus rapide et plus efficace.

Le schéma de calcul REL2005 développé dans le cadre de ce projet tente de reproduire aussi fidèlement que possible celui du CEA, pour les raisons évoquées au paragraphe précédent. Cependant, des différences existent au niveau du calcul d'autoprotection des résonances.

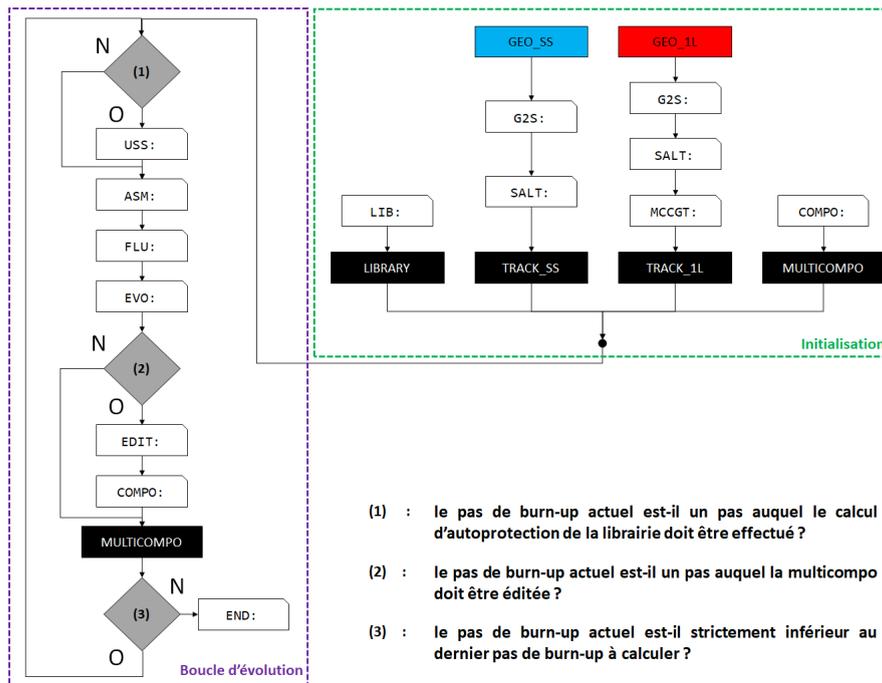


FIGURE 5.7 – Chaînage des modules du schéma de calcul 100%ALAMOS.

5.3.2.1 Géométries

Cette sous-section détaille les géométries générées et/ou utilisées par le schéma de calcul REL2005.

La première géométrie (GEO_SS) est celle sur laquelle est réalisé le calcul d'autoprotection. Elle est représentée sur la figure 5.8 ci-dessous pour l'assemblage 22AU. C'est une géométrie native de DRAGON5, présentant un raffinement minimal, où seul le combustible est discrétisé radialement pour donner une représentation précise de l'absorption de ^{238}U et des isotopes du gadolinium à l'intérieur des crayons. La lame d'eau bordant l'assemblage et les stiffeners ne pouvant être modélisés simplement avec les modules DRAGON5, ils ne sont pas représentés dans cette géométrie. L'impact de cette approximation est discuté en section 5.5.

La deuxième géométrie (GEO_N1) est celle sur laquelle est réalisé le calcul de flux du premier niveau. Elle est similaire à la géométrie d'autoprotection mais présente un raffinement spatial plus important. Comme illustré sur la figure 5.9 ci-dessous, toujours pour l'assemblage 22AU, les cellules combustibles présentent deux couronnes modérateur supplémentaires ainsi qu'une sectorisation en six cadrans, afin de mieux prendre en compte les hétérogénéités spatiales. Pour les mêmes raisons, la lame d'eau et les stiffeners ne sont pas représentés sur cette géométrie.

Le tracking et les calculs de flux sont réalisés sur ces géométries natives en utilisant la méthode à courants d'interface. Pour accélérer ces étapes, les cellules génératrices des assemblages sont regroupées en familles, appelées cellules physiques. Les cellules physiques sont représentées sur la figure 5.10, toujours pour l'assemblage 22AU. Chaque cellule de couleur différente est une cellule physique différente. Lors du calcul d'autoprotection puis du calcul de premier niveau, les cellules appartenant à la même famille présentent des caractéristiques et des évolutions semblables. L'impact du choix de regroupement est discuté en section 5.5.

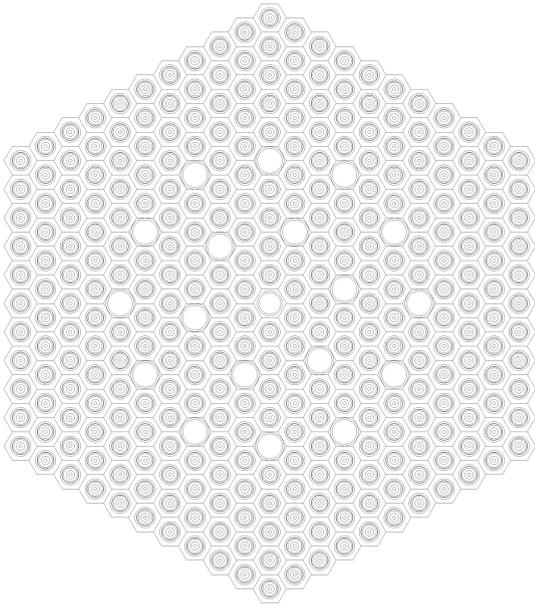


FIGURE 5.8 – Géométrie native de calcul d'autoprotection du schéma REL2005. Assemblage 22AU.

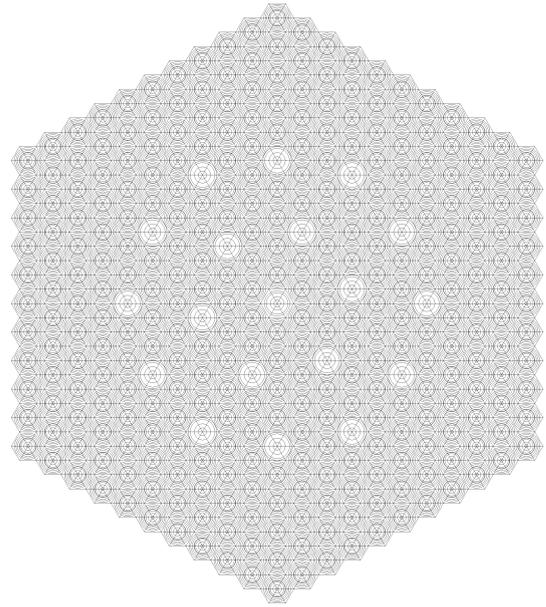


FIGURE 5.9 – Géométrie native de calcul de flux du premier niveau du schéma REL2005. Assemblage 22AU.

La troisième géométrie (GEO_N2) est celle sur laquelle est réalisé le calcul de flux du deuxième niveau. C'est une géométrie ALAMOS MOC présentant un raffinement spatial supérieur à celle du calcul du premier niveau. Comme illustré sur la figure 5.11, les cellules combustibles présentent deux couronnes de modérateur supplémentaires ainsi qu'une sectorisation en douze cadrans. Le combustible est discrétisé en quatre couronnes pour les cellules sans gadolinium et onze couronnes pour les cellules avec gadolinium. Sur cette géométrie, la lame d'eau bordant l'assemblage ainsi que les stiffeners sont représentés. Les géométries triangle et losange sont respectivement dépliées par rotation de 60° et 120° pour reconstituer l'assemblage complet.

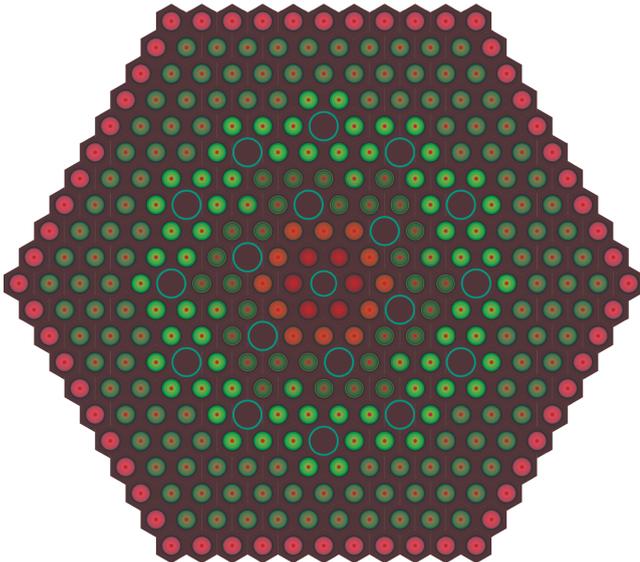


FIGURE 5.10 – Familles de cellules physiques des géométries natives du schéma REL2005. Assemblage 22AU.

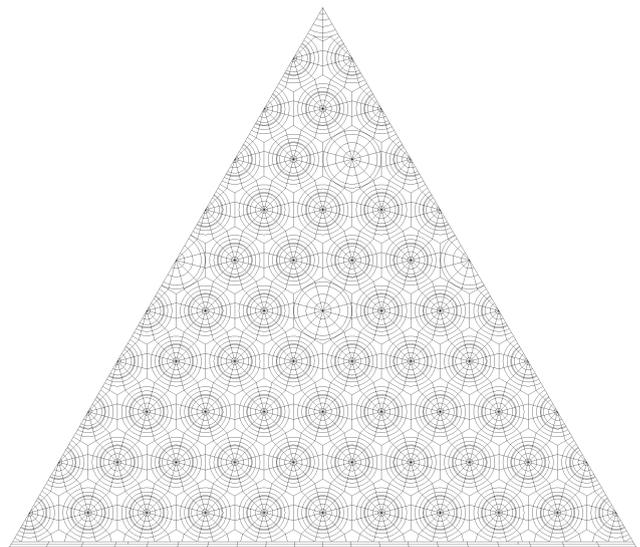


FIGURE 5.11 – Géométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau du schéma REL2005. Assemblage 22AU.

Les familles de cellules physiques des géométries natives ainsi que la géométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau sont représentées sur les figures 5.12 et 5.13 pour l'assemblage 398GO. Elles sont également représentées sur les figures 5.14 et 5.15 pour l'assemblage 39AWU.

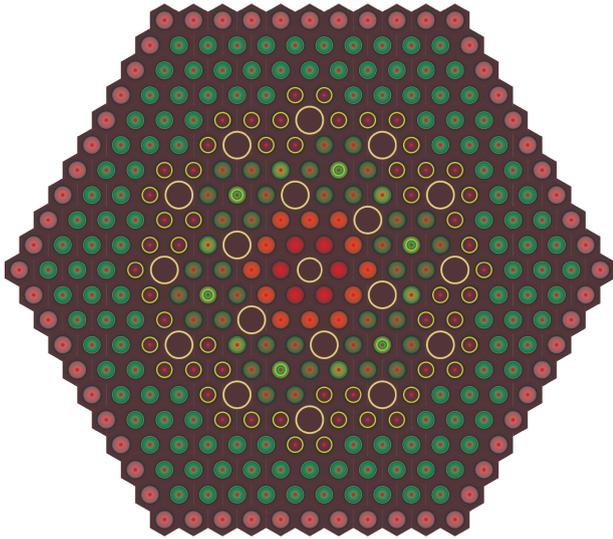


FIGURE 5.12 – Familles de cellules physiques des géométries natives du schéma REL2005. Assemblage 398GO.

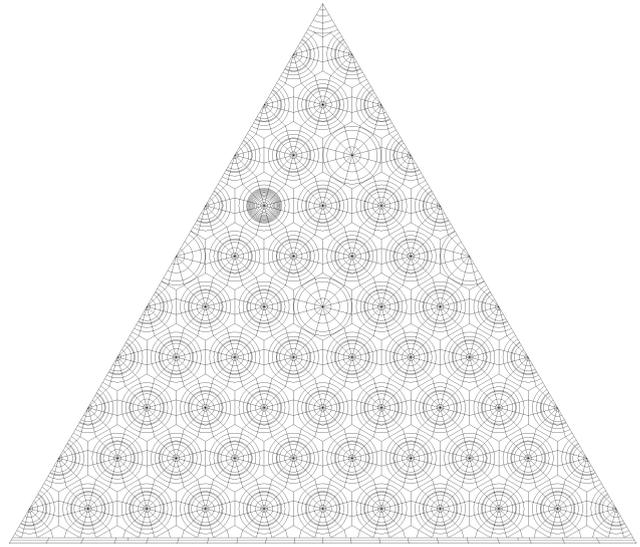


FIGURE 5.13 – Géométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau du schéma REL2005. Assemblage 398GO.

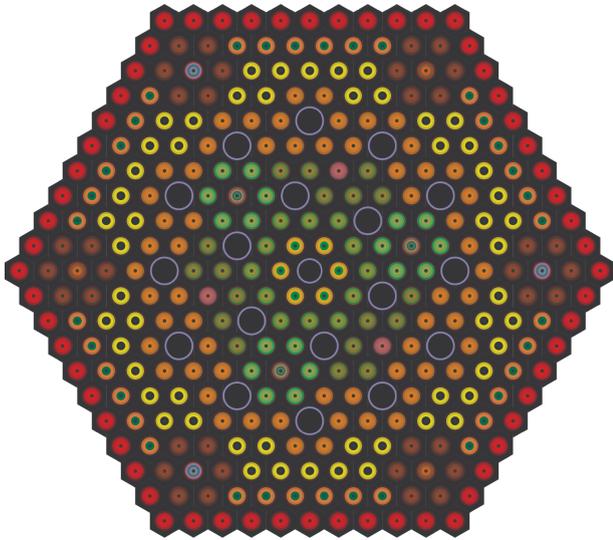


FIGURE 5.14 – Familles de cellules physiques des géométries natives du schéma REL2005. Assemblage 39AWU.

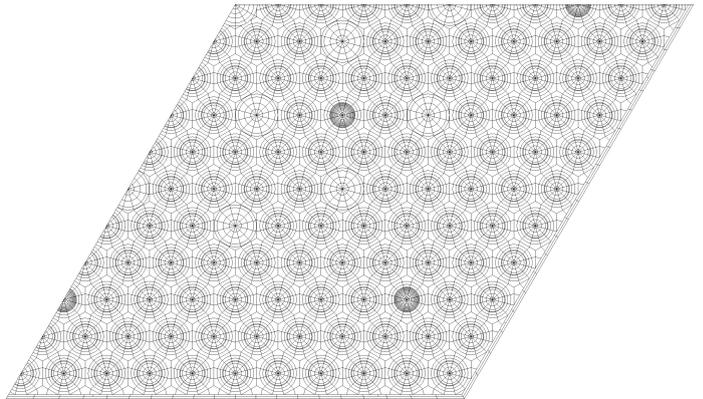


FIGURE 5.15 – Géométrie ALAMOS de calcul de flux du deuxième niveau du schéma REL2005. Assemblage 39AWU.

5.3.2.2 Modules et chaînage

Les modules de DRAGON5 utilisés, et leur chaînage pour former le schéma de calcul REL2005, sont représentés sur la figure 5.16 ci-dessous.

Le calcul du premier niveau exploite les géométries natives, pour lesquelles le tracking a été réalisé avec le module SYBILT: afin d'utiliser la méthode à courants d'interface. Le calcul du deuxième niveau exploite la géométrie ALAMOS, pour laquelle le tracking a été réalisé avec les modules SALT: et MCCGT: afin d'utiliser la méthode MOC.

Le calcul du premier niveau est effectué sur la géométrie GEO_N1 présentée dans la partie 5.3.2.1. Il est réalisé à 295 groupes d'énergie. À la fin du calcul, et comme précédemment expliqué dans la sous-section 5.3.2, une condensation à 26 groupes d'énergie est réalisée par le module EDI: (marqué par une étoile sur la figure 5.16) pour générer la librairie LIBEQ. Cette librairie à 26 groupes est ensuite adaptée pour convenir au calcul de flux du deuxième niveau.

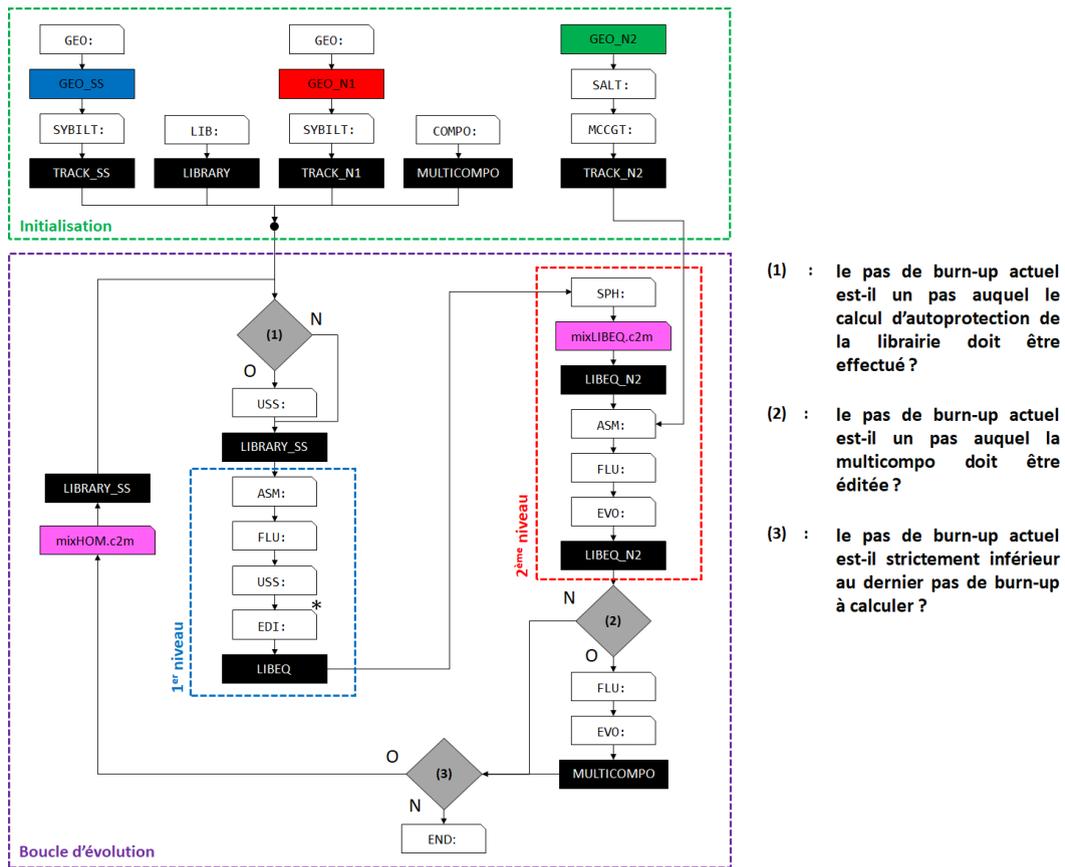


FIGURE 5.16 – Chaînage des modules du schéma de calcul REL2005.

Aux géométries natives, du fait d'un faible nombre de cellules génératrices (une dizaine), correspondent des librairies d'isotopes (LIBRARY et LIBRARY_SS), dont le nombre de mélanges N_{NATIF} n'excède pas 50. La géométrie de calcul de flux du deuxième niveau, ne présentant pas de regroupement par familles, nécessite une librairie correspondante (LIBEQ_N2) plus étoffée, avec N_{ALAMOS} mélanges. La construction de la librairie LIBEQ_N2 à partir de LIBEQ est assurée par la procédure CLE-2000 mixLIBEQ.c2m (en rose sur la figure 5.16). Elle génère les N_{ALAMOS} mélanges filles de LIBEQ_N2 à partir des N_{NATIF} mélanges mères de LIBEQ correspondantes. Une schématisation de cette étape est fournie en figure 5.17 ci-dessous pour le cas particulier de l'assemblage 22AU. Les 34 mélanges de LIBEQ, associées à GEO_SS et GEO_N1, génèrent les 250 mélanges associées à GEO_N2.

Le calcul du deuxième niveau est effectué sur la géométrie GEO_N2, présentée dans la partie 5.3.2.1. Il est réalisé à 26 groupes d'énergie en utilisant la méthode MOC.

Le processus inverse est assuré par la procédure CLE-2000 mixHOM.c2m (également en rose sur la figure 5.16), qui recrée une librairie LIBRARY_SS de N_{NATIF} mélanges à 295 groupes, à partir de la librairie LIBEQ_N2 de N_{ALAMOS} mélanges à 26 groupes. Le calcul du premier niveau du pas de burn-up suivant peut alors être effectué.

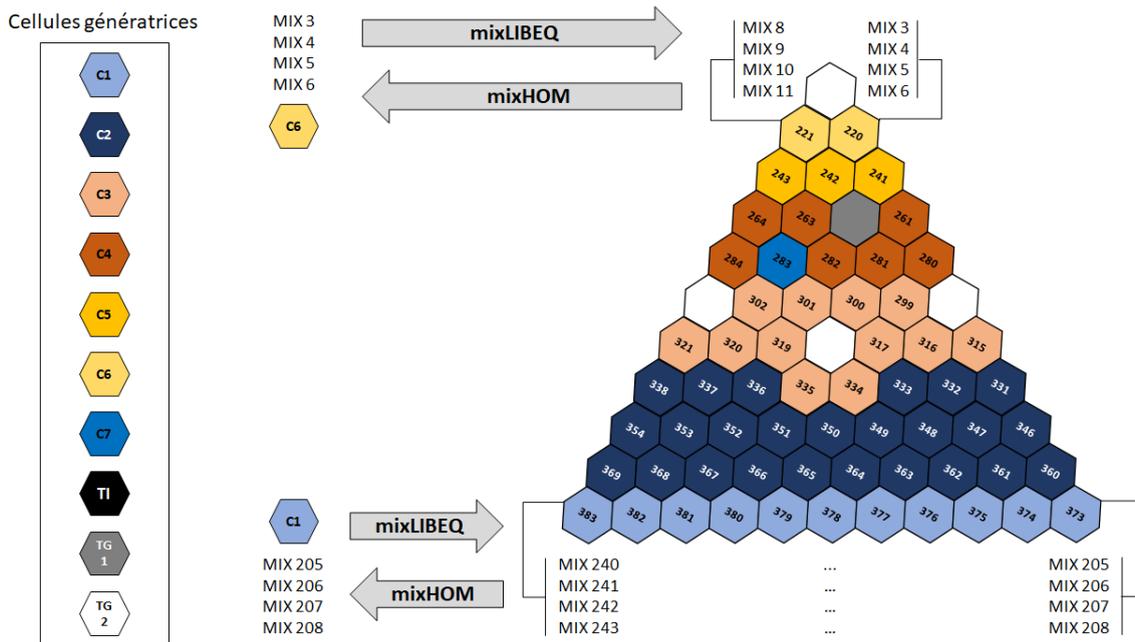


FIGURE 5.17 – Principe de fonctionnement des procédures CLE-2000 mixHOM.c2m et mixLIBEQ.c2m dans le schéma REL2005.

5.3.3 Gestion de l'autoprotection

La gestion de l'autoprotection présente des similitudes entre les deux schémas de calcul, aussi elle est traitée de manière commune dans cette sous-section. L'autoprotection du schéma 100%ALAMOS est basée sur la méthode des probabilités de collision avec regroupement de régions au niveau du tracking (mot-clé MERGMIX). L'autoprotection du schéma REL2005 est basée sur la méthode à courants d'interfaces avec itération flux-courant (mot-clé ARM).

Pour les deux schémas, celle-ci est réalisée par le module USS: en utilisant le mot-clé CALC. Ce mot-clé permet de faire l'approximation simplifiée d'autoprotection dans laquelle un seul isotope autoprotégé est partagé par plusieurs mixtures résonantes. Les isotopes autoprotégés sont détaillés dans le tableau 5.2 dans la sous-section 5.3.4 ci-dessous. Tous ces isotopes, à l'exception de l' ^{238}U et du vecteur Gd, sont autoprotégés avec le mot-clé ALL qui permet de réaliser le calcul d'autoprotection en regroupant toutes les couronnes du combustible. L' ^{238}U et les isotopes du Gd sont autoprotégés avec le mot-clé REGI, qui permet de réaliser le calcul d'autoprotection de manière différenciée sur les couronnes radiales du combustible.

L'autoprotection du schéma 100%ALAMOS est réalisée sur la géométrie de la figure 5.4 et celle du schéma REL2005 sur la géométrie de la figure 5.8, précédemment détaillées.

5.3.4 Paramètres des schémas de calcul d'assemblage

Le tableau 5.2 ci-dessous présente les paramètres utilisés pour la réalisation des calculs d'assemblage, avec les schémas REL2005 et 100%ALAMOS. Ces paramètres diffèrent légèrement de ceux avancés en sous-section 4.5.8, en fin d'étude d'optimisation à l'échelle de la cellule. Ces différences trouvent leur origine dans la recherche d'une amélioration de la précision des calculs ou d'une réduction des temps de calcul. Étant données les géométries et les méthodes de calcul présentées dans les sous-sections 5.3.1 et 5.3.2 ci-dessus, la majeure partie du temps de calcul est portée par l'étape d'autoprotection pour le schéma 100%ALAMOS et par l'étape de calcul de flux du deuxième niveau pour le schéma REL2005.

Assemblage	Méthode	Condition limite	(an2d ; densur)	Isotopes autoprotégés	ListBU	ListAUTOP
22AU	MOC	TSPC	(18 ; 30)	interUOx_3	UOx4	autop5
40AU	MOC	TSPC	(18 ; 30)	interUOx_3	UOx2	autop5
398GO	MOC	TSPC	(18 ; 30)	Gd_6	Gd	autop3
39AWU	MOC	TSPC	(18 ; 30)	Gd_6	Gd	autop3

TABLE 5.2 – Paramètres optimaux pour les schémas de calcul DRAGON5 à l'échelle de l'assemblage.

5.4 Grandeurs globales

Cette section présente les résultats obtenus pour les grandeurs globales, k_{eff} et N_i , pour les quatre assemblages du projet CAMIVVER étudiés, avec et sans gadolinium. Ces grandeurs sont illustrées pour les deux schémas de calcul DRAGON5 utilisés, le schéma 100%ALAMOS et le schéma REL2005. Les résultats et les attendues énoncés dans la section 4.6, à l'échelle de la cellule, sont confirmés dans les sous-sections 5.4.1 et 5.4.2, validant ainsi les travaux d'optimisation réalisés à l'échelle de la cellule.

5.4.1 Assemblages sans gadolinium

Cette sous-section traite des résultats pour les assemblages sans gadolinium, le 22AU et le 40AU. La figure 5.18 illustre les écarts observés sur le k_{eff} entre DRAGON5 et Serpent2 pour les deux schémas de calcul. Les résultats à l'échelle de la cellule y figurent aussi pour rappel. Les figures 5.19 à 5.21 représentent les écarts observés, sur trois isotopes fondamentaux, entre DRAGON5 et Serpent2 pour les mêmes schémas de calcul.

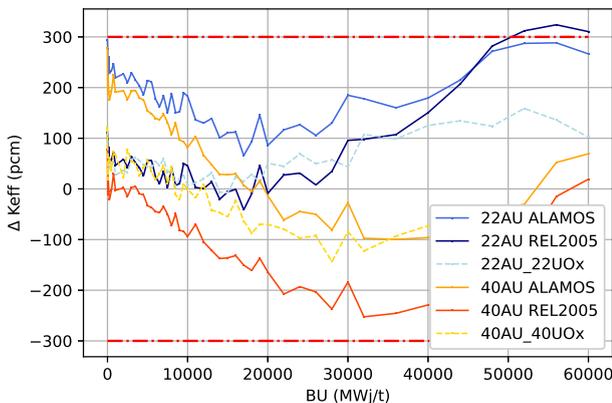


FIGURE 5.18 – Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj.t⁻¹, des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

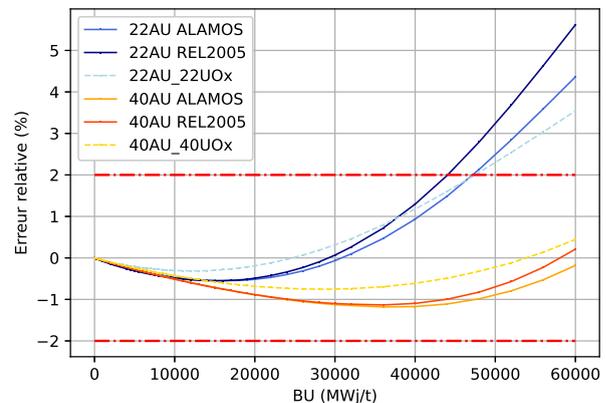


FIGURE 5.19 – Évolution de $[^{235}\text{U}]$ de 0 à 60 GWj.t⁻¹, des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

La figure 5.18 met en avant deux observations majeures quant à la forme globale des courbes du k_{eff} . Premièrement, à 0 GWj.t⁻¹, l'accord obtenu est meilleur avec le schéma de calcul REL2005, affichant un Δk_{eff} inférieur à 30 pcm pour les deux assemblages considérés. En effet, la géométrie MOC utilisée dans le schéma REL2005 pour le calcul de flux du deuxième niveau, à défaut de la géométrie SSH du schéma 100%ALAMOS, favorise l'obtention d'un bon accord en début d'irradiation. Cependant, avec le schéma de calcul REL2005, les courbes de k_{eff} divergent de façon visible en évolution, ceci étant dû au regroupement des cellules par familles explicité en partie 5.3.2.1. Les résultats observés avec le schéma 100%ALAMOS témoignent quant à eux de la très bonne stabilité de ce dernier en évolution. De fortes similitudes sont observées entre les courbes tracées à l'échelle de la cellule et à l'échelle de l'assemblage. En effet, un comportement global identique est mis en avant, auquel s'ajoute une divergence plus marquée des courbes du fait de l'amplification des phénomènes à l'échelle de l'assemblage.

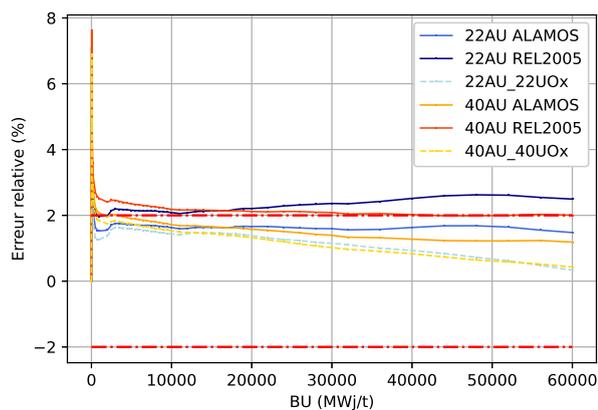


FIGURE 5.20 – Évolution de $[^{239}\text{Pu}]$ de 0 à 60 GWj.t^{-1} , des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

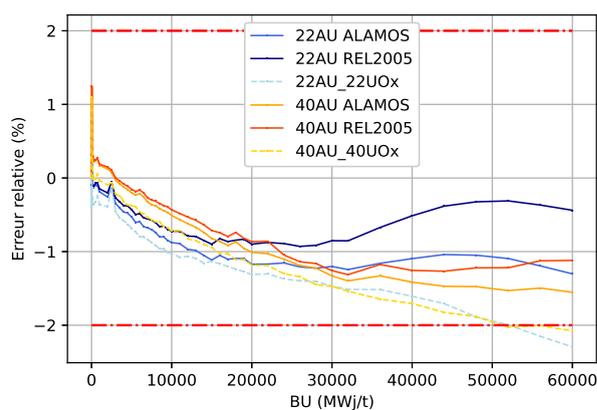


FIGURE 5.21 – Évolution de $[^{135}\text{Xe}]$ de 0 à 60 GWj.t^{-1} , des cellules et des assemblages UOx en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

Les figures 5.19 à 5.21 appuient les observations précédentes. Pour l'ensemble des isotopes, les accords obtenus en évolution entre DRAGON5 et Serpent2 sont meilleurs avec le schéma 100%ALAMOS. Malgré l'utilisation de ce schéma de calcul, les critères de validation ne sont pas atteints pour tous les isotopes, en témoigne l'écart observé en fin de burn-up sur ^{235}U pour l'assemblage 22AU, qui dépasse les 4.0%. Tout comme énoncé dans la sous-section 4.6.1, plus l'enrichissement en ^{235}U est élevé, plus l'accord obtenu entre DRAGON5 et Serpent2 est bon, tant sur le k_{eff} que sur les N_i .

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 5.3 ci-après rend compte des résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

22AU	100%ALAMOS	REL2005
$\Delta k_{eff} < 300$ pcm	v	x
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe	^{236}U , ^{238}U , ^{240}Pu , ^{242}Pu et ^{135}Xe
Disparité : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{235}U , ^{155}Gd et ^{157}Gd	^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu , ^{155}Gd , ^{157}Gd et ^{149}Sm
40AU	100%ALAMOS	REL2005
$\Delta k_{eff} < 300$ pcm	v	x
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe	^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe
Disparité : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{242}Pu , ^{155}Gd et ^{157}Gd	^{235}U , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{155}Gd et ^{157}Gd

TABLE 5.3 – Écarts finaux observés sur le k_{eff} et les N_i , entre D5 et S2, pour les assemblages sans gadolinium.

5.4.2 Assemblages avec gadolinium

Les figures 5.22 à 5.25 ci-dessous présentent les résultats obtenus avec les schémas de calcul REL2005 et 100%ALAMOS, sur les grandeurs globales des assemblages avec gadolinium, pour toute la durée d'irradiation du combustible. La figure 5.22 illustre l'écart observé sur le k_{eff} et les figures 5.23 à 5.25 les écarts relatifs observés sur les concentrations atomiques de ^{235}U , ^{239}Pu et ^{157}Gd . Les résultats des assemblages avec gadolinium présentent de fortes similitudes avec ceux obtenus pour les assemblages sans gadolinium, présentés en sous-section 5.4.1.

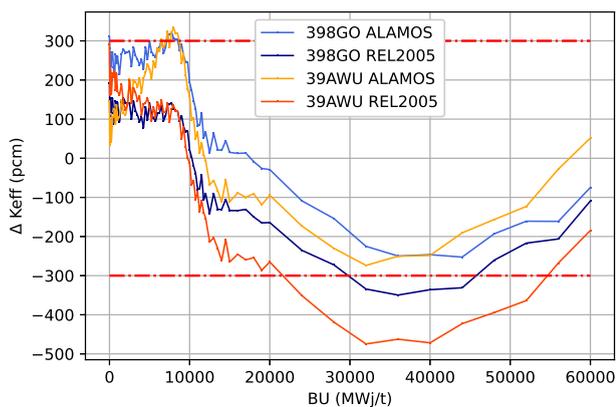


FIGURE 5.22 – Évolution du k_{eff} de 0 à 60 GWj.t^{-1} , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

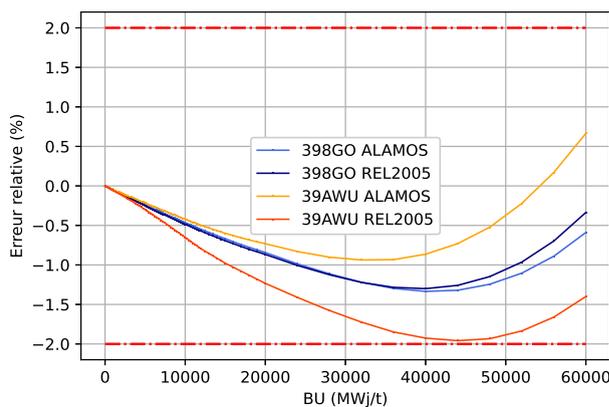


FIGURE 5.23 – Évolution de ^{235}U de 0 à 60 GWj.t^{-1} , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

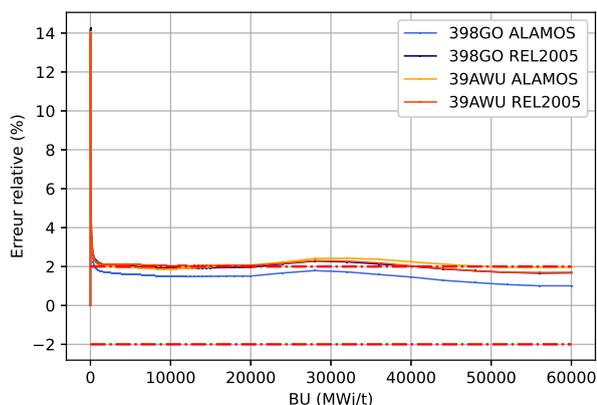


FIGURE 5.24 – Évolution de ^{239}Pu de 0 à 60 GWj.t^{-1} , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

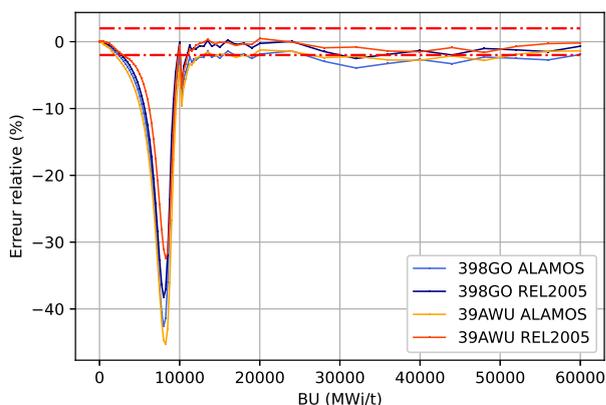


FIGURE 5.25 – Évolution de ^{157}Gd de 0 à 60 GWj.t^{-1} , des assemblages avec gadolinium, en schéma 100%ALAMOS et REL2005.

Sur la figure 5.22, comme pour les deux assemblages sans gadolinium, le calcul du k_{eff} à burn-up initial est plus précis en REL2005 qu'en 100%ALAMOS pour l'assemblage 398GO. Cette précision plus importante est due à l'utilisation d'une géométrie MOC pour le calcul de flux du deuxième niveau. Cette tendance n'est pas observée sur l'assemblage 39AWU, pour lequel l'écart à la référence du schéma à deux niveaux est supérieur de 150 pcm à celui du schéma simple niveau. Cette observation laisse suggérer la présence d'une erreur minime dans la géométrie ou les mixtures de l'assemblage 39AWU en schéma REL2005.

À nouveau, comme pour les assemblages sans gadolinium, et comme en témoigne la courbe d'évolution de ^{235}U en figure 5.23, les calculs du schéma REL2005 présentent un divergence en évolution plus marquée que ceux du schéma 100%ALAMOS. C'est exclusivement sur les isotopes du gadolinium, comme illustré en figure 5.25, que sont observés des écarts importants, d'un ordre de grandeur supérieurs aux limites fixées dans le cadre de ce projet. Malgré tout, le comportement global des deux schémas est similaire et convenant.

Les valeurs de k_{eff} obtenues sur les assemblages avec gadolinium sont très satisfaisantes. Elles confortent les considérations faites en conclusion des résultats à l'échelle de la cellule, en sous-section 4.7. Malgré la difficulté à simuler les phénomènes au sein des cellules empoisonnées, leurs faibles nombres et leurs répartitions homogènes au sein des assemblages ne détériore que faiblement le calcul des grandeurs globales.

Bien que les écarts sur les autres isotopes ne soient pas représentés, le tableau 5.4 ci-après rend

compte des résultats obtenus. Les courbes pour ces isotopes sont disponibles sur la page de physique des réacteurs de l'EPM [19].

398GO	100%ALAMOS	REL2005
$\Delta k_{eff} < 300$ pcm	v	x
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{242}Pu et ^{149}Sm	^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{242}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe
Disparité : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{135}Xe	^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{240}Pu et ^{241}Pu
39AWU	100%ALAMOS	REL2005
$\Delta k_{eff} < 300$ pcm	v	v
Accord : $\Delta N_i < 2.0\%$	^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{149}Sm et ^{135}Xe	^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{149}Sm et ^{135}Xe
Disparité : $\Delta N_i > 2.0\%$	^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{242}Pu	^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{240}Pu , ^{241}Pu et ^{242}Pu

TABLE 5.4 – Écarts finaux observés sur le k_{eff} et les N_i , entre D5 et S2, pour les assemblages avec gadolinium.

5.5 Grandeurs locales

Cette section présente les résultats obtenus pour les grandeurs locales, taux de fission et taux de capture radiative, pour les quatre assemblages de l'étude, avec et sans gadolinium. Ces grandeurs sont illustrées pour les deux schémas de calcul DRAGON5 utilisés, et présentées à burn-up initial, 0 GWj.t⁻¹ et burn-up final, 60 GWj.t⁻¹. Seules les fissions dans le groupe 2 et les captures radiatives dans le groupe 1 sont traitées dans ce rapport. Ces mêmes réactions dans les autres groupes d'énergie sont disponibles sur la page de physique des réacteur de l'EPM, dans l'archive de post-traitement [19]. Les taux de fission sont calculés à partir des quatre isotopes suivants : ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu . Les taux de capture radiative sont calculés à partir des huit isotopes suivants : ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu , ^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{135}Xe et ^{149}Sm . Les critères de validation des écarts relatifs entre DRAGON5 et Serpent2 pour les grandeurs locales sont les suivants :

- valeur absolue de l'écart relatif moyen : $|\overline{\Delta\tau_i}| < 1.0\%$;
- valeur absolue de l'écart relatif maximal pour un assemblage UOx : $|\Delta\tau_{i,max}| < 2.0\%$;
- valeur absolue de l'écart relatif maximal pour un assemblage Gd : $|\Delta\tau_{i,max}| < 4.0\%$.

Dans les quatre sous-sections suivantes, les figures illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission et de capture entre DRAGON5 et Serpent2. Chaque hexagone du pavage représente une cellule de l'assemblage complet où la valeur de l'écart relatif est indiquée. Pour les assemblages 22AU, 40AU et 398GO, la symétrie est triangulaire, expliquant la représentation d'un sixième d'assemblage, là où pour l'assemblage 39AWU la symétrie est losangique, d'où la représentation d'un tiers d'assemblage. Le code couleur utilisé pour la représentation graphique présente les valeurs positives en rouge et les valeurs négatives en bleu, plus l'écart relatif est faible plus la cellule tend vers le blanc. Concernant la codification des cellules, celle noircie représente le tube d'instrumentation central alors que les tubes guides sont illustrés par les cellules grisées. Les cellules hachurées marquent la position des cellules contenant du gadolinium. Enfin, pour l'assemblage 39AWU, les cellules pointillées, situées en périphérie, dissocient les cellules UOx plus faiblement enrichies.

5.5.1 Assemblage 22AU

Les figures 5.26 à 5.29 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe 2, à burn-up initial et bur-up final, pour les deux schémas de calcul DRAGON5, pour l'assemblage 22AU.

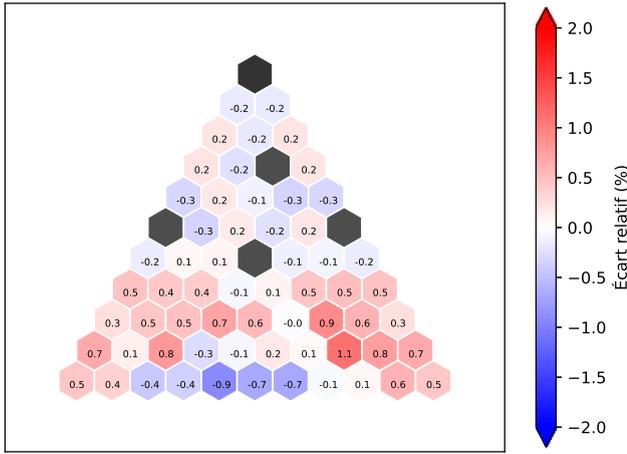


FIGURE 5.26 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

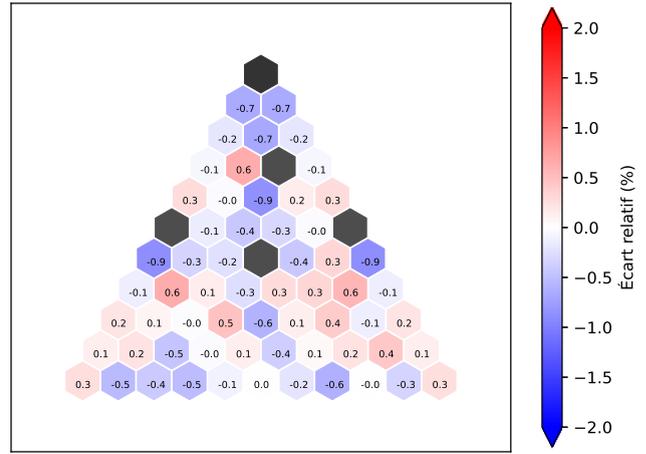


FIGURE 5.27 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

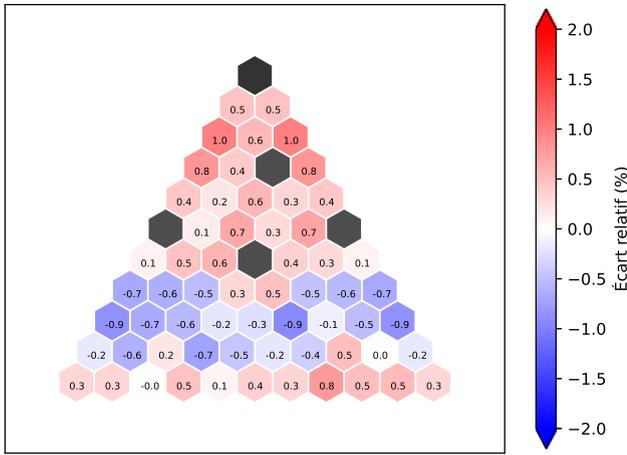


FIGURE 5.28 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

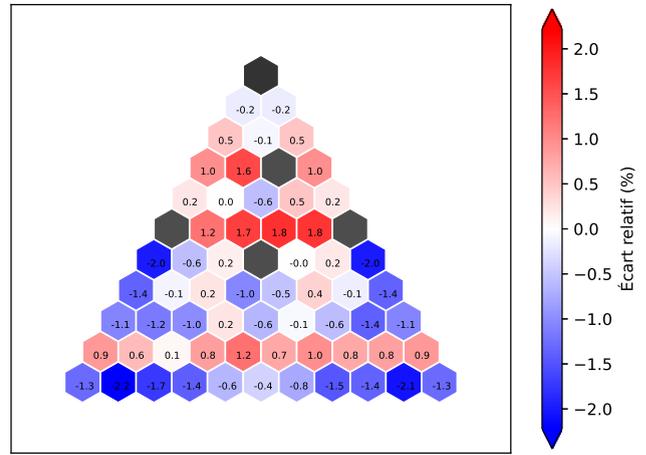


FIGURE 5.29 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

En début d’irradiation, toutes les cellules affichent des écarts inférieurs à 2.0%, comme l’illustrent les figures 5.26 et 5.28. Le critère de validation est respecté pour les deux schémas de calcul. L’écart entre les deux schémas réside en la moyenne des écarts, 0.36% pour le schéma 100%ALAMOS et 0.46% pour le schéma REL2005 à burn-up initial.

La principale différence entre les deux schémas de calcul a lieu en évolution, comme mentionné dans la sous-section 5.4.1 et illustré par les figures 5.27 et 5.29. En effet, les valeurs restent en tout point inférieures à 2.0% avec le schéma 100%ALAMOS à burn-up final, là où les écarts dépassent très localement les 2.0% avec le schéma de calcul REL2005. Les plus importants écarts sont observés à proximité des hétérogénéités, trous d’eau et frontière de l’assemblage notamment. De plus, la figure 5.29 témoigne des biais induits par le regroupement de cellules en famille dans le schéma de calcul REL2005, comme l’atteste notamment la ligne de cellules affichant 1.2% à 1.8% d’écarts (6^{ème} ligne en partant du haut). Ces écarts pourraient diminuer en modifiant le mode de regroupement des cellules comme explicité dans le tableau 7.2 de la section 7.2. La moyenne des écarts sur l’assemblage complet avec le schéma REL2005 est de 0.87%, inférieur au critère de validation, cependant l’écart maximal observé dépasse les 2.0% fixés. Le schéma 100% ALAMOS respecte quant à lui les deux seuils imposés.

Les figures 5.30 à 5.33 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de capture radiative dans le groupe 1, à burn-up initial et burn-up final, pour les deux schémas de calculs DRAGON5, pour l’assemblage 22AU.

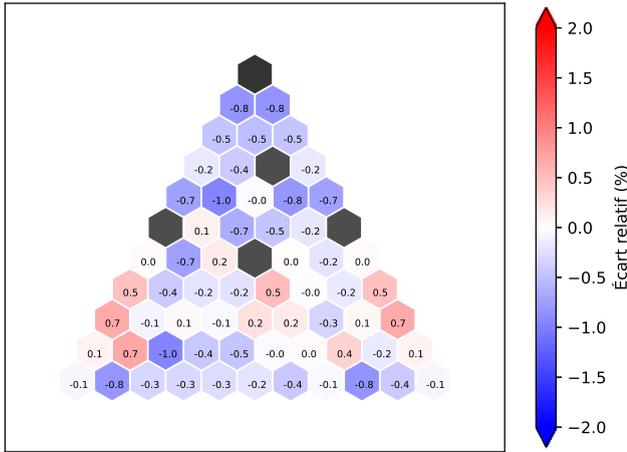


FIGURE 5.30 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

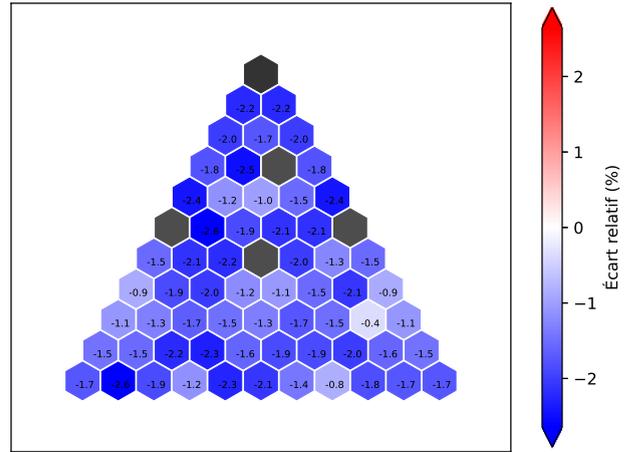


FIGURE 5.31 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

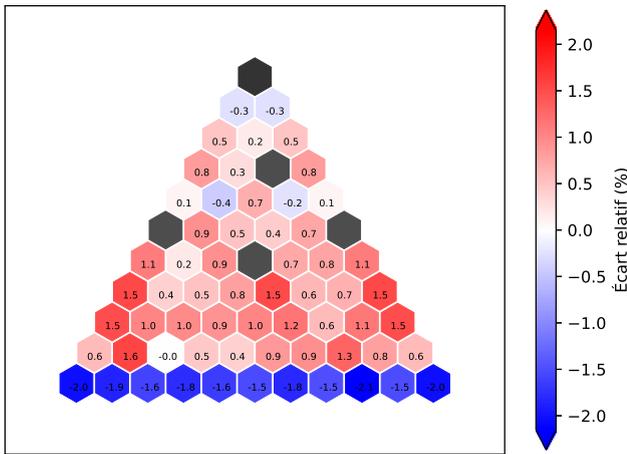


FIGURE 5.32 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

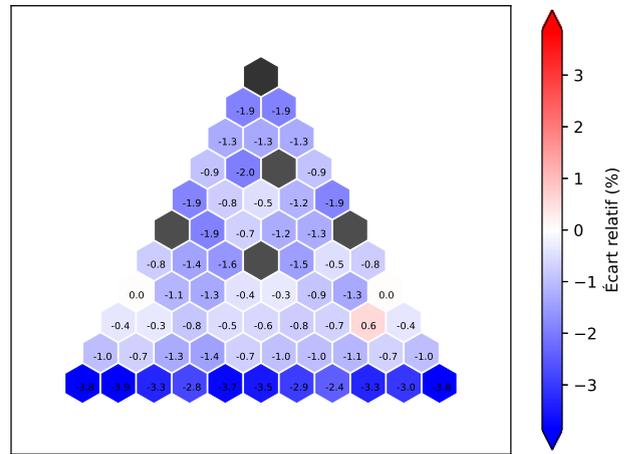


FIGURE 5.33 – 22AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

Le comportement relatif des deux schémas de calcul est globalement similaire pour les taux de capture radiative. En effet, le schéma 100%ALAMOS donne de meilleurs résultats, en moyenne et en valeur maximale, sur les écarts relatifs. À burn-up initial, le critère de validation est atteint avec le schéma 100%ALAMOS, la figure 5.30 affichant un écart maximal de 1.0% et un écart moyen de 0.36% sur l'ensemble de l'assemblage, écart exactement similaire à celui observé pour les fissions. L'écart moyen avoisine quant à lui les 1.0% pour le schéma REL2005 avec une unique cellule pour laquelle l'écart dépasse les 2.0%, à burn-up initial. Pour le schéma REL2005, les écarts maximum, observés en début et fin de burn-up, se trouvent à proximité de la lame d'eau, aux frontières des assemblages, dûs à la mauvaise prise en compte des stiffeners et de la lame d'eau dans les géométries natives de ce schéma.

En fin de burn-up, sur les figures 5.31 et 5.33, les deux schémas DRAGON5 sous-estiment la puissance délivrée par capture radiative, les écarts sur les nappes de puissance étant négatifs pour l'ensemble de l'assemblage. Dans le cas du schéma 100%ALAMOS, ces écarts témoignent du problème de prise en compte du dépôt d'énergie dans le schéma de calcul Serpent2, nécessitant d'explorer la piste d'amélioration S1 présentée dans le tableau 7.1 de la section 7.2. Pour ces deux schémas, le critère de validation n'est pas atteint en fin de burn-up, tant sur l'écart maximal que sur l'écart moyen, comme indiqué dans le tableau 5.5. Les figures 5.32 et 5.33 montrent une nouvelle fois la divergence des résultats en évolution pour le schéma de calcul REL2005, notamment au niveau des cellules aux frontières, et la mauvaise prise en compte des stiffeners et de la lame d'eau, là où le schéma 100%ALAMOS est

plus stable en évolution. Pour pallier ce faible raffinement des géométries natives du schéma de calcul REL2005, la piste d'amélioration D6, du tableau 7.2, peut être explorée.

Le tableau 5.5 ci-après résume les résultats observés sur les taux de réaction à l'échelle de l'assemblage complet.

	100%ALAMOS				REL2005			
	$\tau_{f,2,BU_{0_60}}$		$\tau_{c,1,BU_{0_60}}$		$\tau_{f,2,BU_{0_60}}$		$\tau_{c,1,BU_{0_60}}$	
	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60
$ \Delta\tau_{i,min} $ (%)	0.0	0.0	0.0	0.4	0.0	0.0	0.0	0.0
$ \Delta\tau_{i,max} $ (%)	1.1	0.9	1.0	2.6	1.0	2.2	2.0	3.9
$ \overline{\Delta\tau_i} $ (%)	0.36	0.31	0.36	1.70	0.46	0.87	0.93	1.41
$ \Delta\tau_{i,max} < 2.0\%$	v	v	v	x	v	x	v	x
$ \overline{\Delta\tau_i} < 1.0\%$	v	v	v	x	v	v	v	x
Validation critères	v	v	v	x	v	x	v	x

TABLE 5.5 – Assemblage 22AU : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU_{0_60}}$ et les $\tau_{c,1,BU_{0_60}}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.

5.5.2 Assemblage 40AU

Les figures 5.34 à 5.37 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe 2, à burn-up initial et burn-up final, pour les deux schémas de calcul DRAGON5, pour l'assemblage 40AU.

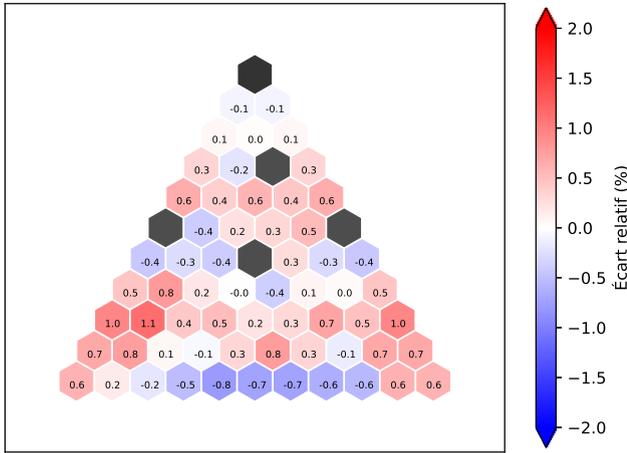


FIGURE 5.34 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

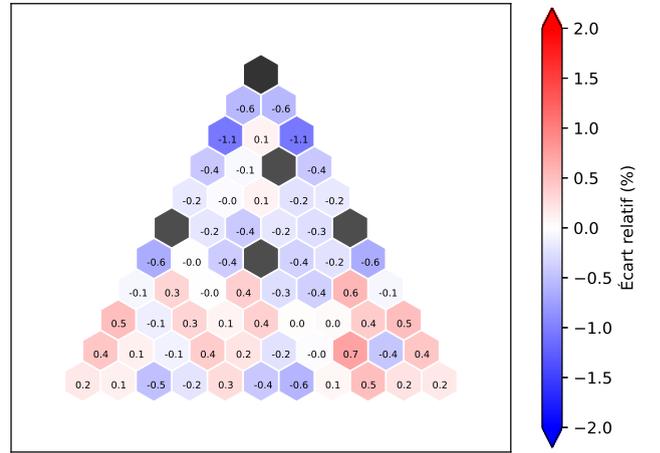


FIGURE 5.35 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

Les résultats observés pour l'assemblage 40AU sont sensiblement identiques à ceux présentés en sous-section 5.5.1 pour l'assemblage 22AU. À burn-up initial, toutes les cellules affichent des écarts inférieurs à 2.0%, comme l'illustrent les figures 5.34 et 5.36. Le critère de validation est respecté pour les deux schémas de calcul. La moyenne des écarts à burn-up initial diffère entre les deux schémas, 0.43% pour le 100%ALAMOS et 0.68% pour le REL2005.

La divergence en évolution du schéma REL2005 est de nouveau mise en avant sur la figure 5.37. Les valeurs restent inférieures à 2.0% avec le schéma 100%ALAMOS à burn-up final, là où les écarts dépassent localement les 2.0% avec le schéma de calcul REL2005, illustré par la figure 5.37. Ces écarts

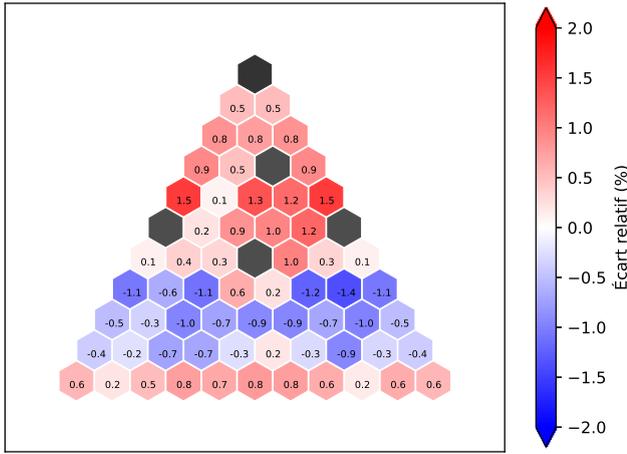


FIGURE 5.36 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

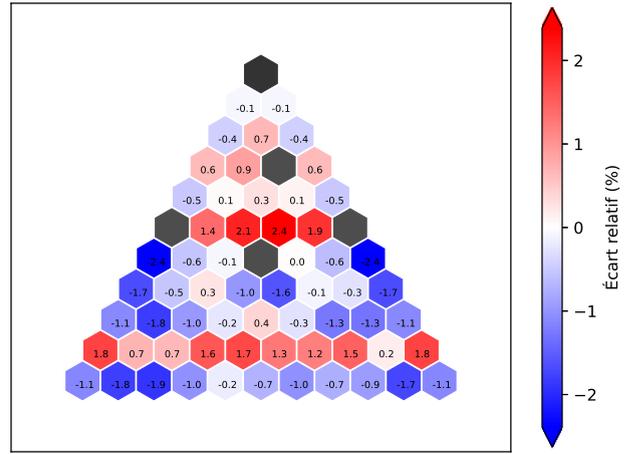


FIGURE 5.37 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

importants sont confirmés à proximité des hétérogénéités et pour les cellules dont le regroupement par famille doit être affiné. La moyenne des écarts sur l'assemblage complet, avec le schéma REL2005, est de 0.93%, inférieur au critère de validation, cependant l'écart maximal observé dépasse les 2.0% fixés en fin de burn-up. Le schéma 100% ALAMOS respecte quant à lui les deux seuils imposés.

Les figures 5.38 à 5.41 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de capture radiative dans le groupe 1 à burn-up initial et burn-up final pour les deux schémas de calculs DRAGON5, pour l'assemblage 40AU.

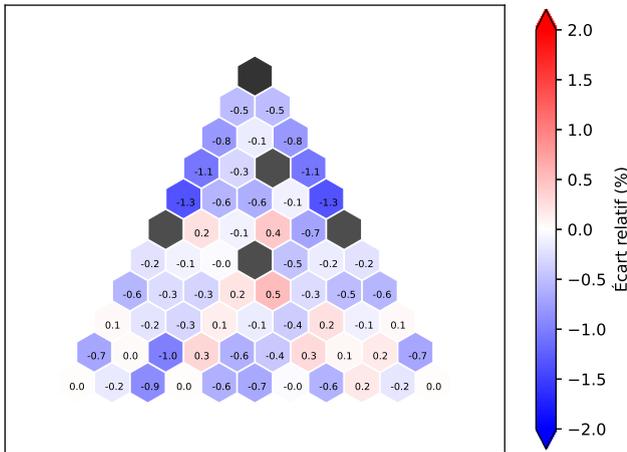


FIGURE 5.38 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

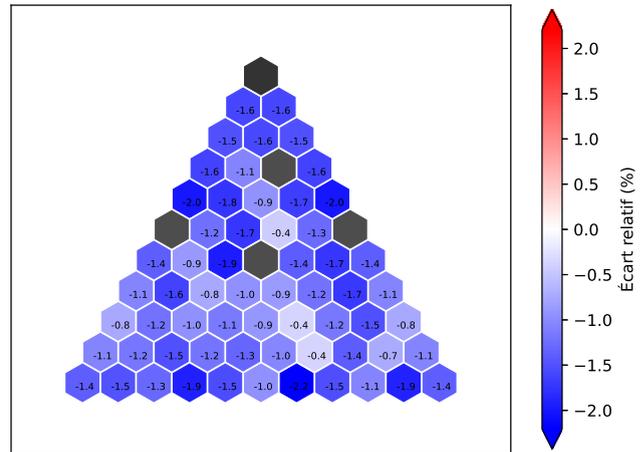


FIGURE 5.39 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

Pour l'assemblage 40AU, tout comme pour les taux de fissions, les conclusions tirées à partir des résultats sur les taux de capture radiative concordent avec celles de l'assemblage 22AU. Le schéma 100%ALAMOS donne de meilleurs résultats sur les écarts relatifs, en moyenne et en valeur maximale, que le schéma REL2005. À burn-up initial, le critère de validation est atteint sur la totalité des cellules avec le schéma 100%ALAMOS, la figure 5.38 affichant un écart maximal de 1.3% et un écart moyen de 0.40% sur l'ensemble de l'assemblage. L'écart moyen est de 0.75%, amélioré par rapport à l'assemblage 22AU, pour le schéma REL2005 dont l'ensemble des cellules affiche un écart maximal inférieur à 2.0% à burn-up initial. Les écarts maximaux restent situés sur la ligne inférieure de l'assemblage, dû à la non prise en compte des stiffeners et de la lame d'eau dans les géométries du schéma REL2005.

En fin de burn-up, les deux schémas DRAGON5 sous-estiment de nouveau la puissance délivrée par

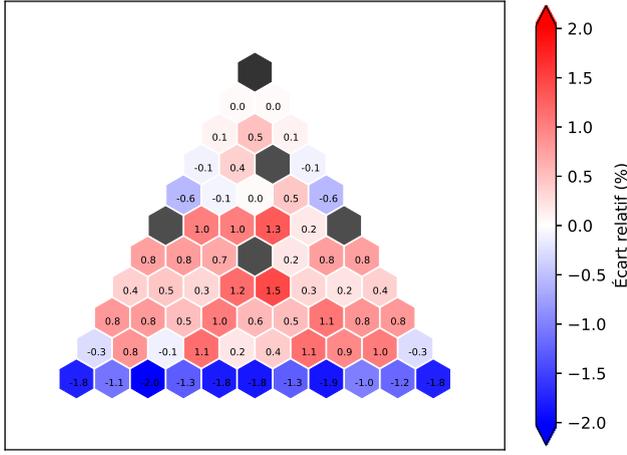


FIGURE 5.40 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

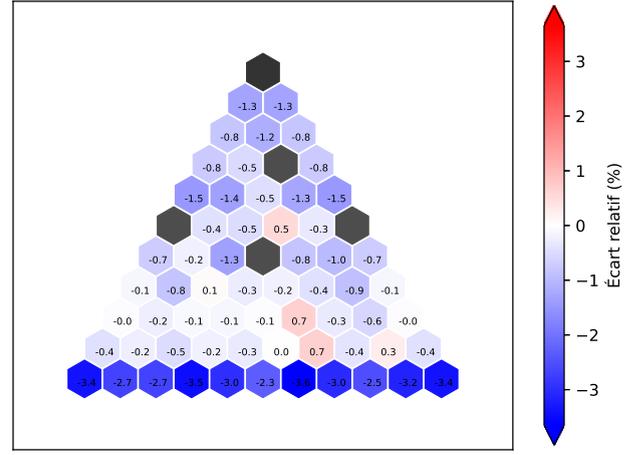


FIGURE 5.41 – 40AU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

capture radiative, pour les raisons détaillées dans la sous-section précédente 5.5.1. Pour ces deux schémas, le critère de validation n'est pas atteint en fin de burn-up, avec des écarts moyens de 1.24% et 1.01%, respectivement pour le schéma 100%ALAMOS et le schéma REL2005, et des écarts maximaux respectifs de 2.20% et 3.60%.

Le tableau 5.6 ci-après résume les résultats observés sur les taux de réaction à l'échelle de l'assemblage complet.

	100%ALAMOS				REL2005			
	$\tau_{f,2,BU_{0_60}}$		$\tau_{c,1,BU_{0_60}}$		$\tau_{f,2,BU_{0_60}}$		$\tau_{c,1,BU_{0_60}}$	
	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60
$ \Delta\tau_{i,min} $ (%)	0.0	0.0	0.0	0.4	0.1	0.0	0.0	0.0
$ \Delta\tau_{i,max} $ (%)	1.1	1.1	1.3	2.2	1.5	2.4	2.0	3.6
$ \overline{\Delta\tau_i} $ (%)	0.43	0.31	0.40	1.24	0.68	0.93	0.76	1.01
$ \Delta\tau_{i,max} < 2.0\%$	v	v	v	x	v	x	v	x
$ \overline{\Delta\tau_i} < 1.0\%$	v	v	v	x	v	v	v	x
Validation critères	v	v	v	x	v	x	v	x

TABLE 5.6 – Assemblage 40AU : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU_{0_60}}$ et les $\tau_{c,1,BU_{0_60}}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.

Les sous-sections suivantes, 5.5.3 et 5.5.4, traitent des résultats obtenus pour les valeurs locales pour des assemblages composés pour partie de cellules gadolinium. L'architecture utilisée est similaire aux deux sous-sections précédentes, 5.5.1 et 5.5.2.

5.5.3 Assemblage 398GO

Les figures 5.42 à 5.45 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe 2, à burn-up initial et burn-up final, pour les deux schémas de calcul DRAGON5, pour l'assemblage 398GO.

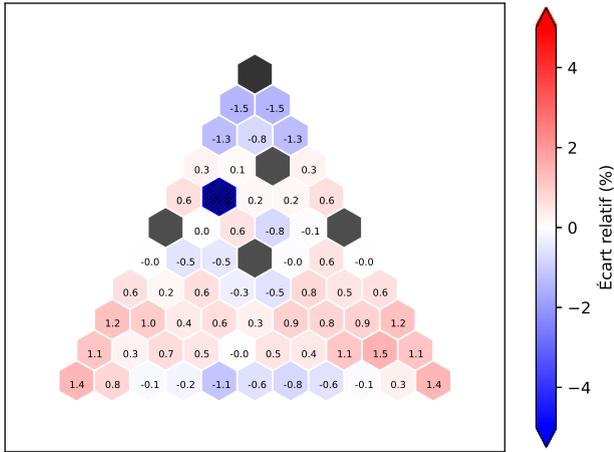


FIGURE 5.42 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

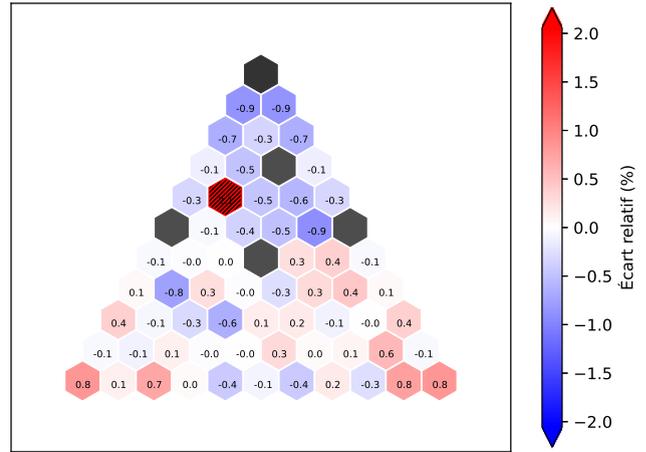


FIGURE 5.43 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

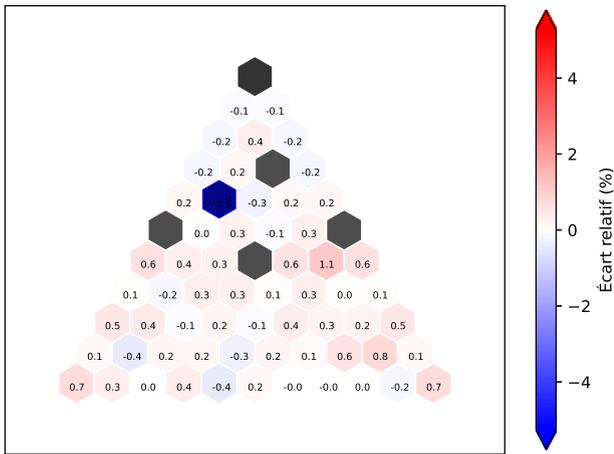


FIGURE 5.44 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

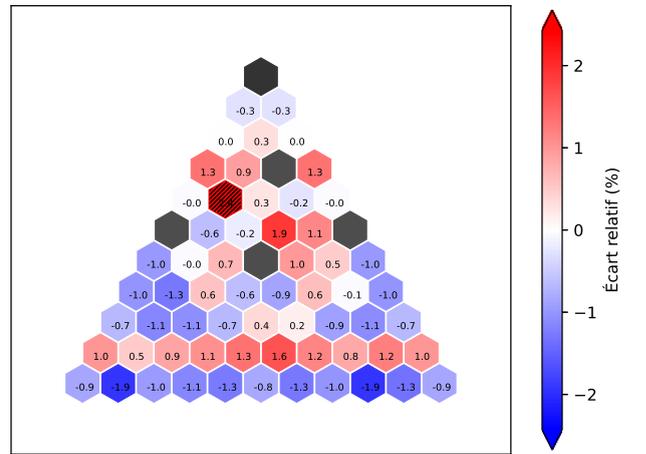


FIGURE 5.45 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

Les accords obtenus sur les taux de fissions à burn-up initial sont très bons à l'échelle de l'assemblage pour les schémas 100%ALAMOS et REL2005, affichant des écarts moyens respectifs de 0.71% et 0.36%, sur les figures 5.42 et 5.44. Cependant, pour le schéma 100%ALAMOS, la cellule contenant du gadolinium affiche un écart supérieur à 4.0%, l'écart maximal observé sur les autres cellules est de 1.5%, sans lien direct avec la proximité d'hétérogénéités. Pour les deux schémas de calcul, la cellule contenant du gadolinium affiche l'écart le plus important à burn-up initial, 5.0% pour le schéma 100%ALAMOS et 5.3% pour le schéma REL2005. Avec les deux schémas, les fissions dans les cellules contenant du gadolinium sont sous-estimées à burn-up initial et surestimées en fin de burn-up.

Les résultats obtenus sur les taux de fission s'améliorent en évolution avec le schéma 100%ALAMOS, donnant un écart moyen de 0.35% à burn-up final et un écart maximal de 2.1% (cet écart maximal n'est pas observé sur la cellule contenant du gadolinium). Finalement, les résultats obtenus en évolution sur les taux de fission témoignent une nouvelle fois de la très bonne stabilité du schéma 100%ALAMOS. À burn-up final, les écarts obtenus avec le schéma REL2005 augmentent en moyenne, affichant un écart moyen de 0.86%, toujours inférieur à 1.0%. La cellule affichant l'écart maximal est celle contenant du gadolinium, dont l'écart atteint 2.4%. Comme attendu, la conclusion principale des résultats obtenus sur les taux de fission, avec les deux schémas de calcul, est l'impact non négligeable de la présence de gadolinium dans le combustible, sur la divergence observée entre DRAGON5 et Serpent2, dans les cellules concernées.

Les figures 5.46 à 5.49 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de capture radiative dans le groupe 1, à burn-up initial et burn-up final, pour les deux schémas de calcul DRAGON5, pour l'assemblage 398GO.

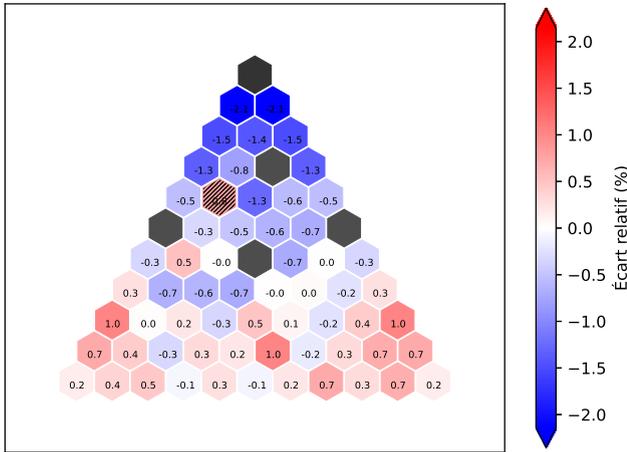


FIGURE 5.46 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

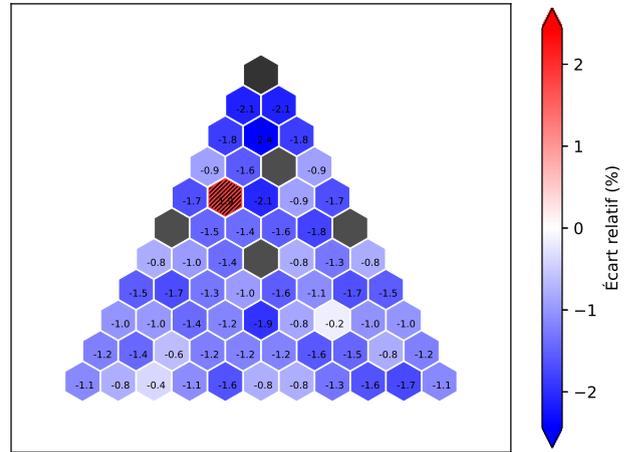


FIGURE 5.47 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

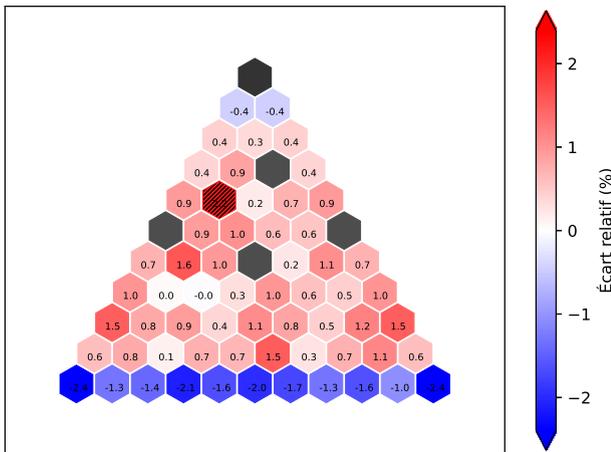


FIGURE 5.48 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

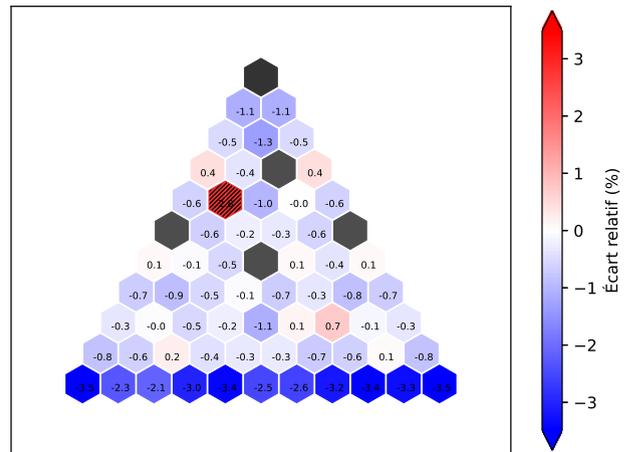


FIGURE 5.49 – 398GO : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

Pour l'assemblage 398GO, tout comme pour les taux de fissions, le schéma 100%ALAMOS donne de meilleurs résultats sur les écarts relatifs maximum, que le schéma REL2005. Cependant, en valeur moyenne, les résultats obtenus par le schéma REL2005 sont parfois meilleurs que ceux obtenus avec le schéma 100%ALAMOS. À burn-up initial, le critère de validation est atteint sur la totalité des cellules avec le schéma 100%ALAMOS, la figure 5.46 affichant un écart maximal de 2.1% et un écart moyen de 0.57% sur l'ensemble de l'assemblage. L'écart moyen est de 0.91% pour le schéma REL2005, toutes les cellules affichent un écart inférieur à 4.0% à burn-up initial, comme illustré sur la figure 5.48. À burn-up initial, l'écart observé sur la cellule contenant du gadolinium ne se démarque pas des autres avec le schéma 100%ALAMOS. Pour le schéma REL2005, à burn-up initial, bien que la cellule contenant du gadolinium affiche des écarts plus importants, l'impact de la mauvaise prise en compte des stiffeners et de la lame d'eau reste prépondérant, avec des écarts maximum observés s'élevant à 2.4% dans les angles des stiffeners.

En fin de burn-up, le schéma 100%ALAMOS sous-estime de nouveau la puissance délivrée par capture radiative à l'exception de la cellule contenant du gadolinium, qui affiche un écart de 1.9%. Pour le

schéma REL2005, bien que l'écart moyen soit meilleur que pour le schéma 100%ALAMOS, l'écart maximal reste supérieur et toujours situé aux frontières de l'assemblage. Le critère de validation est atteint pour le schéma REL2005, tant sur l'écart moyen que sur l'écart maximal. L'écart moyen du schéma 100% ALAMOS est de 1.30%, dépassant le seuil imposé de 1.00%. Les figures 5.47 et 5.49 montrent une nouvelle fois la divergence des résultats en évolution pour le schéma de calcul REL2005, notamment au niveau des cellules aux frontières, là où le schéma 100%ALAMOS est plus stable en évolution, malgré de moins bons résultats en moyenne.

Le tableau 5.7 ci-après résume les résultats observés sur les taux de réaction à l'échelle de l'assemblage complet.

	100%ALAMOS				REL2005			
	$\tau_{f,2,BU0_60}$		$\tau_{c,1,BU0_60}$		$\tau_{f,2,BU0_60}$		$\tau_{c,1,BU0_60}$	
	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60
$ \Delta\tau_{i,min} $ (%)	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.2
$ \Delta\tau_{i,max} $ (%)	5.0	2.1	2.1	2.4	5.3	2.4	2.4	3.5
$ \overline{\Delta\tau_i} $ (%)	0.71	0.35	0.57	1.30	0.36	0.86	0.91	0.96
$ \Delta\tau_{i,max} < 4.0\%$	x	v	v	v	x	v	v	v
$ \overline{\Delta\tau_i} < 1.0\%$	v	v	v	x	v	v	v	v
Validation critères	x	v	v	x	x	v	v	v

TABLE 5.7 – Assemblage 398GO : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU0_60}$ et les $\tau_{c,1,BU0_60}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.

5.5.4 Assemblage 39AWU

Les figures 5.50 à 5.53 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de fission dans le groupe 2, à burn-up initial et burn-up final, pour les deux schémas de calcul DRAGON5, pour l'assemblage 39AWU. Pour rappel, cet assemblage est le plus hétérogène de l'étude, il contient neuf cellules gadolinium, comme illustré par la figure 2.4.

Les accords obtenus sur les taux de fissions à burn-up initial sont très bons à l'échelle de l'assemblage pour les schémas 100%ALAMOS et REL2005, affichant des écarts moyens respectifs de 0.79% et 0.64%, sur les figures 5.50 et 5.52. Cependant, pour les deux schémas, les quatre cellules contenant du gadolinium affichent des écarts supérieurs à 4.0%, 4.7% pour le schéma 100%ALAMOS et 7.2% pour le schéma REL2005, là où les écarts maximaux observés sur les cellules n'en contenant pas sont respectivement de 2.1% et 1.9%. L'obtention d'écarts plus importants au niveau des cellules gadolinium, avec le schéma REL2005, est imputé au regroupement de leurs cellules voisines en une unique famille. Ces écarts pourraient être diminués en optimisant le regroupement de ces cellules, conformément à la piste d'amélioration D4 du tableau 7.2. L'obtention d'écarts moyens supérieurs avec le schéma 100%ALAMOS s'explique par l'utilisation d'une géométrie ALAMOS SSH, et pourrait être résolu en explorant la piste d'amélioration D1 du tableau 7.2.

En utilisant les deux schémas, 100%ALAMOS et REL2005, les fissions dans les cellules contenant du gadolinium sont sous-estimées à burn-up initial et surestimées en fin de burn-up, comme l'attestent les figures 5.51 et 5.53, comme déjà observé pour l'assemblage 398GO. Les résultats obtenus sur les taux de fission s'améliorent en évolution avec le schéma 100%ALAMOS, donnant un écart moyen de 0.64% à burn-up final et ne dépassant jamais les 2.8%. Pour le schéma REL2005, bien que les écarts observés sur les cellules contenant du gadolinium diminuent et ne dépassent pas 3.9%, les écarts globaux augmentent, avec une moyenne qui s'élève à 1.05%. Aucun des deux schémas ne valide les deux critères (écart moyen et écart maximal) sur l'ensemble de l'irradiation.

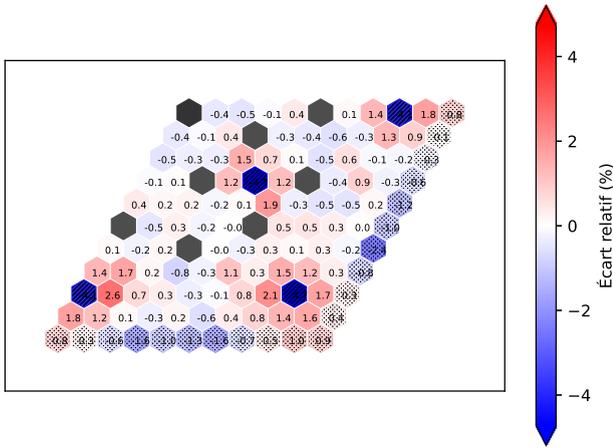


FIGURE 5.50 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

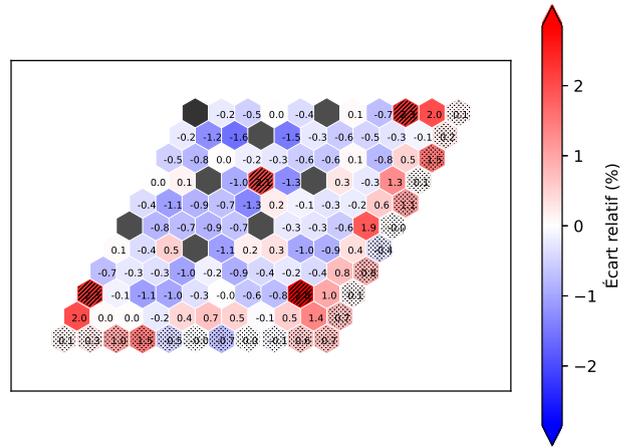


FIGURE 5.51 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

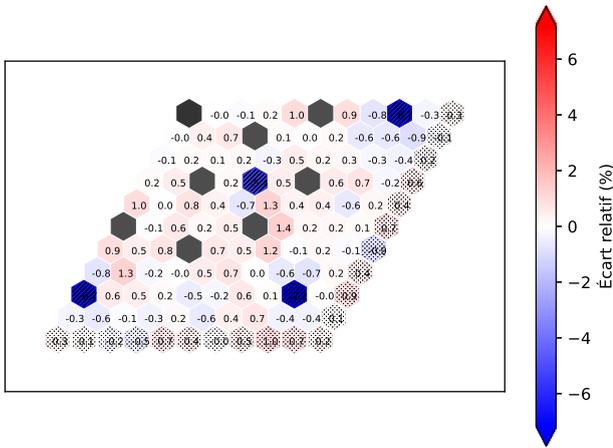


FIGURE 5.52 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

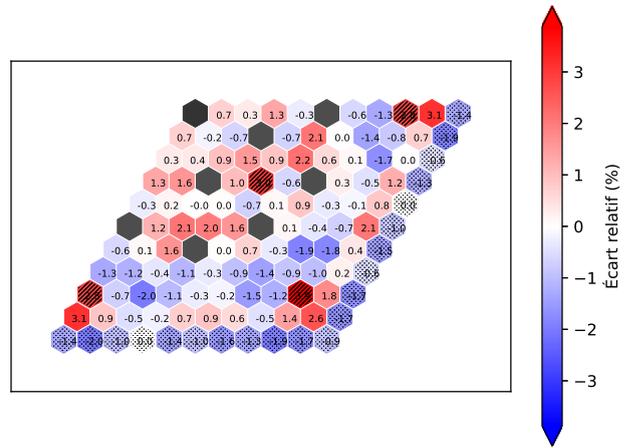


FIGURE 5.53 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{f,2,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

Les figures 5.54 à 5.57 ci-dessous illustrent la distribution des écarts relatifs sur les taux de capture radiative dans le groupe 1, à burn-up initial et burn-up final, pour les deux schémas de calcul DRAGON5, pour l'assemblage 39AWU.

Pour l'assemblage 39AWU, le schéma 100%ALAMOS donne de meilleurs résultats, en moyenne et en valeur maximale, sur les écarts relatifs des taux de capture radiative que le schéma REL2005. À burn-up initial, l'écart moyen est de 0.74% pour le schéma 100%ALAMOS avec un écart maximal observé de 2.5%, là où l'écart moyen atteint 0.81% pour le schéma REL2005, avec un écart maximal observé sur les cellules contenant du gadolinium de 3.1%. Comme pour la fission, les écarts observés sur les cellules contenant du gadolinium sont davantage marqués pour le schéma REL2005. Sur l'ensemble du burn-up, les deux schémas surestiment les captures radiatives pour les cellules contenant du gadolinium. La dernière observation formulée à burn-up initial concerne les cellules aux frontières, dont les captures sont surestimées par le schéma 100%ALAMOS et sous-estimées par le schéma REL2005, du fait de ses géométries natives peu précises.

En fin de burn-up, les deux schémas sous-estiment globalement les captures radiatives, à l'exception des cellules contenant du gadolinium. Là où les écarts maximum restent observés aux frontières de l'assemblage pour le schéma REL2005, à burn-up final, ces derniers sont maximum à proximité du trou central pour le schéma 100%ALAMOS, comme illustré sur les figures 5.55 et 5.57. Pour ces deux schémas, le critère de validation n'est pas atteint en fin de burn-up, avec des écarts moyens respectifs

de 1.22% et 1.16%. Comme illustré par les figures 5.50 à 5.57, la présence de gadolinium dans certaines cellules de l'assemblage crée des écarts importants pour les deux schémas de calculs entre les résultats DRAGON5 et Serpent2. Cependant, ces écarts sont davantage marqués pour les réactions de fission que pour les captures radiatives.

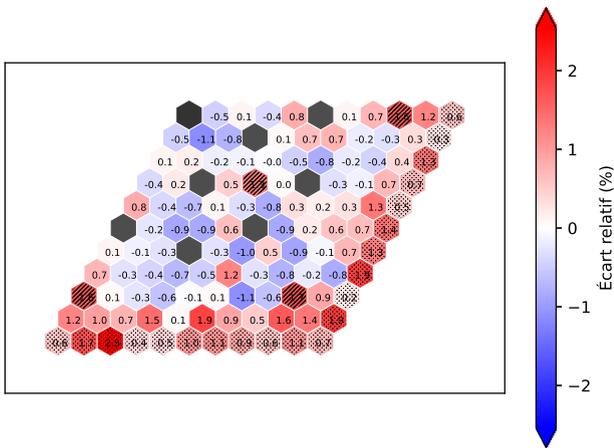


FIGURE 5.54 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

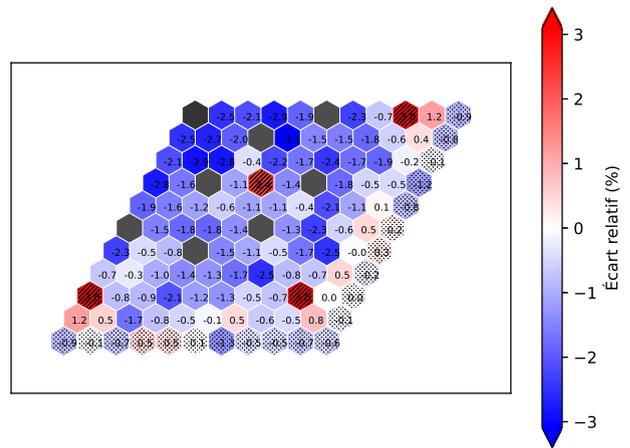


FIGURE 5.55 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul 100%ALAMOS.

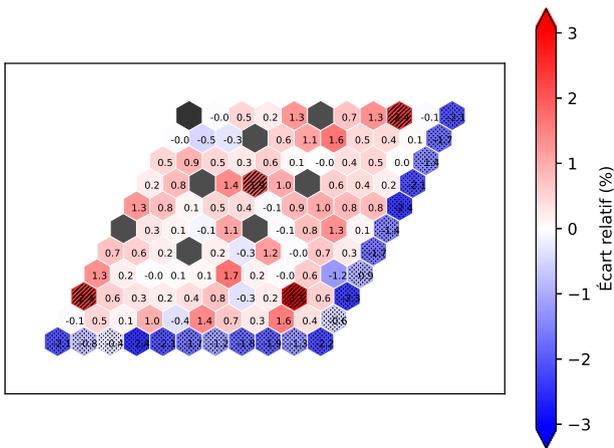


FIGURE 5.56 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_0}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

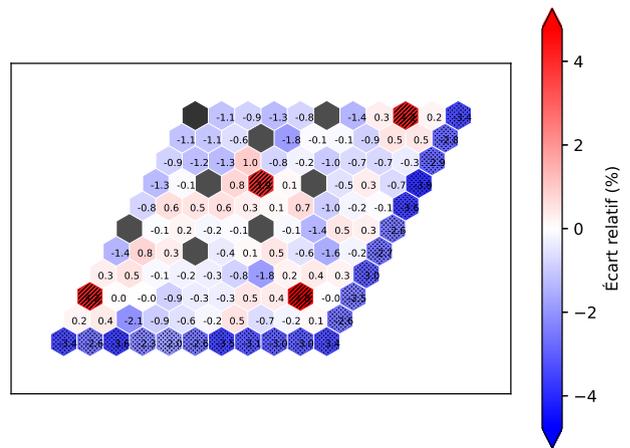


FIGURE 5.57 – 39AWU : Distribution $\Delta\tau_{c,1,BU_{60}}$, D5-S2, pour le schéma de calcul REL2005.

Le tableau 5.8 ci-dessous résume les résultats observés sur les taux de réaction à l'échelle de l'assemblage complet.

	100%ALAMOS				REL2005			
	$\tau_{f,2,BU0_60}$		$\tau_{c,1,BU0_60}$		$\tau_{f,2,BU0_60}$		$\tau_{c,1,BU0_60}$	
	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60	BU0	BU60
$ \Delta\tau_{i,min} $ (%)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$ \Delta\tau_{i,max} $ (%)	4.7	2.8	2.5	3.1	7.2	3.9	3.1	4.8
Type cellule écart maximal	Gd	Gd	UOx	UOx	Gd	Gd	Gd	Gd
$ \overline{\Delta\tau_i} $ (%)	0.79	0.64	0.74	1.22	0.64	1.05	0.81	1.16
$ \Delta\tau_{i,max} < 4.0\%$	x	v	v	v	x	v	v	x
$ \overline{\Delta\tau_i} < 1.0\%$	v	v	v	x	v	x	v	x
Validation critères	x	v	v	x	x	x	v	x

TABLE 5.8 – Assemblage 39AWU : écarts observés sur les $\tau_{f,2,BU0_60}$ et les $\tau_{c,1,BU0_60}$ entre D5 et S2 pour les schémas de calcul 100%ALAMOS et REL2005.

5.6 Conclusion

Au terme de ce chapitre central du rapport, la capacité du code DRAGON5 à simuler des assemblages de VVER est démontrée.

Concernant les grandeurs globales, les deux schémas de calcul permettent d'obtenir des résultats satisfaisants sur les quatre assemblages de l'étude, malgré une divergence en évolution plus marquée pour le schéma REL2005. L'ensemble des courbes de k_{eff} se trouvent, aux incertitudes près, dans les 350 pcm d'écart aux calculs de référence de Serpent2. Seule celle de l'assemblage 39AWU en REL2005 fait exception. La précision de calcul des concentrations isotopiques est plus hétérogène mais reste satisfaisante. Seuls les isotopes du gadolinium présentent des écarts bien supérieurs aux limites établies. Malgré une géométrie de calcul de flux peu raffinée, le schéma 100%ALAMOS fournit des résultats en moyenne plus précis et surtout plus stables au cours de l'irradiation.

La synthèse quantitative des grandeurs globales pour les calculs d'assemblage est faite dans le tableau 5.9 ci-dessous.

	$\Delta k_{eff} < 300pcm$		$\Delta N_i < 2\%$	
	100%ALAMOS	REL2005	100%ALAMOS	REL2005
Assemblages sans gadolinium	v	v	8/11	5/11
Assemblages avec gadolinium	v	x	6/11	6/11

TABLE 5.9 – Synthèse des grandeurs globales pour les calculs d'assemblage.

Concernant les grandeurs locales, les deux schémas de calcul permettent également d'obtenir des résultats satisfaisants. La comparaison des taux de réaction, cellule par cellule, met en évidence les forces et faiblesses de chacun d'entre eux. Le schéma 100%ALAMOS, comme pour les grandeurs locales, est en moyenne plus précis et plus stable en évolution que le schéma REL2005. Toutefois, la mauvaise discrétisation du modérateur de sa géométrie ALAMOS SSH génère des écarts, parfois importants, au voisinage direct des cellules empoisonnées. Les deux faiblesses principales du schéma REL2005 sont le regroupement de cellules des géométries natives et l'absence de prise en compte de la lame d'eau et des stiffeners dans ces mêmes géométries. Elles causent des écarts notables dès le premier pas de

burn-up, mais surtout en évolution, répercutés à l'échelle des grandeurs locales. Le schéma REL2005 fournit toutefois des résultats plus précis à proximité directe des hétérogénéités, grâce à sa géométrie ALAMOS MOC de calcul de flux du deuxième niveau.

La synthèse quantitative des grandeurs locales pour les calculs d'assemblage est faite dans le tableau 5.10 ci-dessous. Les résultats sont moyennés par type d'assemblage et sur les pas de burn-up initiaux et finaux. Cette synthèse souligne l'impact notable des cellules empoisonnées sur la précision du calcul des grandeurs locales.

	Moyenne des écarts moyens (%)		Moyenne des écarts maximaux (%)	
	100%ALAMOS	REL2005	100%ALAMOS	REL2005
Assemblages sans gadolinium	0.64	0.88	1.41	2.31
Assemblages avec gadolinium	0.79	0.84	3.08	4.07

TABLE 5.10 – Synthèse des grandeurs locales pour les calculs d'assemblage.

CHAPITRE 6 LIVRABLE

6.1 Introduction

Les chapitres 4 et 5 ci-avant ont détaillé l'architecture des schémas de calcul DRAGON5, à l'échelle de la cellule et de l'assemblage, ainsi que les résultats obtenus et leur comparaison à Serpent2. En plus du développement de ces schémas de calcul et de leur validation par un code stochastique, l'objectif de ce projet est la création d'un livrable. Ce livrable, à destination des exploitants de VVER, doit être autosuffisant pour réaliser les calculs présentés dans ce rapport et simple d'utilisation. Ce chapitre détaille les fonctionnalités assurées par le livrable ainsi que les caractéristiques de son architecture logicielle.

6.2 Fonctionnalités du livrable

Les fonctionnalités du livrable sont regroupées en trois domaines, énumérés ci-dessous et déclinés dans les sous-sections suivantes :

- A. architecture logicielle** : quelles sont les caractéristiques logicielles du livrable garantissant à l'utilisateur une exécution simple ;
- B. capacités de simulation** : quels éléments le livrable est capable de simuler, avec quelle précision et quels sont les objets générés en fin de calcul ;
- C. capacités annexes à la simulation** : quelles sont les fonctionnalités annexes, non-directement liées aux schémas de calcul, qui permettent d'améliorer l'expérience d'utilisation ou l'exploitation des résultats.

6.2.1 Architecture logicielle

Les fonctionnalités du livrable liées à son architecture logicielle sont présentées dans le tableau 6.1 ci-dessous.

A. Architecture logicielle	
Fonctionnalité	Description
A1. Autosuffisance du livrable	: suite à son implémentation dans l'arborescence de la Version5 [11], l'ensemble des fonctionnalités du livrable sont disponibles, sans modification ou ajout d'autre fichier
A2. Simplicité d'utilisation	: l'utilisateur peut exécuter des calculs sans avoir à entrer dans la complexité des schémas de calcul DRAGON5, aucune modification des jeux de données CLE-2000 n'est requise
A3. Simplicité d'interfaçage	: le livrable est facilement interfaçable avec d'autres logiciels ou schémas de calcul

TABLE 6.1 – Fonctionnalités du livrable liées à l'architecture logicielle.

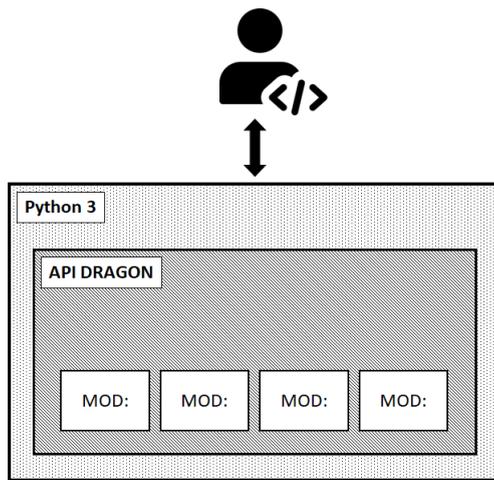


FIGURE 6.1 – Principe d’encapsulation des schémas de calcul DRAGON5.

Les fonctionnalités A2 et A3 sont permises grâce à l’encapsulation des schémas de calcul DRAGON5 par une couche de code implémentée en Python 3, comme présenté en figure 6.1 ci-contre. Cette encapsulation permet d’intégrer efficacement les calculs complexes liés à la neutronique tout en profitant de la flexibilité et de la puissance de programmation offertes par Python 3. Grâce à cette approche, l’utilisateur paramètre et exécute les calculs à partir d’une interface Python simplifiée, qui appelle les procédures CLE-2000 de DRAGON5. Les objets numériques générés par les calculs sont importés dans l’environnement Python et peuvent alors être simplement manipulés. Ce dernier point facilite l’interfaçage avec d’autres logiciels ou schémas de calcul. L’encapsulation Python 3 est réalisée via la librairie PyGan de la Version 5. [4]

6.2.2 Capacités de simulation

Les fonctionnalités du livrable liées à ses capacités de simulation sont présentées dans le tableau 6.2 ci-dessous. Ces fonctionnalités sont directement issues de l’architecture des schémas de calcul DRAGON5, présentés en sections 4.3 et 5.3. Aucune autre description n’est fournie dans cette sous-section.

B. Capacités de simulation

Fonctionnalité	Description
B1. Calcul de cellule	: le livrable est capable de réaliser des calculs à l’échelle de la cellule, à burn-up fixe ou en évolution, sur différents types de cellules
B2. Calcul d’assemblage	: le livrable est capable de réaliser des calculs à l’échelle de l’assemblage, à burn-up fixe ou en évolution, sur différents types d’assemblages
B3. Génération MULTICOMPO	: le livrable permet de générer des bibliothèques multi-paramétrées de sections efficaces microscopiques ou macroscopiques, pour une utilisation ultérieure dans un code de cœur par exemple. Le format MULTICOMPO, natif de DRAGON5, a été choisi. Il serait aisé de le remplacer par le format MPO d’APOLLO3.

TABLE 6.2 – Fonctionnalités du livrable liées aux capacités de simulation.

6.2.3 Capacités annexes à la simulation

Les fonctionnalités du livrable liées à ses capacités annexes à la simulation sont présentées dans le tableau 6.3. Ces fonctionnalités sont assurées par la fonction `vverCOMP.py`, abordée en section 6.3.

6.3 Architecture logicielle du livrable

L’architecture logicielle détaillée du livrable est présentée en figure 6.2 ci-dessous. Elle est constituée d’une fonction principale, appelée *main* et notée `VVER.py` sur le graphique. C’est la fonction exécutée par l’utilisateur pour lancer un calcul. C’est également dans cette fonction que les différents paramètres

C. Capacités annexes

Fonctionnalités	Description
C1. Post-traitement des résultats	: le livrable est capable de représenter graphiquement les grandeurs d'intérêt issues des simulations (k_{eff} , N_i , distribution locale des taux de fission et de capture radiative)
C2. Comparaison à Serpent2	: le livrable est capable de comparer les résultats des simulations aux calculs de référence réalisés avec Serpent2 et de représenter graphiquement ces comparaisons pour les grandeurs d'intérêt. Le logiciel SerpentTools est utilisé à cette fin [3].

TABLE 6.3 – Fonctionnalités du livrable liées aux capacités annexes à la simulation.

du calcul sont renseignés : nom de l'assemblage ou de la cellule, liste des pas de burn-up, liste des pas d'autoprotection, paramètres de tracking, nom de la MULTICOMPO, paramètres de visualisation des résultats, etc...

Le *main* fait appel à d'autres fonctions, appelées fonctions secondaires, et représentées en traits pleins colorés sur le graphique. Elles constituent les cinq grandes étapes d'un calcul : la définition de la géométrie, la déclaration des différentes mixtures, la réalisation des tracking, l'exécution du calcul de flux (en évolution ou non) et le post-traitement des résultats. Lorsque cela est nécessaire, les fonctions secondaires sont particularisées pour un type de schéma de calcul.

Les fonctions secondaires font appel aux procédures CLE-2000 de DRAGON5, représentées en traits pleins noirs sur le graphique. C'est dans ces procédures que réside la complexité du jeu de données et que les modules de DRAGON5 sont appelés. Ces procédures peuvent elles aussi être particularisées pour un type de schéma de calcul.

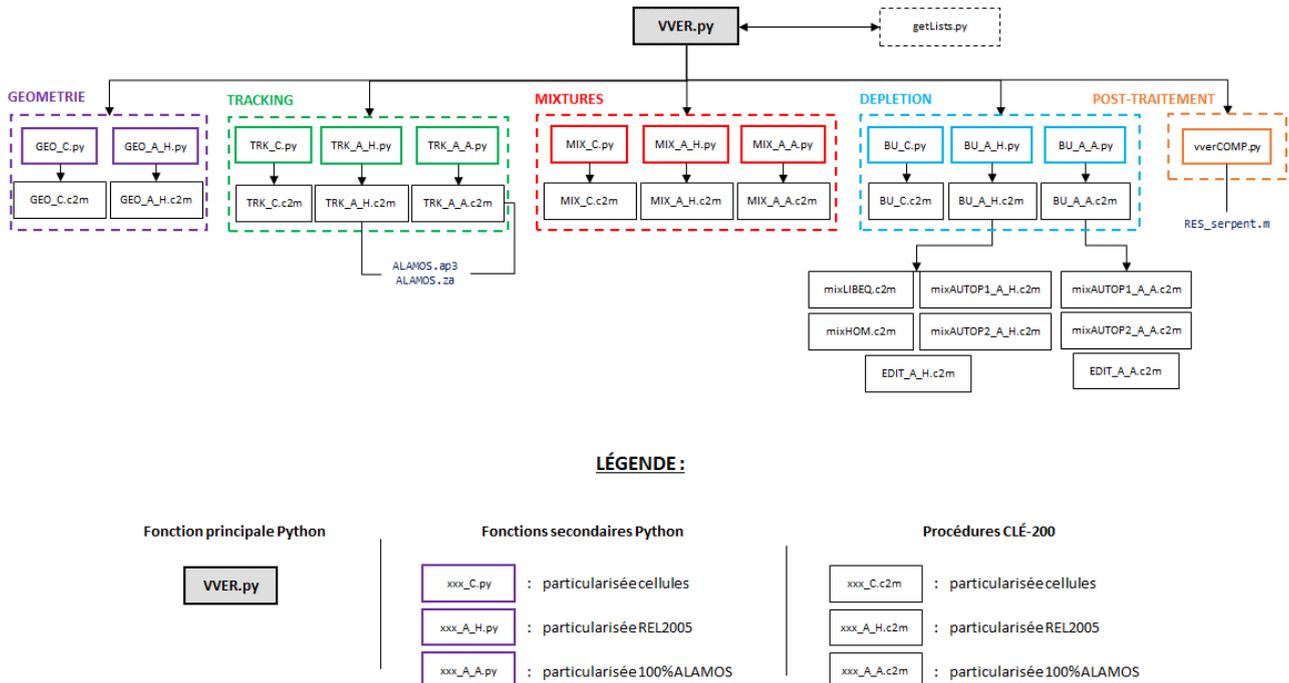


FIGURE 6.2 – Architecture logicielle détaillée du livrable.

6.4 Accès au livrable et installation

Le livrable est disponible sous forme d'archive (`archive_VVER_DRAGON_dataset_20230912.tgz`) sur la page de physique des réacteurs de l'École Polytechnique de Montréal [18]. L'archive doit être téléchargée, placée dans l'arborescence de la Version5 conformément à la figure 6.3 ci-dessous, puis décompressée. Pour effectuer un calcul, il faut exécuter la commande `./rpython VVER.py` depuis le répertoire `Version5_evXXXX/PyGan/`. Les paramètres du calcul sont modifiés en éditant le *main* : `VVER.py`.



FIGURE 6.3 – Emplacement de l'archive dans l'arborescence de la Version 5 et éléments constitutifs de l'archive.

6.5 Conclusion

Ce chapitre a détaillé les fonctionnalités du livrable final résultant de ce projet. L'architecture logicielle mise en place garantit à l'utilisateur une expérience d'utilisation simplifiée et une exécution aisée des calculs complexes. L'autosuffisance du livrable, son interfaçage simplifié avec d'autres logiciels, ainsi que sa simplicité d'utilisation, sans nécessiter de modification des jeux de données CLÉ-2000, démontrent l'efficacité de l'encapsulation des schémas de calcul DRAGON5 par une couche de code Python 3.

Les capacités de simulation du livrable couvrent un large éventail de domaines, allant des calculs à l'échelle de la cellule aux simulations d'assemblages, en passant par la génération de bibliothèques de sections efficaces. Les fonctionnalités annexes à la simulation, telles que le post-traitement des résultats et la comparaison avec Serpent2, enrichissent l'expérience d'utilisation et offrent des outils pour évaluer la validité des résultats obtenus.

CHAPITRE 7 AVENIR DU PROJET

7.1 Introduction

Au terme de ce rapport, il est essentiel de mettre en évidence les pistes d'amélioration et les perspectives d'évolution qui guideront le futur du projet. Ce chapitre, dans sa section 7.2, explore les voies envisageables pour améliorer la précision des schémas de calcul et l'expérience utilisateur du livrable. La section 7.3 aborde les perspectives d'évolution globales, ouvrant la voie à des développements futurs, dans le cadre de projets universitaires ou industriels.

7.2 Pistes d'amélioration

Les pistes d'amélioration pour affiner la précision des schémas Serpent2 et DRAGON5, et pour optimiser l'expérience utilisateur du livrable sont présentées dans les tableaux 7.1, 7.2 et 7.3 ci-dessous.

SCHÉMA DE CALCUL SERPENT2

S1 : Modification des bibliothèques utilisées par Serpent2

Les calculs DRAGON5 et Serpent2 de ce projet sont réalisés avec des bibliothèques issues de la bibliothèque de données nucléaires JEFF 3.1.1. Les bibliothèques utilisées par Serpent2 sont continues en énergie, au format ACE, et celles de DRAGON5 sont multi-groupes, au format Draglib. Leur génération par NJOY est schématisée en figure 7.1.

Les bibliothèques livrées avec Serpent2 sont au format ACE standard, permettant uniquement d'utiliser un modèle de dépôt d'énergie basique. Dans celui-ci, toute l'énergie est libérée par la fission, déposée localement à l'endroit de la réaction, et de valeur constante. Cette énergie de fission est augmentée de quelques MeV pour prendre en compte le dépôt d'énergie par capture radiative (pouvant atteindre 8 MeV par capture). Des modèles plus précis sont disponibles dans Serpent2 [21], mais nécessitent des données qui ne sont pas disponibles dans les bibliothèques au format ACE standard. Des fichiers ACE distribués séparément contenant des données supplémentaires sont nécessaires pour utiliser ces modes.

La piste d'amélioration proposée est d'utiliser une bibliothèque ACE plus complète, et cohérente avec la Draglib utilisée par DRAGON5, pour employer le modèle de dépôt d'énergie de mode 2 [21]. Ce modèle, plus complet, permet en particulier de mieux prendre en compte, spatialement et énergétiquement, l'énergie déposée suite aux réactions (n,γ) , notamment favorisées par la présence d'isotopes du gadolinium. Le code DRAGON5 utilise un modèle de dépôt d'énergie semblable au mode 2 de Serpent2.

L'exploration de cette piste en fin de projet a montré des résultats très prometteurs. L'utilisation d'un modèle de dépôt d'énergie basique dans Serpent2 semble être à l'origine des importants écarts de k_{eff} observés en évolution, entre DRAGON5 et Serpent2, pour les cellules gadolinium. Se référer à la section 4.4.2.3.

TABLE 7.1 – Pistes d'amélioration du schéma de calcul Serpent2.

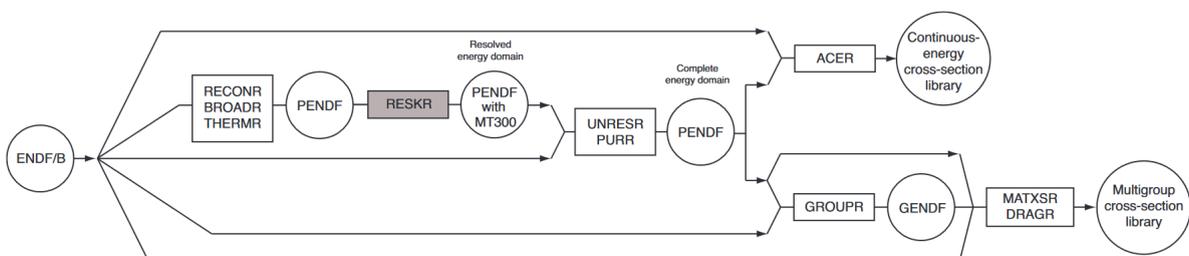


FIGURE 7.1 – Diagramme de flux des modules de NJOY. [24]

		D1	: Utilisation d'une géométrie MOC pour le calcul de flux	<p>Comme présenté en sous-section 5.3.1, pour des raisons d'incompatibilité des fichiers ALAMOS, le schéma de calcul 100%ALAMOS utilise une géométrie SSH, à la fois pour le calcul d'autoprotection des résonances et pour le calcul de flux. Adapter les fichiers ALAMOS pour réaliser le calcul de flux sur une géométrie MOC permettrait de gagner en précision.</p>
ALAMOS		D2	: Droit d'utilisation de l'interface ALAMOS	<p>L'accès à l'interface ALAMOS [6] permettrait l'adaptation des maillages et des mixtures des géométries générées en fonction des besoins spécifiques des schémas de calcul DRAGON5. En particulier, cela offrirait la possibilité d'une numérotation pratique des mixtures, permettant de réduire la complexité des jeux de données DRAGON5.</p>
		D3	: Réalisation d'un schéma REL2005 100%ALAMOS	<p>L'utilisation d'une géométrie MOC pour le calcul de flux à 295 groupes d'énergie du schéma 100%ALAMOS serait trop couteux en temps de calcul. Il serait alors nécessaire de réaliser un schéma simili-REL2005 utilisant uniquement des géométries ALAMOS.</p>
<hr/>				
		D4	: Optimisation des familles de cellules physiques	<p>Comme observé en section 5.5, le regroupement en famille des cellules physiques pour le calcul d'autoprotection et le calcul de flux du premier niveau, peut générer des biais de simulation en évolution. Il serait intéressant d'optimiser les regroupements réalisés sur les différents assemblages afin de diminuer les écarts constatés.</p>
REL2005		D5	: Modification du chaînage des modules	<p>En cas d'amélioration insuffisante apportée par la piste D4, il serait intéressant d'évaluer l'impact de la suppression du regroupement en familles pour le calcul de flux du premier niveau. Il faudrait alors utiliser une géométrie moins raffinée pour éviter une augmentation trop importante du temps de calcul.</p>
		D6	: Raffinement des géométries natives	<p>Les géométries natives, d'autoprotection et du premier niveau, détaillées en partie 5.3.2.1, présentent peu de raffinement. En particulier, la lame d'eau et les stif-feners ne sont prises en compte que dans la géométrie du deuxième niveau. Il serait intéressant de les prendre en compte, dans les géométries natives, en les diluant dans les régions de modérateur bordant l'assemblage.</p>
<hr/>				
		D7	: Raffinement de la méthode d'autoprotection	<p>De nombreux écarts observés sont imputés au calcul d'autoprotection des résonances, en particulier sur les cellules et assemblages empoisonnés au gadolinium. Même si le module USS: n'est pas directement incriminé, un nouveau module d'autoprotection, AUTO:, basé sur la méthode Autosecol, à récemment été développé et implémenté dans la Version 5, par l'EPM. Une description précise est fournie dans le guide DRAGON5 [8]. Il serait intéressant de tester ce nouveau module d'autoprotection à l'échelle de la cellule, sur les cas problématiques identifiés, puis, une fois optimisé, à l'échelle de l'assemblage. De nouvelles Draglib doivent également être générées afin de traiter les résonances des isotopes du gadolinium se trouvant à des énergies inférieures à 4 eV.</p>
Communes				

TABLE 7.2 – Pistes d'amélioration des schémas de calcul DRAGON5.

L1 : Amélioration de la robustesse

L'architecture actuelle du livrable, détaillée en section 6.3 en fait un objet peu robuste. Trop de paramètres et d'options de calcul, directement modifiables dans le *main*, peuvent mener à un échec des calculs. La diminution au strict nécessaire du nombre de paramètres modifiables dans le *main*, et une suppression des combinaisons menant à un échec des calculs semblent nécessaires. C'est une tâche jugée aisée, qui n'a toutefois pas été identifiée comme prioritaire dans le temps imparti au projet.

L2 : Amélioration de l'ergonomie

L'ergonomie actuelle du livrable présente plusieurs voies d'amélioration :

- comme pour la tâche L1, réduire au strict minimum les données d'entrées nécessaires dans le *main* pour faciliter l'exécution d'un calcul ;
- diminuer le nombre de fonctions secondaires spécialisées pour simplifier l'architecture et la maintenance du livrable ;
- intégrer l'exécution de calculs Serpent2 au livrable.

TABLE 7.3 – Pistes d'amélioration de l'expérience utilisateur du livrable.

7.3 Perspectives d'évolution

Les perspectives d'évolution globales du projet sont présentées dans le tableau 7.4 ci-dessous.

PERSPECTIVES D'ÉVOLUTION

P1 : Réalisation de calculs de branchement

Dans le cadre de ce projet, les calculs DRAGON5 sont réalisés avec des paramètres de fonctionnement fixés (température modérateur, température combustible, concentration en bore, position des absorbants. etc...). La première évolution envisagée est la réalisation de calculs de branchement, où les différentes situations d'exploitation du réacteur sont simulées. L'objectif est de générer une MULTICOMPO, bibliothèque multi-paramétrée de sections efficaces macroscopiques, pour alimenter un calcul cœur complet. Il sera également nécessaire d'effectuer une recherche de laplacien intégral (TYPE B) lors du calcul de flux.

P2 : Chaînage avec DONJON5 pour calcul en cœur complet

Suite à la réalisation de P1, la suite naturelle du projet est de réaliser des calculs en cœur complet avec DONJON5. Cette nouvelle étape permettrait de statuer sur la capacité de la Version5 à fournir une alternative open-source à l'ensemble des calculs de neutronique réalisés dans le cadre du projet CAMIVVER.

P3 : Adaptation du schéma de calcul Serpent2

Afin de valider tout ou partie des calculs de branchement effectués avec DRAGON5 et des calculs en cœur complet de DONJON5, le schéma de calcul Serpent2 devra être maintenu et adapté.

TABLE 7.4 – Perspectives d'évolution du projet.

CHAPITRE 8 CONCLUSION

8.1 Synthèse des travaux

Au terme de ce projet, l'objectif principal est atteint. Les calculs menés avec DRAGON5, et leur validation par le code stochastique Serpent2, ont permis de valider la capacité du code déterministe et open-source de l'École Polytechnique de Montréal, à effectuer des simulations d'assemblage de VVER.

8.1.1 À l'échelle de la cellule

Au cours de la première étape de validation, à l'échelle de la cellule, des travaux essentiels d'optimisation et de développement des modules de DRAGON5 ont été réalisés. Ces travaux ont été menés au cours de cette étape préliminaire afin de diminuer le temps de calcul associé, et d'assurer une précision suffisante des résultats pour la suite du projet. Ils ont permis une meilleure compréhension des phénomènes physiques mis en jeu et de leurs simulations par les codes de neutronique. Pour le cas particulier des cellules combustibles de cette étude, plusieurs enseignements ont pu être tirés de cette étape d'optimisation, dont les principaux sont listés ci-dessous :

- le raffinement des pas de burn-up en fin d'irradiation permet de diminuer la dérive des calculs déterministes, particulièrement présente lorsque l'enrichissement en ^{235}U est faible (cellule 22AU_22UOx avec un enrichissement à 2,2%);
- il n'est pas nécessaire d'effectuer le calcul d'autoprotection à chaque pas de burn-up, seul celui à burn-up initial est obligatoire, pour les autres, une liste optimisée doit être établie pour chaque type de cellule. Pour notre étude, seuls trois pas de burn-up sont autoprotégés, que ce soit pour les assemblages ou pour les cellules, avec ou sans gadolinium;
- concernant la liste des isotopes à autoprotéger, l'obtention d'une précision suffisante nécessite l'autoprotection de tous les isotopes du zirconium présents dans les gaines (^{90}Zr , ^{91}Zr , ^{92}Zr , ^{94}Zr et ^{96}Zr). Pour les cellules empoisonnées, tous les isotopes du gadolinium présents dans le combustible doivent être autoprotégés (^{154}Gd , ^{155}Gd , ^{156}Gd , ^{157}Gd , ^{158}Gd et ^{160}Gd).

Ces travaux d'optimisation ont conduit à l'amélioration significative des résultats initiaux, d'environ 2000 pcm sur le k_{eff} des cellules avec gadolinium et de 200 pcm sur celui des cellules sans gadolinium. Ils ont également permis de réduire considérablement les écarts obtenus sur les concentrations isotopiques en évolution.

Les calculs DRAGON5 sur les cellules UOx ont donné d'excellents résultats. Toutes les cellules présentent un écart inférieur à 200 pcm sur l'ensemble de l'irradiation du combustible. Sur les onze isotopes d'intérêt étudiés, tous, à l'exception des isotopes du gadolinium (^{155}Gd et ^{157}Gd), sont estimés avec un écart inférieur à 2.0%. Les cellules avec un enrichissement faible présentent une plus grande tendance à la dérive lors du calcul d'évolution.

Les résultats obtenus sur les cellules avec du gadolinium sont moins satisfaisants. En effet, l'accord sur le k_{eff} n'est obtenu pour aucune des cellules, tant que les isotopes du Gd n'ont pas été consommés. Le k_{eff} présente un écart de -700 pcm à burn-up initial et un pic à -2000 pcm à 5 GWj.t⁻¹. Ces écarts sont imputés à des imprécisions dans la manière d'autoprotéger certains isotopes du Gd et au modèle de dépôt d'énergie utilisé dans Serpent2, et font partie des pistes d'amélioration identifiées comme prioritaires. L'accord n'est obtenu que sur un seul isotope, l' ^{238}U , témoignant de la difficulté de simuler l'évolution du combustible, et en particulier des transuraniens, dans les crayons empoisonnés.

En résumé, à l'échelle de la cellule, les cellules UOx et Gd présentent de grandes disparités dans la précision de calculs. Les cellules UOx donnent des résultats tout à fait satisfaisants, alors que les cellules Gd nécessitent d'importants travaux pour correctement simuler les phénomènes physiques en leur sein. Parmi ces travaux, l'utilisation d'un modèle de dépôt d'énergie fin par le code stochastique et l'autoprotection des résonances des isotopes du gadolinium inférieures à 4 eV, constituent les pistes prioritaires à explorer.

8.1.2 À l'échelle de l'assemblage

Les premiers résultats d'assemblages ont validé les travaux d'optimisation réalisés à l'échelle de la cellule. En effet, l'immédiate obtention d'une précision satisfaisante et l'évolution semblable observée entre assemblages et cellules, permettent d'évaluer la pertinence de l'optimisation à l'échelle de la cellule, pour la plupart des paramètres. Cet enseignement précieux doit être exploité lors des futures étapes du projet.

Les assemblages UOx présentent des résultats très satisfaisants avec les deux schémas de calcul DRAGON5, tant sur les grandeurs globales que locales. Pour ces assemblages, les deux schémas de calcul donnent des écarts inférieurs à 300 pcm sur l'ensemble de l'irradiation. Pour ce qui est des concentrations isotopiques, le schéma 100%ALAMOS permet d'obtenir une évaluation plus précise : huit isotopes sur onze sont estimés avec une erreur relative inférieure à 2.00%, là où le REL2005 ne permet d'en estimer correctement que cinq sur onze. Les mêmes comportements sont observés qu'à l'échelle de la cellule, en particulier la divergence accentuée sur l'assemblage de faible enrichissement (22AU) et la difficulté de prise en compte des isotopes du gadolinium (^{155}Gd et ^{157}Gd). Concernant les grandeurs locales, les deux schémas de calcul permettent d'obtenir de bons résultats, mais le 100%ALAMOS est plus précis. En effet, le schéma simple niveau présente, en moyenne, des écarts relatifs moyens de 0.64% et des écarts relatifs maximum de 1.41%, sur les taux de réaction des assemblages sans gadolinium. Le schéma REL2005 présente lui, en moyenne, des écarts relatifs moyens de 0.88% et des écarts relatifs maximum de 2.31%.

Les assemblages avec des crayons empoisonnés au gadolinium présentent des résultats satisfaisants avec les deux schémas de calcul, tant sur les grandeurs globales que locales. Des tendances similaires aux calculs sur les assemblages non empoisonnés sont observées, en termes de précision et de stabilité. Pour ces assemblages, à l'exception d'un unique cas en REL2005, les schémas de calcul donnent des écarts inférieurs à 350 pcm sur toute la durée d'irradiation. Pour ce qui est des concentrations isotopiques, les deux schémas permettent d'obtenir une estimation correcte de six isotopes sur les onze d'intérêt, malgré une meilleure stabilité du schéma 100%ALAMOS. Concernant les grandeurs locales, le schéma simple niveau présente, en moyenne, des écarts relatifs moyens de 0.79% et des écarts relatifs maximum de 3.08%, sur les taux de réaction des assemblages empoisonnés. Le schéma à deux niveaux présente lui, en moyenne, des écarts relatifs moyens de 0.84% et des écarts relatifs maximum de 4.07%. Malgré l'obtention de résultats en moyenne plus précis avec le schéma 100%ALAMOS, le schéma REL2005 permet d'améliorer la prise en compte des phénomènes au voisinage direct des crayons contenant du gadolinium. Cependant, il présente des écarts plus importants au sein même des crayons empoisonnés.

Entre les assemblages avec et sans gadolinium, les grandeurs globales et les écarts moyens sur les taux de réaction sont sensiblement équivalents. La différence majeure réside dans les écarts maximum sur les taux de réaction. En effet, les hétérogénéités que constituent les crayons gadolinium génèrent des divergences notables entre les schémas déterministes et le schéma stochastique. Les écarts observés sont imputés :

- pour le schéma 100%ALAMOS : à l'utilisation d'une géométrie ALAMOS SSH pour le calcul de flux ;
- pour le schéma REL2005 : au manque de raffinement des géométries natives, ainsi qu'au regroupement en familles de cellules pour le calcul d'autoprotection et le calcul de flux du premier niveau ;
- pour le schéma Serpent2 : à l'utilisation d'un modèle de dépôt d'énergie élémentaire, prenant mal en compte les caractéristiques énergétiques et spatiales du phénomène de capture radiative.

8.2 Pistes d'amélioration et perspectives d'évolution

Plusieurs pistes d'amélioration des schémas de calcul ont été identifiées afin d'affiner la précision des résultats ou de corriger des défauts de fonctionnement. Certaines de ces pistes ont été partiellement explorées, fournissant d'ores et déjà des éléments de réponse intéressants mais également de nouveaux questionnements. Parmi ces pistes, celles pressenties comme prioritaires sont les suivantes :

- l'utilisation d'acelib permettant la prise en compte d'un modèle de dépôt d'énergie plus précis par Serpent 2 ;
- la réalisation d'un calcul d'autoprotection plus précis, sur la totalité des résonances des isotopes du gadolinium, mêmes inférieures à 4 eV ;
- l'optimisation du regroupement en familles des cellules des géométries natives du schéma REL2005, ou la modification du schéma pour s'affranchir de cette approximation destinée à accélérer les calculs ;
- le raffinement des géométries natives du schéma REL2005 pour intégrer la lame d'eau ainsi que les stiffeners séparant les assemblages ;
- l'utilisation d'une géométrie ALAMOS MOC pour le calcul de flux du schéma 100%ALAMOS et le développement d'un nouveau schéma 100%ALAMOS à deux niveaux.

Les résultats encourageants obtenus à l'échelle de l'assemblage, et la feuille de route constituée par les pistes d'amélioration, permettent de se projeter vers l'avenir du projet. Il est désormais envisageable de comparer les résultats des calculs avec ceux du code déterministe de référence du projet CAMIVVER, APOLLO3, et d'élaborer un schéma de calcul en cœur complet avec le code DONJON5

Finalement, de multiples améliorations des schémas de calcul restent nécessaires afin de garantir une précision suffisante pour une utilisation à des fins industrielles. Mais, à l'issue de ce projet, la capacité du code DRAGON5 à réaliser des calculs d'assemblages de réacteurs de type VVER ne fait plus aucun doute, et offre de nombreuses perspectives de développement passionnantes.

RÉFÉRENCES

- [1] Serpent wiki. 2022
https://serpent.vtt.fi/mediawiki/index.php/Main_Page.
- [2] A. Hebert et al. A. Brighenti, B. Vezzoni. Development of a multi-parameter library generator prototype for VVER and PWR applications based on APOLLO3. 2023.
- [3] S. Terlizzi et al. A. E. Johnson, D. Kotlyar. serpentTools : A Python Package for Expediting Analysis with Serpent. 2020
<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00295639.2020.1723992>.
- [4] R. Roy A. Hébert. THE GANLIB5 KERNEL GUIDE. 2022
<http://merlin.polymtl.ca/version5.htm>.
- [5] B. Vezzoni A. Willien. Definitions of tests cases for Verification and Validation of the multi-parametric library generator prototype. 2021.
- [6] Adrien Bruneton et al. Daniele Tomatis, François Bidault. Overview of SERMA's Graphical User Interfaces for Lattice Transport Calculations. 2022.
- [7] R.J Ellis. Analyses of Weapons-Grade MOX WER-1000 Neutronics benchmarks pin cell calculation with SCALE. 2000
<https://rsicc.ornl.gov/FMDP/tm2000-4.pdf>.
- [8] A. Hébert G. Marleau and R. Roy. A USER GUIDE FOR DRAGON VERSION5. 2023
<http://merlin.polymtl.ca/version5.htm>.
- [9] L. Ghasabyan. Validation of DRAGON5 lattice code for PWR (Pressurized Water Reactor) applications using depletion benchmarks by detailed comparison with SERPENT2 Monte Carlo code. 2020
http://merlin.polymtl.ca/downloads/2020_LevonGhasabyan.pdf.
- [10] A. Hébert. Polytechnique Montréal reactor physics archive page. 2023
<http://merlin.polymtl.ca/archives.htm>.
- [11] A. Hébert. About Version5. 2023
<http://merlin.polymtl.ca/version5.htm>.
- [12] M. B. Emmett et al. J. C. Gehin, C. Dourougie. Analysis of Weapons-Grade MOX VVER-1000 Benchmarks with HELIOS and KENO. 1999
<https://www.osti.gov/biblio/9294>.
- [13] D. Bernard et al. J.F. Vidal, O. Litaize. New Modelling of LWR Assemblies using the APOLLO2 Code Package. 2005
https://www.researchgate.net/publication/270898751_New_Modelling_of_LWR_Assemblies_using_the_APOLLO2_Code_Package.
- [14] D. Bernard et al. J.F. Vidal, O. Litaize. NEW MODELLING OF LWR ASSEMBLIES USING THE APOLLO2 CODE PACKAGE. 2007.
- [15] M. Daeubler et al. L. Mercatali, A. Venturini. SCALE and SERPENT solutions of the OECD VVER-1000 LEU and MOX burnup computational benchmark. 2015
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030645491500170X?via%3Dihub>.
- [16] V.H. Sanchez-Espinoza L. Mercatali, N. Beydogan. Simulation of low-enriched uranium burnup in Russian VVER-1000 reactors with the Serpent Monte-Carlo code. 2021
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S173857332100156X>.

- [17] J. Leppänen. Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. 2012
http://merlin.polymtl.ca/downloads/Serpent_manual_2012.pdf.
- [18] L.Fede and M.François. Livrable DRAGON5 du projet POLYVVER. 2023
http://merlin.polymtl.ca/downloads/ARCHIVE_VVER_20230912/archive_VVER_DRAGON_dataset_20230912.tgz.
- [19] L.Fede and M.François. Post-traitement des résultats du projet POLYVVER. 2023
http://merlin.polymtl.ca/downloads/ARCHIVE_VVER_20230912/archive_VVER_POSTTRAITEMENT_20230912.tgz.
- [20] C. Richard. Contribution au développement d'un schéma de calcul basé sur le code DRAGON5 pour l'étude neutronique de crayons et d'assemblages de réacteurs de type VVER. 2023
http://merlin.polymtl.ca/downloads/2023_Cyprien_Richard.pdf.
- [21] Ville Valtavirta Riku Tuominen and Jaakko Leppänen. New energy deposition treatment in the Serpent 2 Monte Carlo transport code. *Annals of Nuclear Energy*, 129 :224–232, 2019
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454919300726>.
- [22] T. Lötsch Y. Bilodid, E. Fridman. X2 VVER-1000 benchmark revision : fresh HZP core state and the reference Monte Carlo solution. 2020
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454920302565?via%3Dihub>.
- [23] Yisheng Zou-et al. Zelong Zhao, Yaping Guo. Validation and application of the Dragon5 lattice code for neutronics and burnup analysis of VVER-1000 pin cell and assembly model. 2022.
- [24] Hébert et al. Zu, Tiejun. Implementation of the reskr module in NJOY. 2022
https://www.researchgate.net/publication/362365893_Implementation_of_the_reskr_module_in_NJOY.