

Validation de calculs de réseaux

Réacteurs à caloporteur sodium de type ASTRID

Rapport de stage

Kevin Herbreteau

Table des matières

REMERCIEMENTS	4
L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL (EPM)	5
L'école d'ingénieurs	5
L'institut de Génie Nucléaire (IGN)	5
INTRODUCTION : LE PROJET ASTRID	6
Historique, calendrier et attentes	6
Les RNR-Na ou SFR (Sodium-cooled Fast Reactor).....	6
OBJECTIFS	8
ÉLÉMENTS DE NEUTRONIQUE	9
Équation de transport	9
Équations de Bateman	9
MÉTHODES DE RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT	11
Méthode déterministe	11
Formalisme multi-groupe	11
Formalisme d'autoprotection.....	11
Loi de Fick	12
Méthode stochastique	12
LES CODES DE CALCULS	13
DRAGON	13
SERPENT	14
ÉTAT DE L'ART : BENCHMARK DU 15/09/2012	15
VALIDATION DE CALCULS DE RÉSEAUX	16
Cellule unique	16
Assemblage fissile	18
Assemblage fertile.....	20
CONCLUSION	22

RÉFÉRENCES	23
Guide d'utilisation	23
Mémoire - Thèse - Rapport.....	23
Publication	23
Site internet	23
Ouvrage	23
ANNEXES	24
Annexe 1 : La méthode de Monte-Carlo.....	24
Annexe 2 : Les modules de DRAGON	25
Annexe 3 : Jeux de données - Paramètres de simulation.....	26
Annexe 3.1 : DRAGON	26
Annexe 3.2 : SERPENT.....	28
Annexe 4 : Courbes des concentrations isotopiques	34
Annexe 4.1 : Cellule	34
Annexe 4.2 : Assemblage fissile.....	36
Annexe 4.3 : Assemblage fertile	37
RÉSUMÉ	38
ABSTRACT	38

Remerciements

Au sein de l'École Polytechnique de Montréal, je remercie Alain Hébert de m'avoir accepté en tant que stagiaire et son soutien permanent tout au long du stage. Richard Chambon de son aide sur MATLAB. Axel Canbakan de son expertise et ses conseils sur SERPENT2, DRAGON et le langage CLE-2000. Law Lai Cheung et Charlotte Bay pour leurs travaux antérieurs.

Au sein de l'ENSICAEN, je remercie le bureau des Relations Internationales de leur suivi continu lors de ma recherche de stage et de l'obtention de la bourse mobilité.

Enfin, je remercie Clément et Simon avec qui j'ai partagé cette expérience à Montréal ainsi que de nombreuses heures devant la machine à café, la Coupe Stanley et la Coupe du Monde de football.

L'École Polytechnique de Montréal (EPM)

L'école d'ingénieurs

L'École Polytechnique de Montréal, créée en 1873, est une école d'ingénieur canadienne affiliée à l'Université de Montréal (UdeM) et constitue le pôle de recherche le plus puissant du Canada. Cet établissement forme ses ingénieurs-chercheurs dans les départements suivants : génie physique, mécanique, électrique, informatique, chimique, civil et mathématique.

L'école compte près de 7500 étudiants répartis dans ces différents départements. Son budget dédié à la recherche s'élève à 72 millions de dollars canadiens (\$CAD) soit 47 millions d'euros.



Logo de l'EPM (gauche) et de l'UdeM (droite)

L'Institut de Génie Nucléaire (IGN)

Durant ce stage, j'étais affilié à l'Institut de Génie Nucléaire (IGN) du département de génie physique. L'IGN a été créé en 1970 et ses programmes s'articulent autour de la physique des réacteurs, la thermohydraulique et des applications des rayonnements.

En terme d'installation, l'IGN possède sur place un réacteur SLOWPOKE-2 (1976) dédié à l'analyse par activation ainsi qu'une boucle expérimentale en thermohydraulique de 400 kW (1986) financée par le Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG).

Sur un plan plus théorique, l'IGN a développé les codes de calcul DRAGON et DONJON pour la physique des réacteurs. Ces codes sont aujourd'hui utilisés partout dans le monde.

Enfin, l'IGN a bénéficié d'une chaire en génie nucléaire accordée par Hydro-Québec (1988-2012) et financée par Hydro-Québec, Énergie Atomique du Canada et le Groupe des propriétaires CANDU.



Photographie du réacteur SLOWPOKE-2

Introduction : le projet ASTRID

Historique, calendrier et attentes

Suite au grand emprunt national de 2010, la France a alloué la somme de 1 milliard d'euros pour la recherche sur le nucléaire civil. 650 millions ont permis au programme ASTRID (Advanced Sodium Tehcnological Reactor for Industrial Demonstration) de voir le jour. Ce programme, porté par le CEA, a pour objectif de développer un prototype de réacteur de 600MWe utilisant la technologie des Réacteurs à Neutrons Rapides à caloporteur Sodium (RNR-Na) et ainsi amorcer le développement de la Génération IV. Aujourd'hui, 80% de l'effort de guerre du CEA sert ce programme.

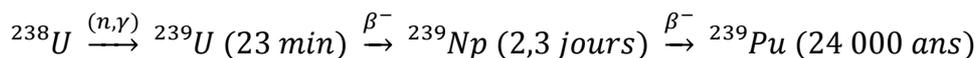
La construction de ce réacteur est prévue en 2017 sur le site nucléaire de Marcoule avec un premier chargement du cœur en 2020.

Les attentes de ce nouveau réacteur s'articulent autour de 4 points clés : une sûreté accrue comparable à celle de l'EPR, une disponibilité de l'ordre de 80%, une grande capacité de transmutation des déchets et une réduction du coût d'investissement.

Les RNR-Na ou SFR (Sodium-cooled Fast Reactor)

La technologie des RNR-Na n'est pas une technologie nouvelle. Le projet ASTRID bénéficie ainsi du retour d'expérience de Phénix et Superphénix qui utilisaient cette technologie. Elle se distingue des réacteurs thermiques de par l'utilisation de la transmutation et de la surgénération couplée à une absence de modérateur. Détaillons ces termes.

La surgénération est basée sur la production de matière fissile à partir de matière fertile. Dans notre cas, on va utiliser la capture neutronique d'un isotope fertile ^{238}U afin de produire un isotope fissile ^{239}Pu selon :



L'objectif ici est de remplacer le ^{239}Pu consommé par fission par du ^{239}Pu issu de la capture neutronique de l' ^{238}U . L'inconvénient de ce processus vient de la difficulté à démarrer un tel réacteur. Il faut en effet charger le cœur avec une grande quantité de matière fissile afin d'avoir un bilan neutronique équilibré.

Dans un RNR, l'Uranium et le Plutonium ne constituent plus des déchets. Cependant, il reste toujours les différents produits de fission ainsi que les actinides. L'objectif de la transmutation est de transformer ces déchets à vie longue en des noyaux à vie courte ou stable grâce à un flux neutronique important.

En spectre rapide, on ne cherche pas à ralentir les neutrons, ce qui justifie l'absence de modérateur. Il nous faut donc un caloporteur qui ne ralentit pas les neutrons, donc un caloporteur plus lourd que l'eau, ASTRID utilise le Sodium. Il est en effet plus lourd que l'eau et présente plusieurs avantages de par ses propriétés physico-chimiques. Il n'a tout d'abord pas besoin d'être pressurisé en raison d'une température d'ébullition (883°C à pression atmosphérique) nettement au-dessus de la température de sortie du caloporteur (510-550°C). De plus, il possède une conductivité thermique nettement plus importante que l'eau ce qui en fait un excellent caloporteur et il n'entraîne pas de corrosion au niveau de la cuve. Cependant, le Sodium est un puissant réactif, il brûle dans l'air et explose dans

l'eau ce qui rend son confinement et sa maîtrise extrêmement importants pour la sûreté et la viabilité du réacteur. Phénix et Superphénix ont permis d'acquérir une grande expertise sur l'utilisation du Sodium comme caloporteur et ont permis de bien comprendre la problématique de son utilisation.

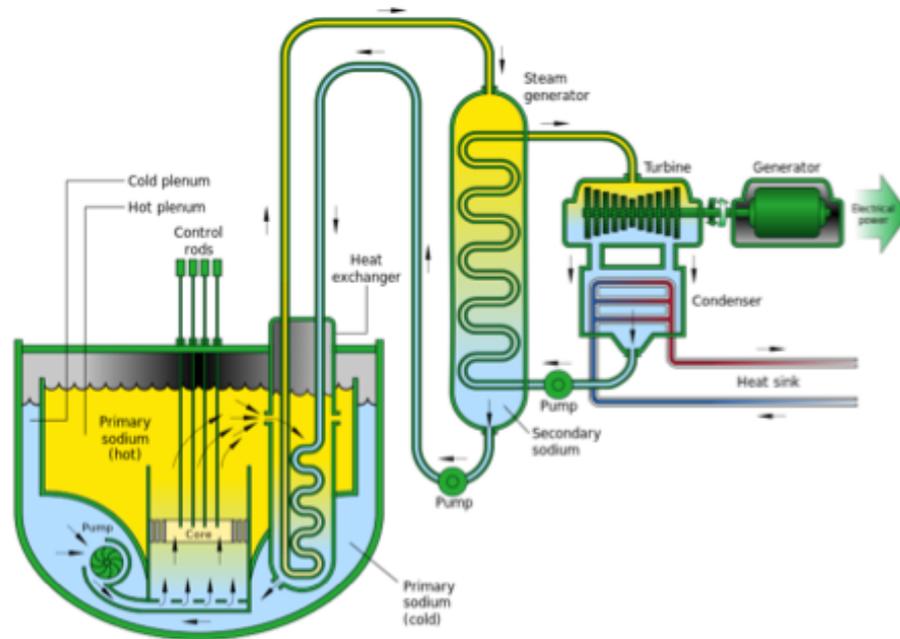
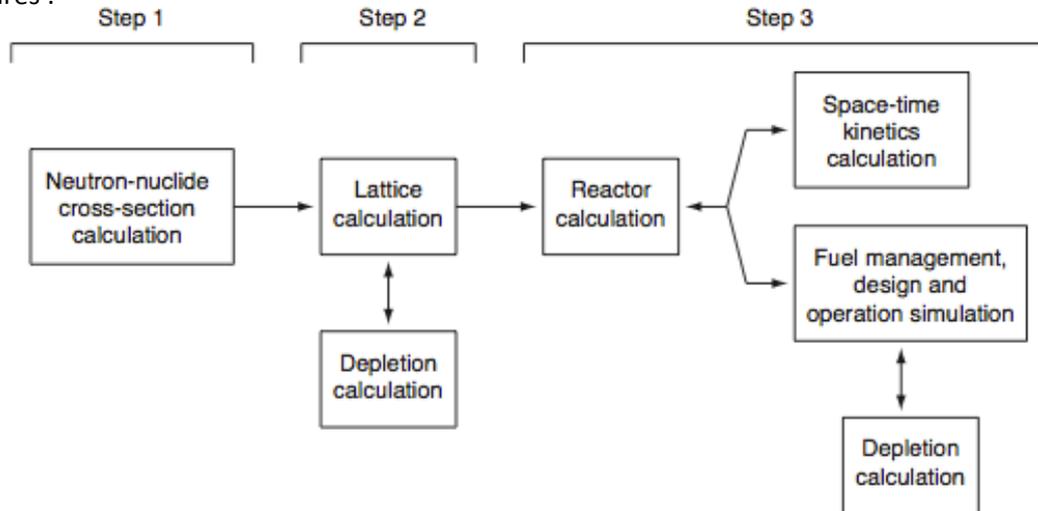


Schéma d'un RNR-Na

Après cette brève introduction du projet ASTRID et des RNR-Na, exposons à présent l'objectif de ce stage.

Objectifs

Le projet ASTRID en est encore à l'étape de conception. Des modèles physiques et mathématiques ont ainsi été mis en place afin de réaliser des schémas de calculs. Un schéma de calcul est un flot de données et d'opérateurs de calculs faisant intervenir les trois étapes de la physique des réacteurs nucléaires :



Les trois étapes de la physique des réacteurs nucléaires (A. Hébert - 2009)

La première étape (Step 1) consiste à calculer les sections efficaces des différents nucléides pour ensuite effectuer un calcul de réseau (Step 2) afin d'aboutir à un calcul de cœur entier (Step 3). Au sein de l'EPM, les calculs de réseaux et de cœur entier sont effectués à l'aide des codes déterministes DRAGON et DONJON.

Mon objectif lors de ce stage est d'effectuer différentes validations du code déterministe DRAGON à l'aide du code stochastique SERPENT pour les calculs de réseaux uniquement. J'interviendrais à 3 niveaux de géométrie : une cellule unique, un assemblage fissile et un assemblage fertile. Le détail de ces géométries sera donné plus loin.

La validation portera sur l'évolution du coefficient de multiplication effectif et des concentrations des produits de fissions et des différents actinides en fonction du Burn-up. Les isotopes retenus pour la validation sont :

	Isotope	Période (ans)
ACTINIDES MAJEURS	U235	7,10E+08
	Pu239	24120
ACTINIDES MINEURS	Np237	2,10E+06
	Am242m	9,50E+11
PF VIE MOYENNE	Cs137	30
PF VIE LONGUE	Sm151	93
POISON	Xe135	1,05E-03

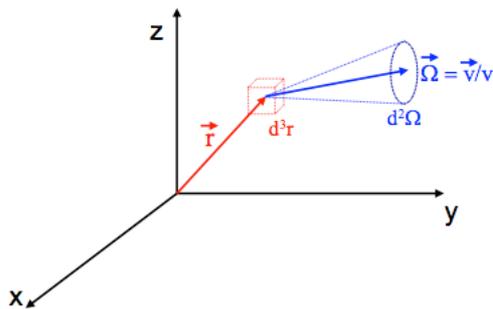
Avant d'exposer les différents résultats, présentons quelques éléments de neutronique ainsi que les codes de calculs utilisés à l'EPM.

Éléments de neutronique

Dans cette partie, on exposera seulement les résultats et non les démonstrations. On se place en régime stationnaire.

Équation de transport

Équation fondamentale de la neutronique, l'équation de transport de Boltzmann est un bilan de population neutronique dans un hypervolume $d^3r d^2\Omega dE$ autour de $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ dans un intervalle de temps dt :



$$\Delta n = - \text{bilan de neutrons sortis de } d^3r \\ - \text{neutrons sortis par collision} \\ + \text{neutrons créés}$$

En régime stationnaire, l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

bilan de neutrons sortis de d^3r + neutrons sortis par collision = terme source

Le terme source $Q(\vec{r}, v, \vec{\Omega})$ prend en compte toutes les émissions possibles de neutrons (source externe, diffusion, fission). Son expression dépend notamment du k_{eff} , du spectre de fission χ et des différentes sections efficaces $\Sigma_f, \Sigma_s \dots$ L'expression générale ne sera pas écrite dans ce rapport.

Équations de Bateman

Lors d'un calcul d'évolution, on cherche à obtenir la concentration isotopique des différents matériaux. On veut à terme effectuer un bilan de matière en fonction du Burn-up. Afin de déterminer ces concentrations, il nous faut résoudre les équations de Bateman :

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j [(\sigma_{j \rightarrow i} + Y_i \sigma_{f,j}) \phi + \lambda_{j \rightarrow i}] N_j - (\sigma_{a,i} + \lambda_i) N_i$$

avec

- N_i la concentration de l'isotope i

- $\sigma_{j \rightarrow i}$ la section efficace de toutes les réactions conduisant à la formation de i à partir de l'isotope j

- Y_i la probabilité que l'isotope i soit produit par fission
- $\sigma_{f,j}$ la section efficace de fission de l'isotope j
- $\lambda_{j \rightarrow i}$ la constante de décroissance radioactive de l'isotope j conduisant à la formation de l'isotope i
- $\sigma_{a,i}$ la section efficace d'absorption de l'isotope i
- λ_i la constante de décroissance radioactive de l'isotope i

La résolution de ces équations à chaque pas de Burn-up nous permettra d'alimenter une bibliothèque de sections efficaces pour le calcul de cœur !

Après ces quelques rappels théoriques, intéressons-nous aux différentes méthodes de résolution de l'équation de transport et les codes associés.

Méthodes de résolution de l'équation de transport

Une résolution analytique de l'équation de Boltzmann est aujourd'hui hors de portée. Cependant, on peut la résoudre numériquement en utilisant deux familles de codes : les codes déterministes et les codes stochastiques.

Méthode déterministe

Une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann demande une série d'approximation ainsi que l'introduction de différents formalismes.

Formalisme multi-groupe

Ce formalisme consiste à subdiviser le domaine d'énergie considéré en plusieurs sous-groupes G dans lesquels on considèrera que les neutrons sont monocinétiques. L'équation de transport s'écrit alors pour tout sous-groupe d'énergie g :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r}, E) \phi^g(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

Dans ce formalisme, le flux multi-groupe s'obtient en intégrant le flux sur un groupe d'énergie :

$$\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE$$

Enfin, on procède à une condensation des sections efficaces multi-groupes afin de conserver le taux de réaction :

$$\sigma_g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_{g-1}}^{E_g} \sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE}{\phi^g(\vec{r}, E)}$$

Les sections efficaces ne dépendent en effet pas de la variable angulaire.

Or, on ne peut pas définir une infinité de groupes d'énergie. On ne peut donc pas représenter fidèlement toutes les résonances de la gamme d'énergie considérée. On peut donc faire des erreurs au niveau des résonances, car le flux à ces énergies s'effondre. D'où l'intérêt d'incorporer le formalisme d'autoprotection. Lors de ce stage, les groupes d'énergies retenus sont ceux énoncés dans la publication "Generation of SFR Few-Group Constants Using Monte Carlo Code Serpent" de E. Fridman (voir [Références](#)).

Formalisme d'autoprotection

Au voisinage des résonances, lorsque les sections efficaces deviennent très grandes, on assiste à un effondrement du flux. C'est le phénomène d'autoprotection.

Ce phénomène va directement impacter le formalisme multi-groupe car il nous faut prendre en compte cet effondrement de flux dans la pondération des sections efficaces multi-groupes et donc notre choix du nombre de groupes.

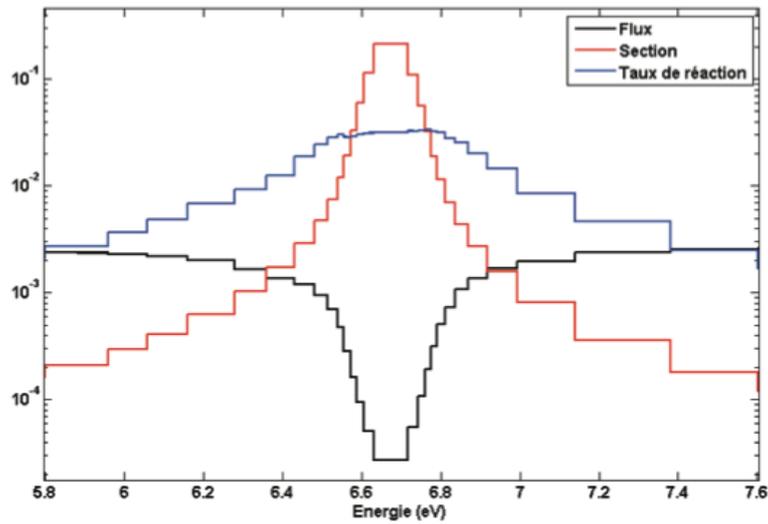


Illustration du phénomène d'autoprotection (A. Gruel - 2011)

Loi de Fick

Une des raisons pour laquelle l'équation de transport n'est pas soluble analytiquement est sa dépendance en angle. Une solution qui a été apportée fut la suivante : faire une approximation sur le flux en utilisant la théorie de la diffusion et la loi de Fick. Cette loi donne une relation de proportionnalité entre le vecteur densité de courant de neutron et le flux neutronique :

$$\vec{J}(\vec{r}) = -D(\vec{r})\vec{\nabla}\phi(\vec{r})$$

Avec D le coefficient de diffusion des neutrons.

Notons que cette loi peut être appliquée dans le formalisme multi-groupe et est généralement utilisée à l'échelle du réacteur entier.

Méthode stochastique

Contrairement à la méthode déterministe, la méthode stochastique ne demande aucune approximation de l'équation de transport. Cette fois-ci on utilise la méthode de Monte-Carlo : on simule l'histoire d'un neutron en prenant en compte les interactions possibles dans le milieu de propagation. Pour ce faire, on utilise une représentation exacte de la géométrie du problème ainsi qu'une représentation continue des sections efficaces (pas de formalisme multi-groupes).

Bien que reposant sur un tirage de nombres aléatoires, la méthode de Monte-Carlo donne des résultats exacts si l'on simule suffisamment de neutrons, ceci afin d'avoir une convergence statistique des résultats. Ce besoin explique le temps de calcul très long des codes stochastiques. Mais donnant des résultats exacts, ils sont utilisés pour de la validation et pour des calculs de référence. En [Annexe 1](#) est présenté un schéma de principe global.

Les codes de calculs

DRAGON

Les codes DRAGON4 et DRAGON5 sont des codes disponibles en open-source qui ont été créés à l'IGN suite à l'unification de plusieurs modèles et codes de calcul déjà existants pour la résolution de l'équation de transport. Les fichiers d'entrée sont programmés en CLE-2000 et utilisent des bibliothèques de sections efficaces appelées DRAGLIB. Ce langage utilise la syntaxe générale suivante :

(list of output object) := MODULE: (list of input object) :: (data input) ;

Ces codes possèdent plusieurs modules de calculs. Chaque module est relié aux autres grâce au programme de contrôle généralisé du groupe d'analyse nucléaire GANLIB.

Dans le cadre de ce stage, j'ai surtout eu à m'intéresser au module de définition de géométrie GEO: et aux différents modules d'analyse de géométrie. Une description rapide des autres modules est donnée en [Annexe 2](#). Intéressons-nous plus en détail à ces modules d'analyse.

Ces modules assurent la génération des fichiers de lignes d'intégration : le "tracking". Nous en utiliserons trois : le module SYBILT: pour un calcul aux courants d'interface (MoC) et les modules EXCELT: et NXT: pour un calcul utilisant les probabilités de collision (CP). Cependant, seuls les modules NXT: et EXCELT: nous permettent de visualiser la géométrie.

La méthode des CP consiste en une discrétisation de l'espace. On va définir une matrice P_{ij} dans laquelle chaque terme d'indice (i, j) représente la probabilité qu'un neutron de la région i subisse sa première collision dans la région j . Évidemment plus le nombre de régions sera grand, plus l'ordre de la matrice sera grand et donc le code sera gourmand en temps de calcul.

La méthode MoC est une méthode approchée des CP. On se propose dans ce cas de calculer séparément les matrices P_{ij} pour chaque cellule sans aucune communication entre les tracking. On gagne ainsi en temps de calcul, mais on perd en précision car il faut apporter une correction au niveau des interfaces entre les différentes cellules.

En pratique, un jeu de données DRAGON est un fichier au format ASCII (suffixe x2m) pouvant faire appel à des procédures (équivalents de "fonctions" en programmation usuelle) au format ASCII (suffixe c2m). Avant exécution, DRAGON va chercher un exécutable input.access afin d'accéder aux différentes procédures. À la fin de l'exécution, l'utilisateur peut éditer un input.save afin de sauvegarder les données utiles (concentrations isotopiques, valeurs du keff). Le fichier de sortie est un fichier ASCII dont il faut effectuer un post-processing. Ce dernier sera effectué sur MATLAB.

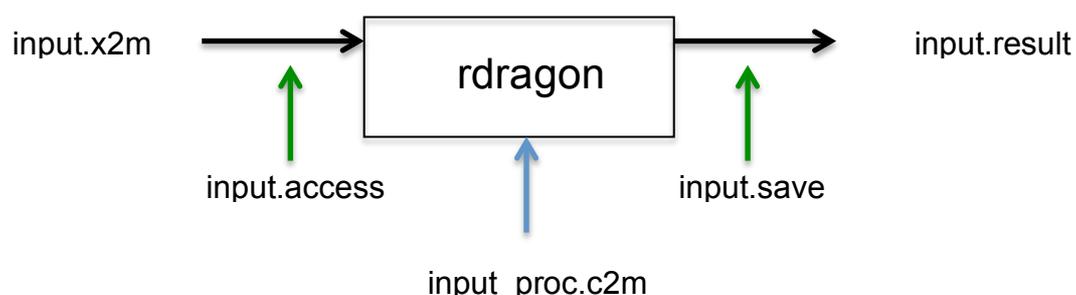


Schéma de principe d'un calcul DRAGON

SERPENT

Le code SERPENT2 est un code utilisant la méthode de Monte-Carlo disponible également en open-source. C'est un code à énergie continue développé au centre de recherche Finlandais VTT depuis 2009 spécialement dédié aux calculs de réseau. Il permet également de réaliser des évolutions en Burn-up, ce qui nous intéresse ici.

Il se distingue du code de Los Alamos de par l'utilisation de la méthode du "delta-tracking" (Woodcock, 1965) qui réduit grandement le temps de calcul. Dans un code Monte-Carlo, lorsque le neutron arrive à une frontière entre deux cellules, on rééchantillonne le libre parcours du neutron avec la section efficace du nouveau matériau. Le "delta-tracking" permet de s'affranchir de cette étape et donc de gagner en temps de calcul.

La syntaxe des fichiers d'entrée est très similaire à celle de MCNPX, bien que moins contraignante et plus intuitive. On doit définir une géométrie à l'aide de cellules en utilisant des surfaces et définir nos paramètres de simulation (nombres de neutrons simulés et de cycles à effectuer pour un calcul de keff par exemple).

En pratique, SERPENT présente également l'avantage de générer des fichiers de sortie MATLAB contenant l'ensemble des résultats (input_res.m pour le keff et input_dep.m pour les concentrations). Le post-processing est donc grandement facilité ! On peut également tracer une géométrie dans un plan donné, il en sort une image au format input_geom.png.

Lors de ce stage, j'utiliserais la version 2.1.21 qui n'est encore qu'une bêta.

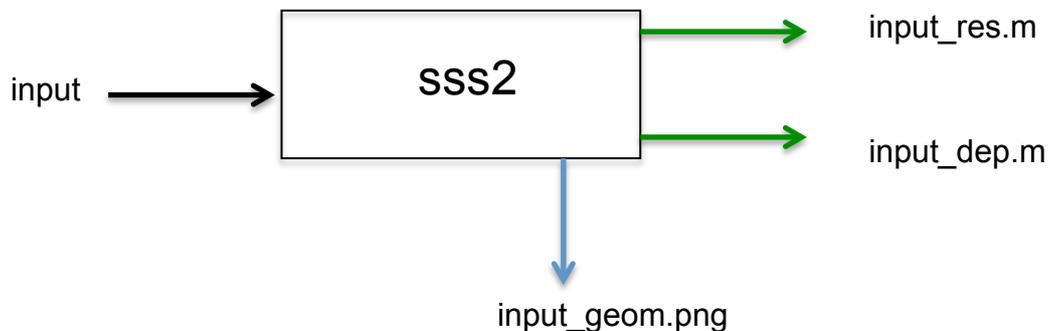
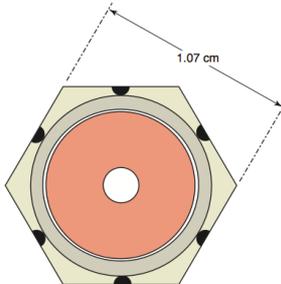


Schéma de principe d'un calcul SERPENT

État de l'art : benchmark du 15/09/2012

Le 15 septembre 2012, Alain Hébert et Charlotte Bay de l'EPM ont proposé un benchmark pour le projet ASTRID comportant des dimensionnements et des colorsets. Pour des raisons de confidentialité, je ne peux indiquer dans ce rapport les caractéristiques géométriques complètes ainsi que les compositions des matériaux.

Cellule unique

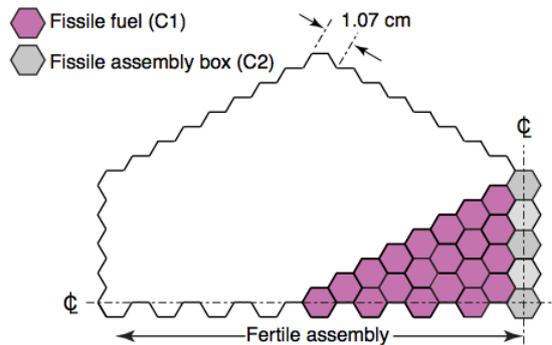


De l'intérieur vers l'extérieur :

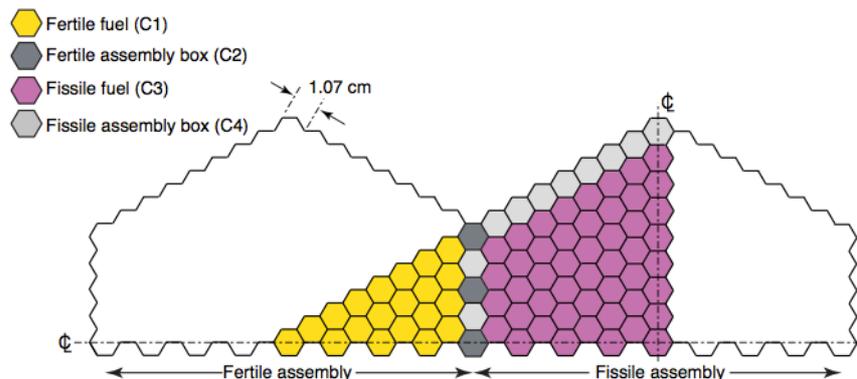
hélium - combustible - hélium - gaine - caloporteur

Assemblage fissile MOX

Les assemblages du cœur ASTRID seront hexagonaux avec une cellule centrale entourée de 8 couronnes. Chaque assemblage sera ainsi constitué de 217 aiguilles et cerclé par un boîtier en acier.



Assemblage fertile UOX



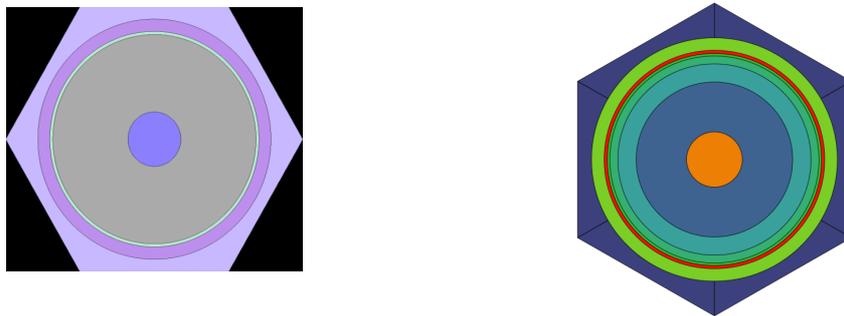
Ce benchmark a posé les bases de mon travail. L'objectif à présent est d'implanter ces géométries dans DRAGON et SERPENT. Pour chaque niveau de géométrie, je suivrais deux étapes systématiques : une première validation à Burn-up 0 et je procèderais ensuite à une évolution en Burn-up.

Validation de calculs de réseaux

Nous rentrons ici dans le vif du sujet. Comme énoncé précédemment, pour chaque niveau de géométrie sera effectuée une validation à temps 0 pour chacun des modules de tracking avec le code stochastique. Pour l'évolution en Burn-up, nous utiliserons uniquement le module SYBILT: car c'est avec ce module que seront effectués les calculs de cœur avec DONJON. Les pas de Burn-up seront au nombre de 33, exprimés en jours, et alignés sur des recommandations du CEA. En [Annexe 3](#) sont fournis les différents paramètres de simulation.

Cellule unique

Voici les géométries obtenues avec SERPENT (gauche) et DRAGON via le module NXT: (droite) :



Burn-up 0 :

	keff	Incertitude (PCM)	Écart (PCM)	temps simu
Serpent2	1,53191	15		12h
SYBILT:	1,52833	1,63E-03	-358	2min
EXCELT:	1,52737	1,60E-03	-454	2min
NXT:	1,52794	3,56E-03	-397	3min

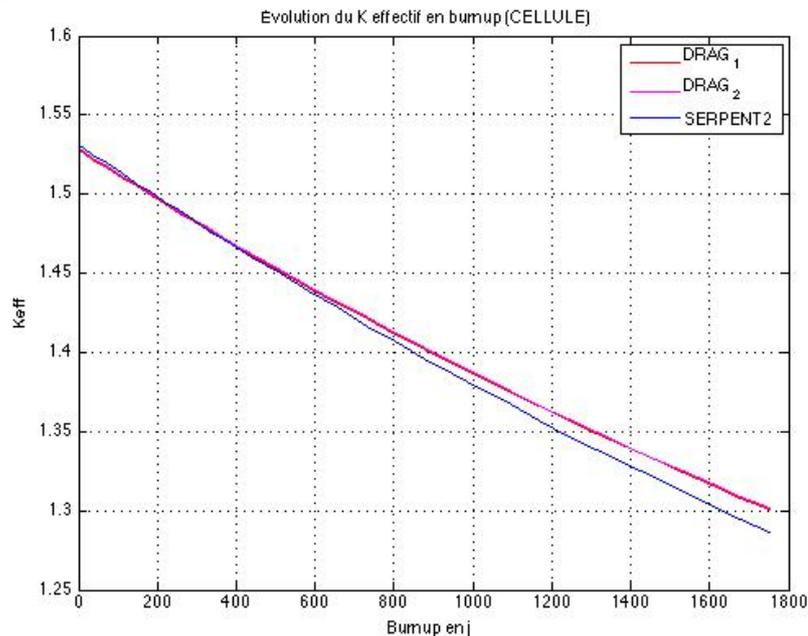
Les premiers résultats n'étaient pas encourageants. Pour une géométrie aussi simple, nous démarrons avec au mieux 358pcm d'écart. Après une discussion avec M. Hébert, ce dernier a pointé du doigt le fait que nous aurions une erreur systématique entre le stochastique et le déterministe notamment à cause du spectre de fission (Claude Mounier - juillet 2013). En effet, les travaux de Claude Mounier du SERMA ont montré que l'énergie du neutron causant la fission avait un effet non négligeable sur la distribution en énergie des spectres de fission. Cet effet est de l'ordre de 100 pcm pour une cellule de type ASTRID. Une nouvelle simulation nous a alors donné les résultats expérimentaux suivants :

	keff	Incertitude (PCM)	Écart (PCM)	temps simu
Serpent2	1,53191	15		12h
SYBILT:	1,52933	1,65E-03	-258	2min
EXCELT:	1,52837	1,65E-03	-354	2min
NXT:	1,52895	4,99E-03	-296	3min

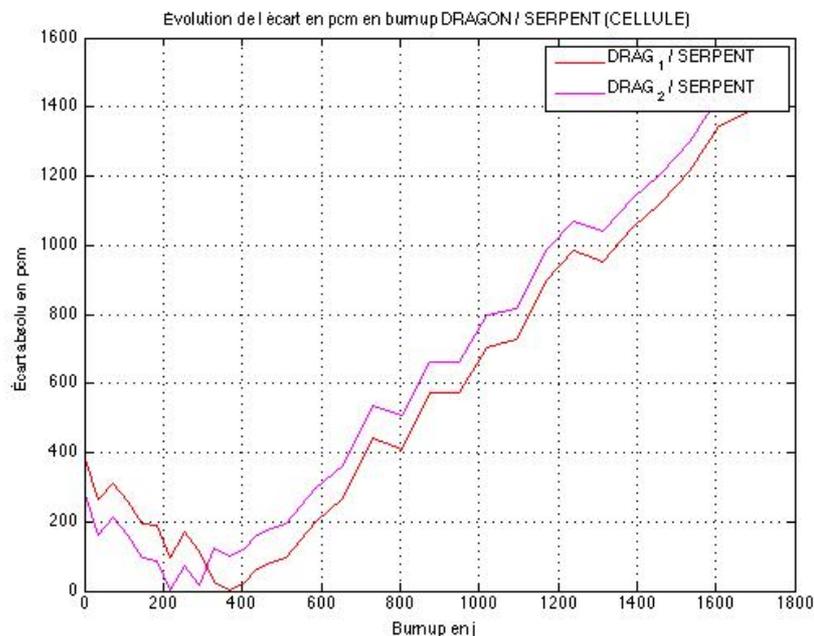
Les écarts ont été réduits de 100pcm. Nous aurons donc au mieux avec le module SYBILT: un écart de **258pcm**. Il faut à présent en voir les conséquences sur l'évolution en Burn-up. Il sera présenté les résultats du keff pour les différentes DRAGLIB afin d'en apprécier les différences. Les résultats pour les concentrations isotopiques ne seront donnés qu'en [Annexe 4](#) étant donné le nombre important de courbes.

Évolution en Burn-up :

En légende, DRAG1 correspond à l'ancienne DRAGLIB et DRAG2 à la nouvelle DRAGLIB éditée par M. Hébert lors du stage.



Afin d'être plus parlant, voici également l'évolution de l'écart absolu (PCM) du k_{eff} entre DRAGON et SERPENT en fonction du Burn-up :

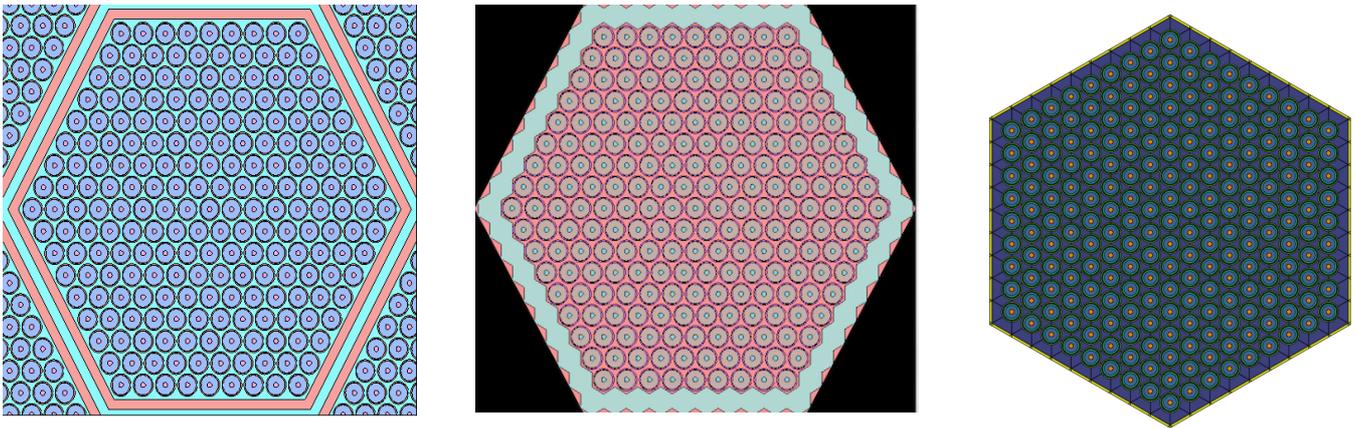


On retrouve le gain de 100pcm de la nouvelle DRAGLIB à temps 0. Cependant, après 300 jours d'évolution, on remarque que DRAGON et SERPENT divergent l'un de l'autre et qu'au final l'ancienne DRAGLIB offre un écart absolu moins important. On ne peut donc pas valider le code déterministe pour le calcul de k_{eff} étant donné des écarts beaucoup trop importants.

Par contre, nous obtenons d'excellents résultats pour les concentrations isotopiques (voir [Annexe 4.1](#)).

Assemblage fissile

On en arrive au point le plus délicat. Le problème majeur ici est la présence d'un boîtier en acier dans la géométrie. Sur SERPENT, on peut définir cette géométrie très aisément à l'aide de surfaces diverses et de façon exacte d'après les caractéristiques techniques d'ASTRID. Cependant, ce n'est pas le cas de DRAGON. Illustrons ce propos, voici les différentes géométries obtenues avec SERPENT (gauche), SYBILT: (centre) et NXT: (droite) :



Que remarque-t-on ? Les spécifications d'ASTRID imposent un boîtier hexagonal droit. Or, les modules de tracking EXCELT: et SYBILT: ne peuvent fonctionner avec une telle géométrie, ils vont fonctionner avec une couronne d'hexagones supplémentaire autour des crayons périphériques, ce qui ne respecte pas du tout la géométrie. Enfin, le module NXT: permet d'obtenir un coffre droit, mais le pas de construction de la géométrie ne permet pas d'en respecter les dimensions (à peine visible sur la figure). En soi, il est possible de tendre vers la géométrie exacte avec NXT: mais le nombre de régions devient trop important et les serveurs de calculs ne peuvent le supporter (>10 000 régions).

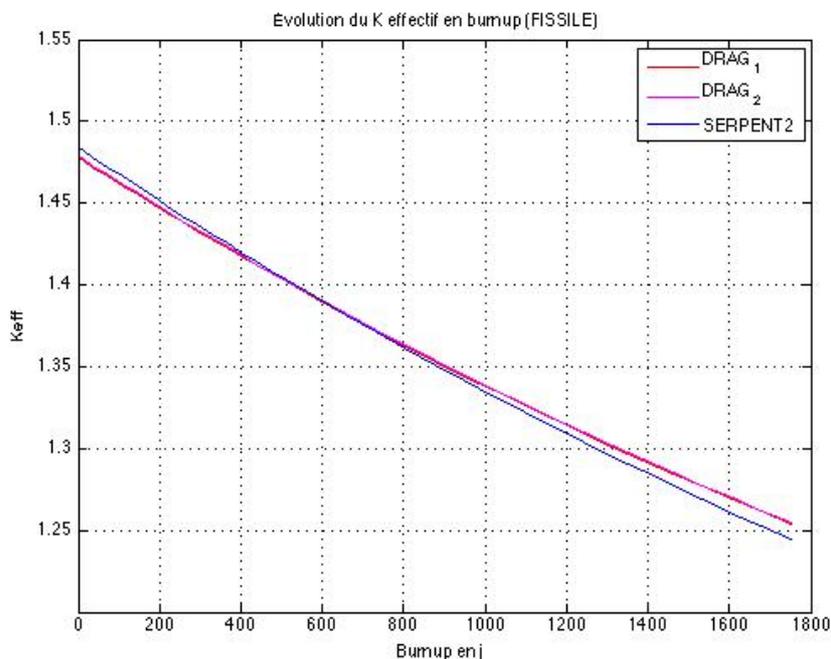
Il faut donc quantifier l'erreur faite sur le nombre d'atomes contenus dans le boîtier et dans le caloporteur afin de minimiser l'écart au temps 0. Ainsi, on applique un facteur de dilution au niveau des concentrations en jouant sur la masse volumique. Le facteur de dilution appliqué au boîtier est de **2,108** (calculs non exposés). Après dilution, nous obtenons les résultats suivants avec les nouvelles DRAGLIB :

	keff	Incertitude (PCM)	Écart (PCM)	temps simu
Serpent2	1,48664	15		6h
SYBILT:	1,47844	3,73E-03	-725	5min
EXCELT:	1,47834	1,32E-03	-735	5min
NXT:	1,47434	6,52E-03	-1125	66min

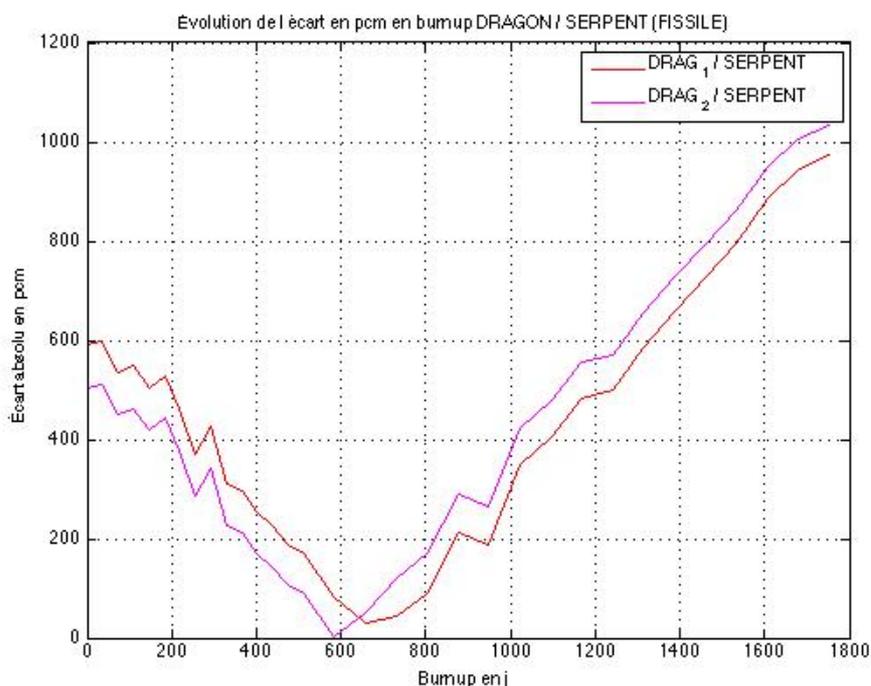
Les résultats ne sont pas bons, un écart de plus de 700pcm n'est pas acceptable. La principale raison est la différence de géométrie avec le code stochastique. Même en appliquant un facteur de dilution adéquat, le tracking est fortement perturbé par la différence de géométrie du boîtier. Utiliser un autre facteur de dilution afin de réduire au maximum ces écarts est possible, mais on ne respecterait plus du tout la physique du problème. Regardons à présent l'évolution en Burn-up.

Évolution en Burn-up :

En légende, DRAG1 correspond à l'ancienne DRAGLIB et DRAG2 à la nouvelle DRAGLIB éditée par M. Hébert lors du stage.



Afin d'être plus parlant, voici également l'évolution de l'écart absolu (PCM) du keff entre DRAGON et SERPENT en fonction du Burn-up :

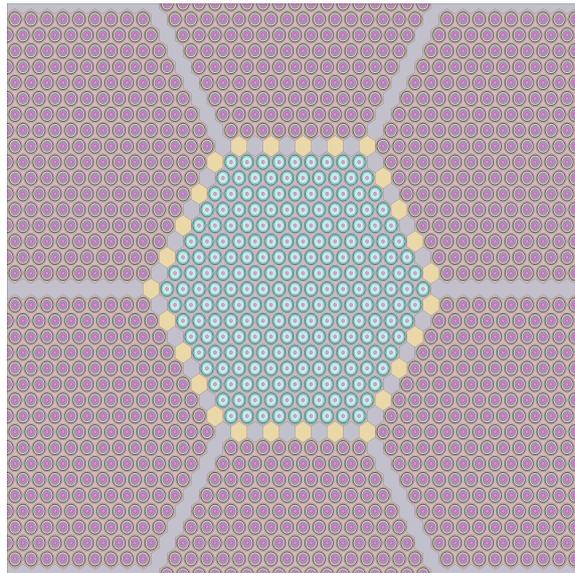


De même, on retrouve le gain de 100pcm de la nouvelle DRAGLIB à temps 0. C'est cette fois-ci après 600 jours d'évolution que l'on remarque la divergence entre DRAGON et SERPENT. L'ancienne DRAGLIB donnant aussi de meilleurs résultats à Burn-up élevé avec un écart moins important que pour la cellule. Enfin, nous obtenons également d'excellents résultats pour les concentrations isotopiques (voir Annexe 4.2).

Assemblage fertile

Dernier niveau de géométrie à étudier. Cette fois-ci, nous n'étudierons pas un assemblage UOX seul pour la simple raison que la réaction en chaîne ne démarrera pas. Il nous faut définir une source de neutrons. Afin d'avoir un spectre de source réaliste, nous ne définirons pas de source ponctuelle, mais l'assemblage UOX sera entouré de 6 assemblages MOX en guise de source. Cependant, seule la déplétion du combustible UOX sera amorcée, le combustible MOX ne subira pas de combustion et sera bloqué à mi-Burn-up.

En terme de validation, nous simulerons cette configuration uniquement avec le module SYBILT: pour DRAGON. Voici la géométrie obtenue avec SERPENT :



Notons que ce colorset ne pose pas le problème de boîtier rencontré pour l'assemblage fissile avec le module SYBILT: car nous définissons une ceinture d'hexagones en guise de boîtier pour SERPENT.

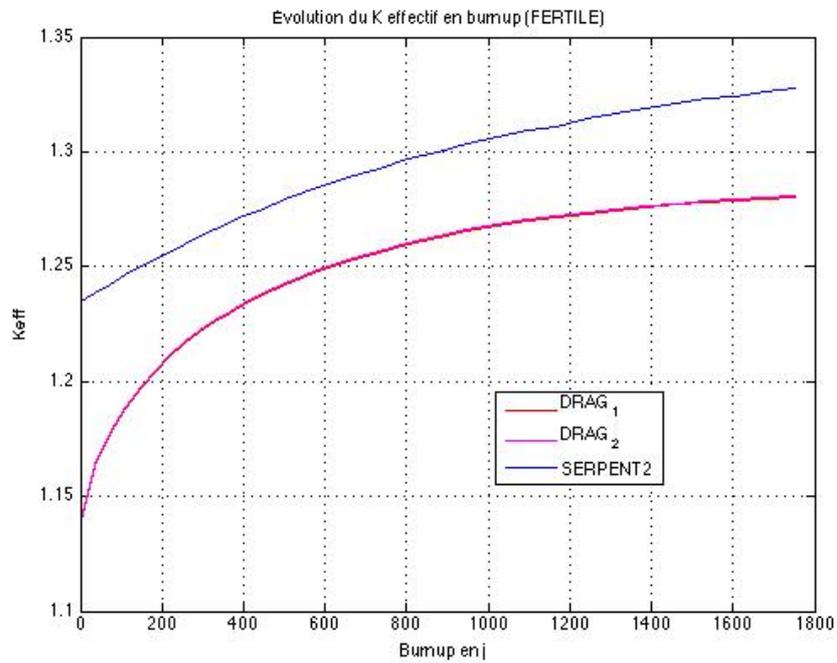
Burn-up 0 :

	keff	Incertitude (PCM)	Écart (PCM)	temps simu
Serpent2	1,23435	15		6h
SYBILT:	1,13908	2,48E-02	-9527 (!)	62min

Contre toute attente, malgré une géométrie identique, c'est avec l'assemblage fertile que nous collectons le pire résultat ! L'écart est si important que nous avons forcément une erreur dans les jeux de données. À l'heure de l'écriture de ce rapport, seules des hypothèses peuvent être formulées, nous ne pourrions pas les vérifier lors de mon stage. La première hypothèse porte sur les conditions aux limites pour DRAGON. La seconde sur la réelle non-déplétion du combustible MOX sur SERPENT de par la simple utilisation du mot clé "burn" et à une récupération à la main des concentrations à mi-Burn-up avec le fichier de sortie de l'assemblage MOX seul.

Même si aucune validation n'est possible pour cette géométrie, nous pouvons tout de même mettre en évidence le phénomène de surgénération. Regardons l'évolution du keff en fonction du Burn-up.

Évolution en Burn-up :



Contrairement à l'assemblage fissile MOX où l'on observe une consommation progressive de combustible et donc à une diminution du keff, on observe ici une augmentation du keff. On a donc de plus en plus de neutrons émis de la génération N à la génération N+1. Cela provient de la formation progressive de Pu239 lors de l'évolution (voir [Annexe 4.3](#)). On produit plus de Pu239 que l'on en consomme, on a bien mis en évidence le phénomène de surgénération.

Conclusion

S'appuyant sur un socle théorique conséquent et une programmation abordable, la neutronique offre un champ de recherche très intéressant.

Malgré une prise en main longue et difficile, le code DRAGON est un très bon outil pour simuler un réacteur nucléaire et bénéficie d'être accessible en open-source. Quant au code SERPENT, l'expérience de ce stage m'a montré que c'est un code stochastique bien moins pénible à maîtriser que MCNPX de par sa syntaxe et son post-processing.

En terme de résultats, ce rapport montre bien qu'ils ne sont pas bons ou du moins ne sont pas à la hauteur de nos attentes. Cependant, j'espère avoir permis à M. Hébert d'avancer dans ses travaux de recherche sur le projet ASTRID en lui mettant à disposition tous mes jeux de données. Je suis très optimiste quant à l'accomplissement de ce projet et j'espère en être l'un des acteurs d'ici 2020.

Ce stage en laboratoire de recherche m'a également permis d'éclaircir et de confirmer mon projet professionnel. Je compte à la suite de mon diplôme d'ingénieur me tourner vers une thèse en physique des réacteurs.

Références

Guide d'utilisation

G. Marleau, A. Hébert et R. Roy - 2014 - *"USER GUIDE FOR DRAGON VERSION5"* - EPM

A. Hébert, D. Sekki et R. Chambon - 2013 - *"USER GUIDE FOR DRAGON VERSION4"* - EPM

J. Leppänen - Mars 2013 - *"Serpent - a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code"* - VTT

Mémoire - Thèse - Rapport

Mémoire - B. Toueg - avril 2011 - *"Modélisation des effets d'historique dans un réacteur à eau pressurisée"* - EPM

Thèse - N. Martin - février 2011 - *"Application de la méthode des sous-groupes au calcul Monte-Carlo multigroupe"* - EPM

Thèse - A. Gruel - octobre 2011 - *"Développement et validation de schémas de calcul dédiés à l'interprétation des mesures par oscillation pour l'amélioration des données nucléaires"* - Université de Grenoble

Rapport de stage - Law Wai cheung - juin 2014 - *"Monte-Carlo simulation on Sodium Fast Reactor"* - Nanyang Technological University

Rapport de projet - S. Berche - avril 2014 - *"Les réacteurs à neutrons rapides"* - EPM

Publication

A. Hébert et C. Bay - septembre 2012 - *"FBR Benchmark"* - EPM

E. Fridman, R. Rachamin et E. Shwageraus - 2013 - *"Generation of SFR Few-Group Constants Using Monte Carlo Code Serpent"* - Sun Valley, Idaho

P. Mosca, C. Mounier, P. Bellier et I. Zmijarevic - juillet 2013 - *"Improvements in Transport Calculations by the Energy-Dependent Fission Spectra and Subgroup Method for Mutual Self-Shielding"* - CEA

Site internet

Site internet de l'IGN : <http://www.polymtl.ca/nucleaire/>

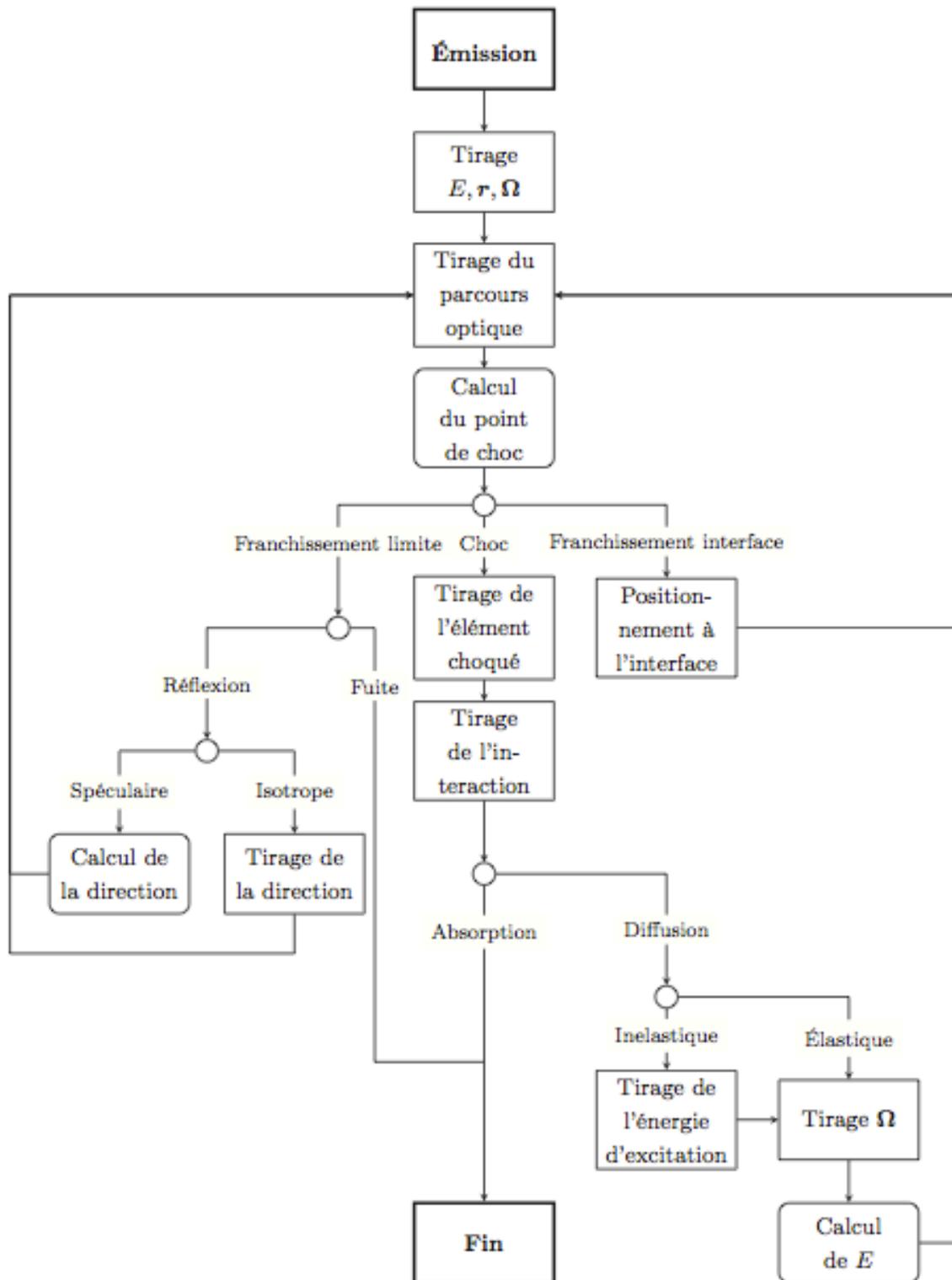
Site internet du VTT dédié à SERPENT : <http://montecarlo.vtt.fi/>

Ouvrage

A. Hébert - 2009 - *"Applied Reactor Physics"* - EPM

Annexes

Annexe 1 : La méthode de Monte-Carlo (A. Gruel - 2011)



Annexe 2 : Les modules de DRAGON

Module de calcul des probabilités de collision : ASM: utilisant le tracking.

Module de résolution de flux multi-groupe : FLU: utilisant les CP.

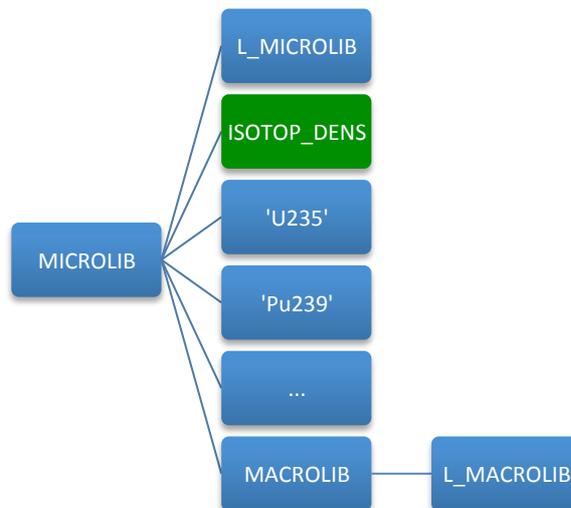
Module de calcul d'autoprotection : USS: utilisant la méthode des sous-groupes.

Module d'évolution : EVO: pour la résolution des équations de Bateman.

Module d'édition : EDI: permettant la condensation des sections efficaces.

Module de manipulation de données : UTL:

Détaillons plus en détail ce module de manipulation. Il est en effet très important pour le post-processing. Ce module nous permet de parcourir l'arborescence des données DRAGON afin d'en extraire les données qui nous intéressent. Voici comment est organisée cette arborescence :



L'intérêt est la récupération des densités isotopiques dans le bloc ISOTOP_DENS (ou si on veut particulariser, dans le bloc correspondant à l'isotope recherché). Comment va t'on procéder ? Et bien à chaque pas de Burn-up, nous utiliserons le module UTL: afin de récupérer toutes les densités. Nous génèrerons ainsi 33 fichiers ASCII que l'on devra traiter sur MATLAB. L'aide de Richard Chambon (IGN), nous a été très précieuse car ce dernier avait déjà édité un script MATLAB pour récupérer ces densités. Seul un script permettant de tracer les courbes était nécessaire.

Annexe 3 : Jeux de données - Paramètres de simulation

Comme indiqué, cette annexe présente respectivement pour DRAGON et SERPENT les paramètres de simulation utilisés pour les calculs de keff et de densités. Le jeu de donnée DRAGON est largement inspiré des travaux de Charlotte Bay (EPM - 2012). Aucune déclaration de géométrie ne sera faite.

Annexe 3.1 : DRAGON

*** EVOLUTION ***

INTEGER istep := 1 ;

REAL Tbeg ;

REAL Tend := 0.0 ;

WHILE istep maxstep <= DO

EVALUATE Tbeg := Tend ;

ECHO "(cooled assembly) istep =" istep "<=" maxstep " Time=" Tbeg " day" ;

*** SELF SHIELDING ***

IF istep 1 = THEN

 MICROLIB2 := USS: MICROLIB TRACK :: EDIT 0 PASS 4 ;

ELSE

 MICROLIB2 := USS: MICROLIB MICROLIB2 TRACK :: EDIT 0 PASS 4 ;

ENDIF ;

*** MATRICE PIJ ***

PIJ := ASM: MICROLIB2 TRACK ;

*** CALCUL DE FLUX ***

IF istep 1 = THEN

 FLUX := FLU: PIJ MICROLIB2 TRACK :: TYPE K ;

ELSE

 FLUX := FLU: FLUX PIJ MICROLIB2 TRACK :: TYPE K ;

ENDIF ;

PIJ := DELETE: PIJ ;

*** EDITION DES RESULTATS À CHAQUE PAS DE BU ***

IF istep 1 = THEN

 EDI OBJ := EDI: FLUX MICROLIB2 TRACK ::

 EDIT 0

 COND 20000000.0 10000000.0 6065307.14 3678793.91 2231302.02

 1353353.02 820850.015 497870.684 301970.382 183156.401 111089.997

 67379.4672 40867.7123 24787.5191 15034.3897 9118.8205 5530.8444

 3354.626 2034.6839 1234.098 748.5183 453.9993 304.3248 148.5759

 MERC MIX 1 2 2 2 2 3 4 5 6

 MICR 7 U5 Pu39 Np237 Xe135 Cs137 Sm151 Am242m

 SAVE ;

ELSE

```
EDIOBJ := EDI: EDIOBJ FLUX MICROLIB2 TRACK ::  
EDIT 0  
COND 20000000.0 10000000.0 6065307.14 3678793.91 2231302.02  
1353353.02 820850.015 497870.684 301970.382 183156.401 111089.997  
67379.4672 40867.7123 24787.5191 15034.3897 9118.8205 5530.8444  
3354.626 2034.6839 1234.098 748.5183 453.9993 304.3248 148.5759  
MERG MIX 1 2 2 2 2 3 4 5 6  
MICR 7 U5 Pu39 Np237 Xe135 Cs137 Sm151 Am242m  
SAVE ;
```

ENDIF ;

*** EVOLUTION EN BU ***

EVALUATE istep := istep 1 + ;

IF istep maxstep <= THEN

 GREP: DONNEES :: GETVAL 'burn' <<istep>> >>Tend<< ;

 ECHO "depleting from " Tbeg " to " Tend " day" ;

 IF istep 2 = THEN

 BURNUP MICROLIB2 := EVO: MICROLIB2 FLUX TRACK ::

 EDIT 3 DEPL <<Tbeg>> <<Tend>> DAY POWR <<Fuelpwr>> ;

 ELSE

 BURNUP MICROLIB2 := EVO: BURNUP MICROLIB2 FLUX TRACK ::

 EDIT 3 DEPL <<Tbeg>> <<Tend>> DAY POWR <<Fuelpwr>> ;

 ENDIF ;

ENDIF ;

ENDWHILE ;

Annexe 3.2 : SERPENT

% --- SIMULATION -----

% -- Condition aux limites : réflexion blanche
set bc 2

% --- Traceur : plan xOy, 5000x5000 pixels
plot 3 5000 5000

% --- Calcul de keff
set pop 8000 8000 50

% --- Résolution des équations de Bateman (méthode CRAM)
set bumode 2

% --- Densité de puissance
set powdens 71.918E-3

% --- Pas de BU (33 pas utilisés sur 50 prévus) en jours
dep daytot

1.0

36.5

73.0

109.5

146.0

182.5

219.0

255.5

292.0

328.5

365.0

401.5

438.0

474.5

511.0

% 547.5

584.0

% 620.5

657.0

% 693.5

730.0

% 766.5

803.0

% 839.5

876.0

% 912.5

949.0

% 985.5

1022.0

% 1058.5

1095.0
% 1131.5
1168.0
% 1204.5
1241.0
% 1277.5
1314.0
% 1350.5
1387.0
% 1423.5
1460.0
% 1496.5
1533.0
% 1569.5
1606.0
% 1642.5
1679.0
% 1715.5
1752.0

% --- Définition des groupes d'énergie en MeV (cf E. Fridman)

set nfg 24
0.0001485759
0.0003043248
0.0004539993
0.0007485183
0.001234098
0.0020346839
0.003354626
0.0055308444
0.0091188205
0.0150343897
0.0247875191
0.0408677123
0.0673794672
0.111089997
0.183156401
0.30197382
0.497870684
0.820850015
1.35335302
2.23130202
3.67879391
6.06530714
10

ene eg1 1
0.0001485759
0.0001541761
0.0001630563
0.0001675188
0.0001752293

0.0001832948
0.0001849519
0.0001862511
0.0001875594
0.0001888769
0.0001902037
0.0001930783
0.0001959963
0.0002009579
0.000212108
0.0002243249
0.0002355906
0.0002417963
0.0002567482
0.0002682973
0.0002723521
0.0002764682
0.0002848879
0.0002883271
0.0002959219
0.0003043248
0.0003199279
0.0003353235
0.000353575
0.0003717032
0.0003907608
0.0004190942
0.0004539993
0.0005017468
0.0005392049
0.0005771462
0.0005929414
0.0006000996
0.000612835
0.0006468379
0.0006772874
0.0007485183
0.000832219
0.0009096825
0.0009824954
0.001064325
0.001134668
0.001234098
0.001343584
0.0015861989
0.001811835
0.0020346839
0.0022849408
0.0024238091
0.0025711169
0.0027685959
0.0029515792

0.0031466561
0.003354626
0.003707435
0.0040973499
0.004528272
0.005004514
0.0055308444
0.006112528
0.0067553883
0.007465858
0.0082510486
0.0091188205
0.01007785
0.01113775
0.0136036798
0.0150343897
0.0162004698
0.0185847301
0.0226994399
0.0247875191
0.0261001308
0.0273944493
0.0292810388
0.0334596485
0.0369786397
0.0408677123
0.0499159396
0.055165641
0.0673794672
0.0822974667
0.0946646184
0.111089997
0.122773401
0.140097708
0.165065199
0.183156401
0.195066497
0.230060101
0.267826825
0.30197382
0.320646912
0.383884013
0.412501693
0.456021696
0.497870684
0.57844317
0.706512094
0.780816674
0.820850015
0.950834811
1.05114996
1.16204906

1.28696299
1.35335302
1.408584
1.63654101
1.90138996
2.23130202
2.52839589
2.86504793
3.24652505
3.67879391
4.16862011
4.72366619
5.35261393
6.06530714
6.70319986
7.40818214
8.18730831
9.04837418
10
11.6183395
13.8403101
14.9182501
19.6403294

% --- Structure micro-groupes
set micro eg1

% --- Prédicteur-correcteur actif
set pcc 1

% --- Homogénéisation dans l'univers 0
set gcu 0

% --- Inventaire des isotopes : PF, Actinides, Poison (_dep.m). Structure ZZZAAA.
set inventory

922340
922350
922360
922380
932370
942380
942390
942400
942410
942420
952410
952420
952421
952430
962420
962430
962440

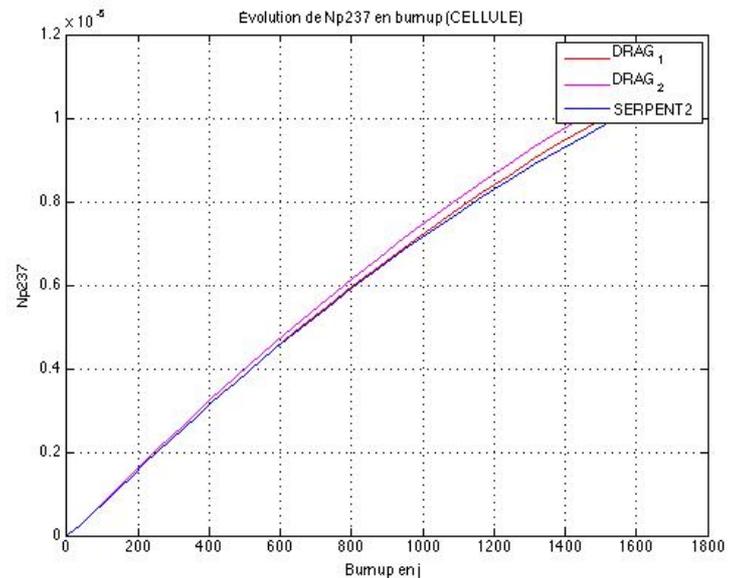
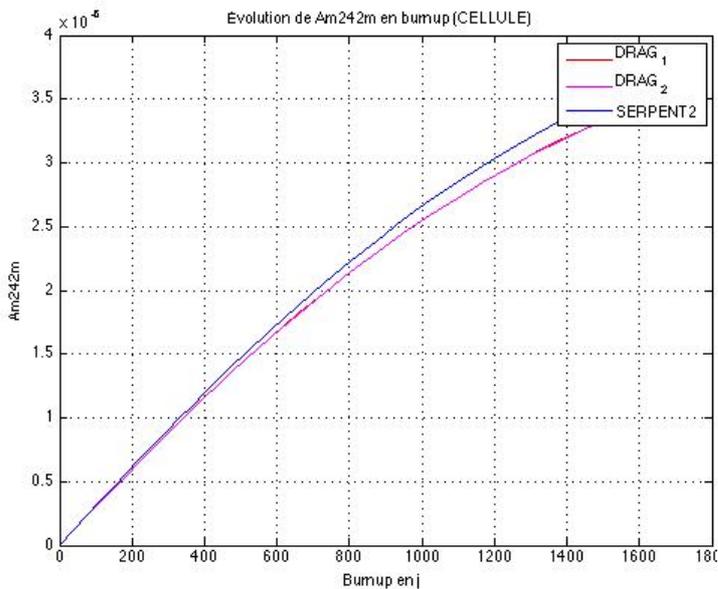
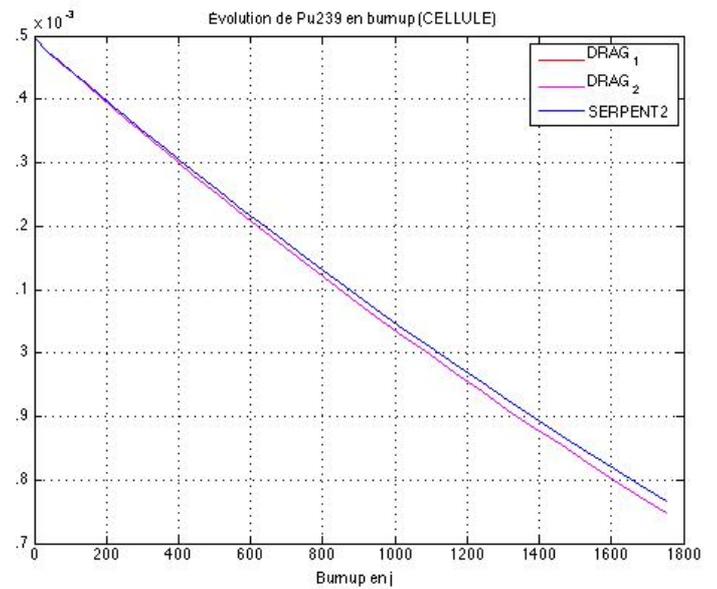
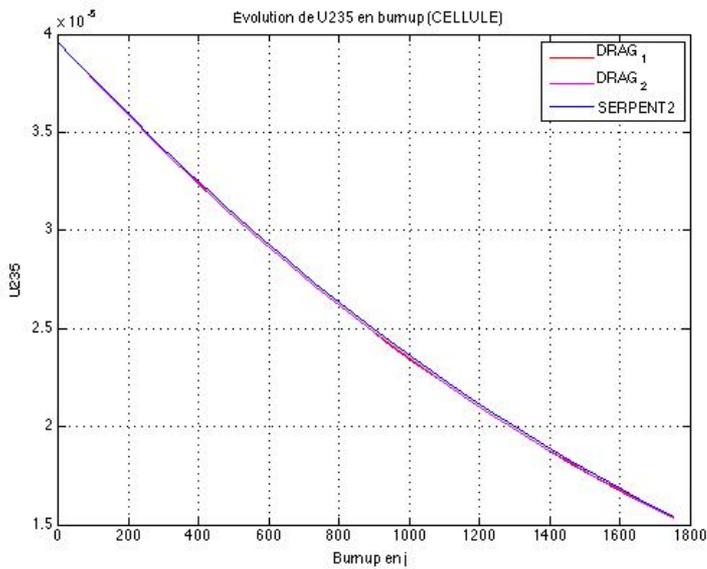
962450
601450
601480
541350
451030
551330
551370
641550
420950
430990
441010
471090
621470
621490
621500
621510
621520
631530

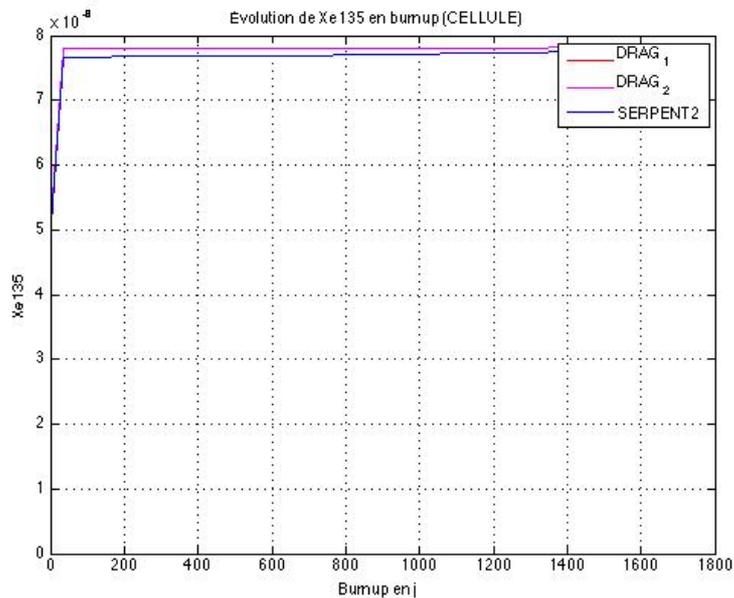
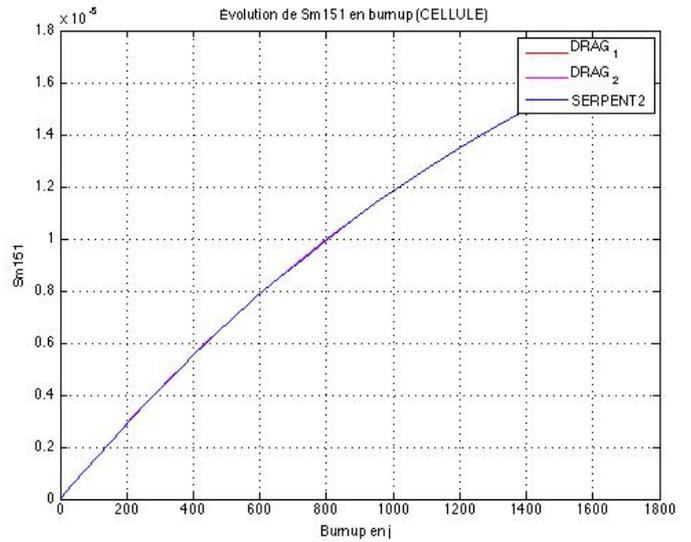
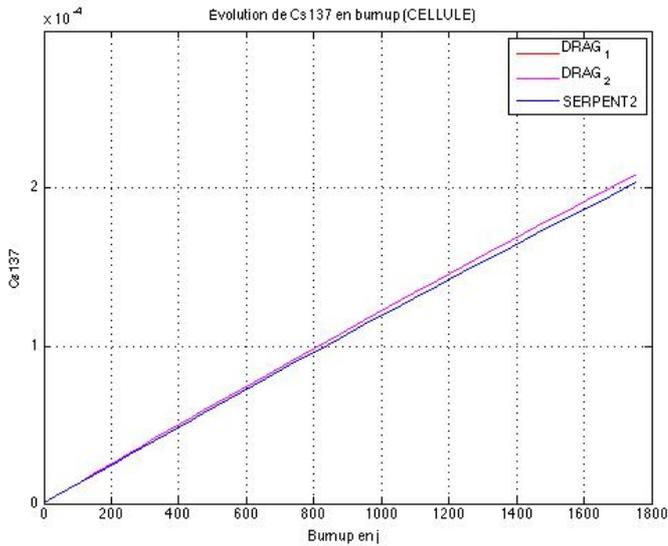
Annexe 4 : Courbes des concentrations isotopiques

Dans cette annexe, l'ensemble des courbes d'évolution des concentrations sera exposé. De gauche à droite, et de haut en bas sont respectivement présentés : **U5, Pu239, Am242m, Np237, Cs137, Sm151, Xe135.**

De même que pour le keff, la légende DRAG1 correspond à l'ancienne DRAGLIB et DRAG2 à la nouvelle DRAGLIB éditée par M. Hébert lors de ce stage. Les densités sont exprimées en **at/b/cm**.

Annexe 4.1 : Cellule





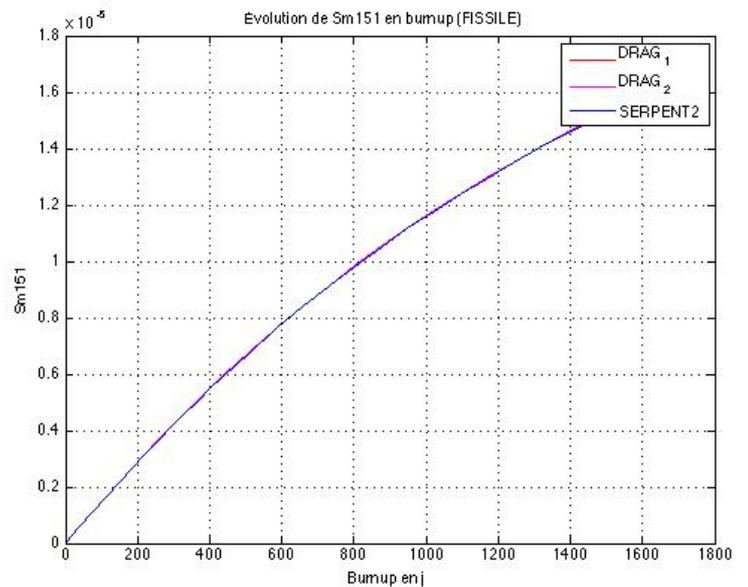
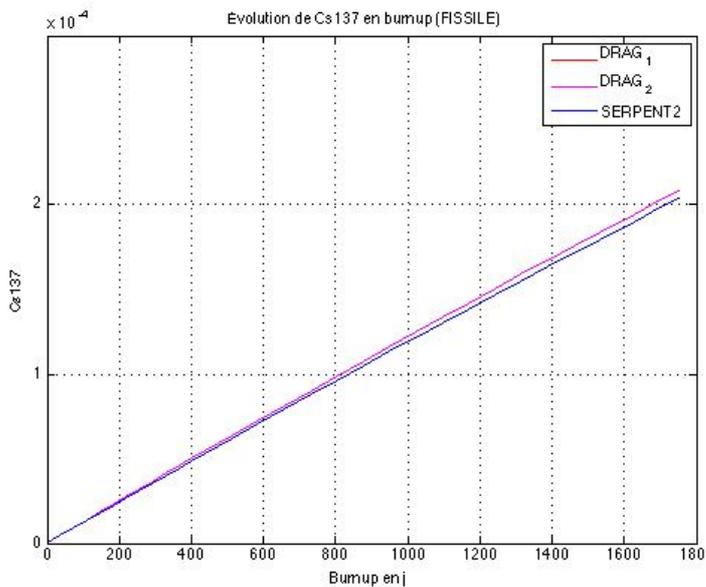
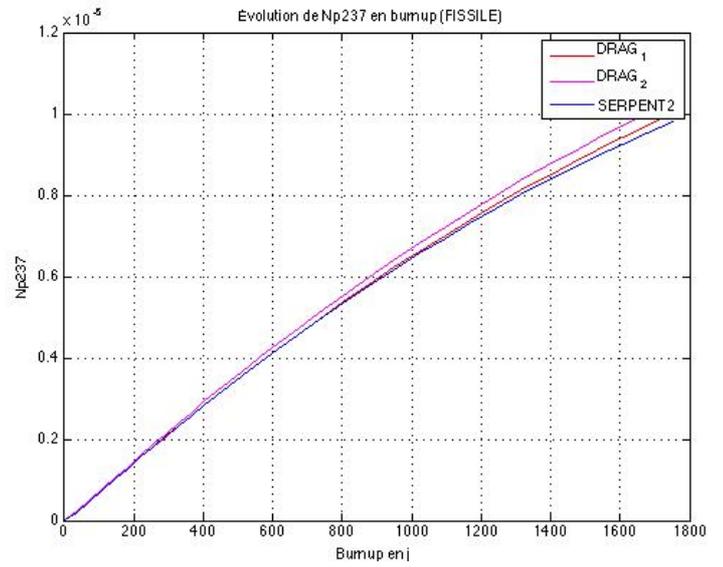
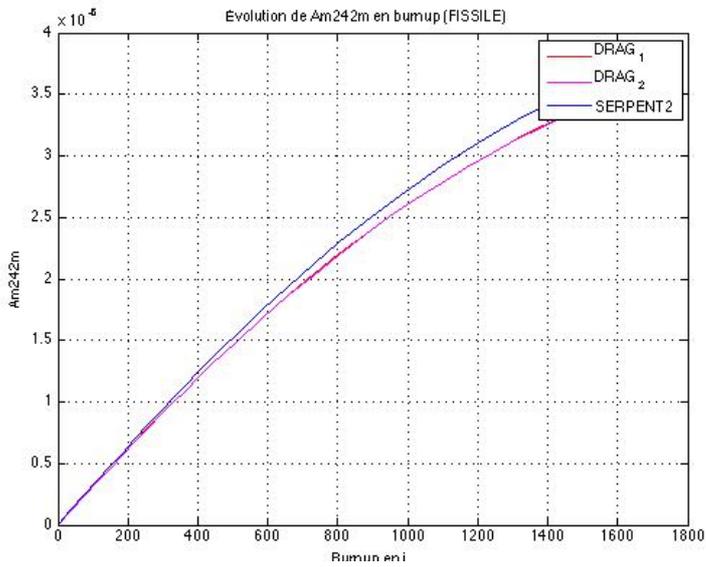
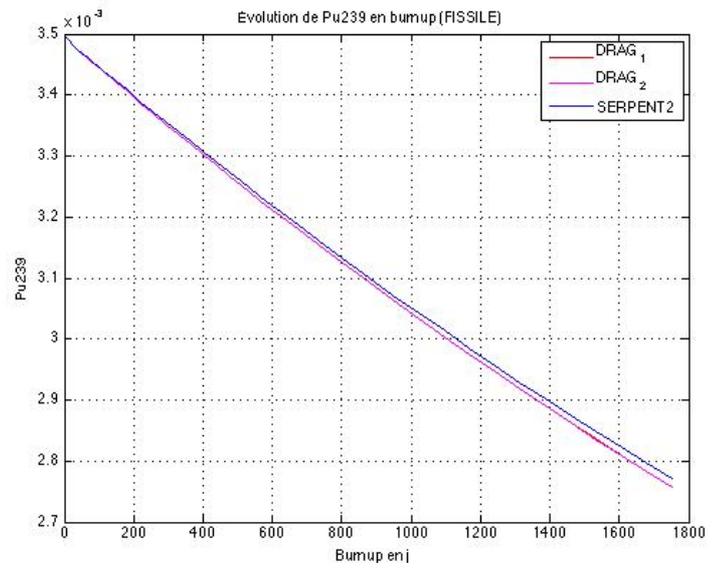
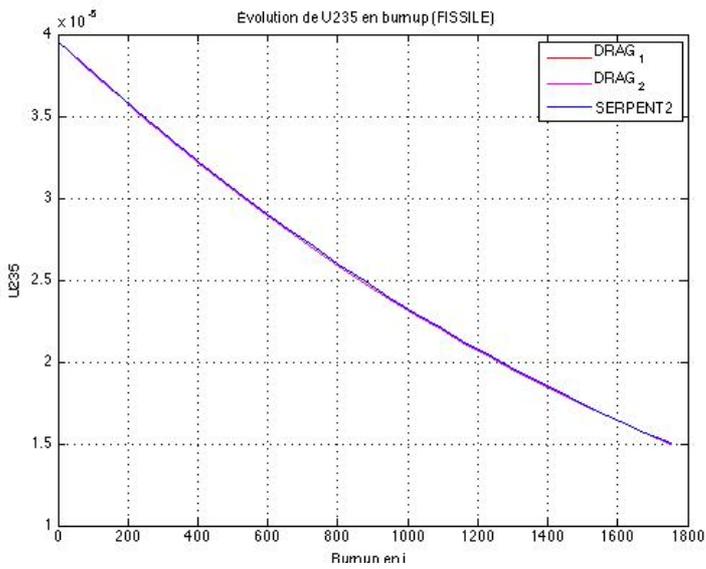
Les résultats sont nettement plus satisfaisants que pour l'évolution du keff.

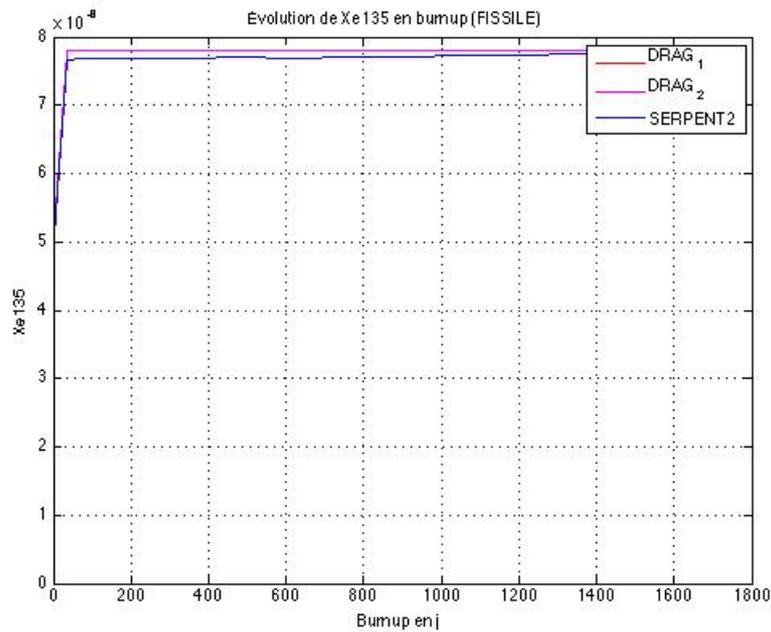
On remarque tout d'abord que la DRAGLIB n'a que très peu d'effet sur l'évolution des densités sauf pour le Np237 où une différence est remarquable.

En terme de validation, les résultats sont excellents pour l'U5 et le Sm151, les courbes étant presque confondues. Pour les autres isotopes, on observe une légère divergence de **1/10 d'at/b/cm** en moyenne. Seul l'Am242m présente une divergence plus importante de **quelques dixièmes d'at/b/cm**.

Globalement, nous sommes satisfaits de ces résultats.

Annexe 4.2 : Assemblage fissile

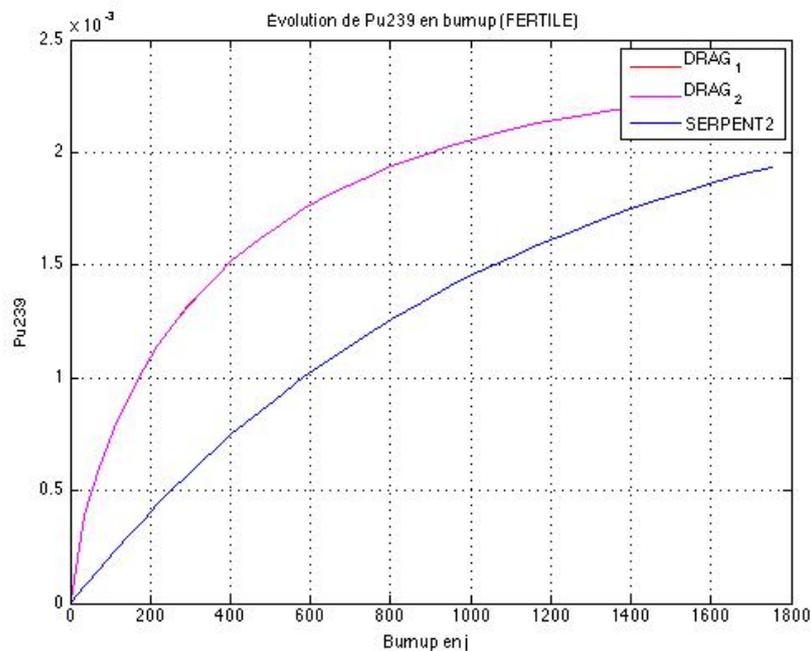




Les conclusions sont les mêmes que pour la cellule. Nous sommes satisfaits de ces résultats.

Annexe 4.3 : Assemblage fertile

Étant donné les mauvais résultats obtenus, seule l'évolution de la concentration de Pu239 sera exposée pour cet assemblage afin de mettre en évidence la surgénération.



On produit plus de Pu239 que l'on en consomme. On a bien une surgénération.

Résumé

Ce rapport traite du projet ASTRID qui devrait voir le jour dès 2020. En cours de développement, ce réacteur expérimental exploitant la technologie RNR-Na doit être validé par des codes neutroniques. C'était tout l'enjeu de ce stage.

À l'aide du code stochastique SERPENT, développé au VTT (Finlande), nous avons effectué diverses validations du code déterministe DRAGON développé à l'Institut de Génie Nucléaire de l'École Polytechnique de Montréal (Canada) sur différentes géométries relatives au réacteur ASTRID. Nous nous sommes intéressés dans un premier temps à une cellule unique, un assemblage fissile MOX et enfin un assemblage fertile UOX.

Pour chaque géométrie, deux étapes systématiques ont été suivies : une validation à Burn-up 0 pour le keff puis une validation en évolution pour le keff et plusieurs isotopes d'intérêts.

L'ensemble des résultats a été collecté et ensuite analysé sur MATLAB. Il s'en est dégagé des résultats médiocres concernant le keff et des résultats nettement plus encourageants pour les densités isotopiques.

Mots-clés : RÉACTEUR NUCLÉAIRE - NEUTRONIQUE - VALIDATION - ASTRID - DRAGON - SERPENT

Abstract

This report deals with the ASTRID project, which will be effective around 2020. Currently in development, this experimental reactor, which uses the SFR technology, must be validated by neutronic codes. It was the target of this internship.

Helped by the stochastic code SERPENT, developed at the VTT (Finland), we validated the DRAGON code developed at the Nuclear Engineering Institute (NEI) of Polytechnique Montréal (Canada) on many geometries linked to ASTRID. We first focused on one pin cell, then one MOX fissile assembly, and finally one UOX fertile assembly.

On each level we followed two steps: the first one was a validation at Burn-up 0 for the keff and the second one was a validation for the keff and many isotopic densities during an evolution.

All the results were collected and analysed with MATLAB. This led to bad results for the keff, but much better ones for the densities.

Keywords : NUCLEAR REACTOR - NEUTRON PHYSICS - VALIDATION - ASTRID - DRAGON - SERPENT