



Techniques de traçage pour la méthode des caractéristiques appliquée à la résolution de l'équation du transport des neutrons en domaines multi-dimensionnels

François Févotte

► To cite this version:

François Févotte. Techniques de traçage pour la méthode des caractéristiques appliquée à la résolution de l'équation du transport des neutrons en domaines multi-dimensionnels. Modélisation et simulation. Université Paris Sud - Paris XI, 2008. Français. <tel-00468118>

HAL Id: tel-00468118

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00468118>

Submitted on 30 Mar 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD 11

École doctorale : Rayonnements et Environnement

présentée par

François FÉVOTTE

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Paris-Sud 11

**Techniques de traçage pour la méthode des caractéristiques
appliquée à la résolution de l'équation du transport des neutrons
en domaines multi-dimensionnels**

soutenue le 8 octobre 2008, devant le jury composé de :

| | |
|--------------------------|--------------------|
| Tiina SUOMIJÄRVI | Présidente |
| Richard SANCHEZ | Directeur de thèse |
| Ernest MUND | Rapporteur |
| Piero RAVETTO | Rapporteur |
| Grégoire ALLAIRE | |
| Simone SANTANDREA | |

Laboratoire de rattachement :

Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe
Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées
Département de Modélisation des Systèmes et Structures
Délégation aux Activités Nucléaires de Saclay
Direction de l'Énergie Nucléaire
Commissariat à l'Énergie Atomique

CEA, centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD
91 191 Gif-sur-Yvette CEDEX

Techniques de traçage pour la méthode des caractéristiques appliquée à la résolution de l'équation du transport des neutrons en domaines multi-dimensionnels

François FÉVOTTE

Résumé

Parmi les différentes méthodes de résolution numérique de l'équation du transport des neutrons, la méthode des caractéristiques est actuellement l'une des plus employées pour les calculs industriels. Elle permet en effet d'obtenir un bon rapport entre précision et temps de calcul, tout en facilitant la description précise de géométries complexes grâce à un maillage non structuré. Afin de réduire la quantité de ressources requises par la méthode des caractéristiques, nous proposons dans ce mémoire deux axes d'amélioration.

Le premier axe de travail est fondé sur une analyse de la technique d'intégration transverse dans la méthode des caractéristiques. Un certain nombre de limites ont été détectées à ce niveau, que nous nous proposons de corriger en proposant une variante de la méthode des caractéristiques. En traitant au mieux les discontinuités matérielles, l'objectif est d'accroître la précision de l'intégration transverse, en vue de réduire le temps de calcul sans sacrifier la qualité des résultats. L'analyse des résultats numériques fournis par cette nouvelle méthode permet d'en montrer l'intérêt, ainsi que de mieux quantifier les approximations dues à l'intégration transverse.

Une autre amélioration découle de l'observation que la plupart des réacteurs en exploitation présentent des structures complexes, mais formées –au moins en partie– d'un réseau de cellules ou d'assemblages de géométries identiques. Nous proposons une méthode systématique issue de la théorie des groupes et permettant de tirer parti de ces répétitions. L'implémentation de cette technique permet de diminuer la quantité de ressources nécessaires pour stocker les informations relatives à la géométrie. Les résultats numériques en montrent l'intérêt dans un contexte industriel.

Mots clés : transport neutronique, MOC, méthode des caractéristiques, traçage, macrobandes, intégration transverse, domaines périodiques.

Tracking techniques for the method of characteristics applied to the neutron transport problem in multi-dimensional domains

François FÉVOTTE

Abstract

In the past years, the Method of Characteristics (MOC) has become a popular tool for the numerical solution of the neutron transport equation. Among its most interesting advantages are its good precision over computing time ratio, as well as its ability to accurately describe complicated geometries using non structured meshes. In order to reduce the need for computing resources in the method of characteristics, we propose in this dissertation two lines of improvement.

The first axis of development is based on an analysis of the transverse integration technique in the method of characteristics. Various limitations have been discerned in this regard, which we intend to correct by proposing a new variant of the method of characteristics. Through a better treatment of material discontinuities in the geometry, our aim is to increase the accuracy of the transverse integration formula in order to decrease the computing resources without sacrificing the quality of the results. This method has been numerically tested in order to show its interest. Analysing the numerical results obtained with this new method also allows better understanding of the transverse integration approximations.

Another improvement comes from the observation that industrial reactor cores exhibit very complex structures, but are often partly composed of a lattice of geometrically identical cells or assemblies. We propose a systematic method taking advantage of repetitions in the geometry to reduce the storage requirements for geometric data. Based on the group theory, this method can be employed for all lattice geometries. We present some numerical results showing the interest of the method in industrial contexts.

Keywords : neutron transport, MOC, Method Of Characteristics, tracking, macrobands, transverse integration, periodic domains.

Remerciements

Je tiens en tout premier lieu à remercier Richard Sanchez et Simone Santandrea, qui m'ont encadré durant cette thèse et sans qui rien de tout ce qui suit n'aurait pu être fait. Ils ont su me conseiller efficacement, tout en me laissant travailler très librement. Je remercie aussi Anne Nicolas et Sylvie Naury pour leur accueil chaleureux au sein du LTSD.

Je voudrais aussi remercier les membres de mon jury : Tiina Suomijärvi, Ernest Mund, Piero Ravetto et Grégoire Allaire, pour leurs remarques judicieuses qui m'ont permis d'améliorer la qualité de ce manuscrit.

Je tiens aussi à remercier tous ceux qui m'ont aidé au cours de cette thèse :

- Igor Zmijarevic, Emiliano Masiello et toute l'équipe "transport" du LTSD, pour les nombreuses discussions intéressantes que nous avons pu avoir ;
- Pierre Guérin, pour ses nombreux conseils et pour le modèle qu'il a été pour moi ;
- Steve Chauvet, Pietro Mosca et tous les autres thésards que j'ai pu croiser, pour les nombreuses discussions (utiles ou non) que nous avons pu avoir (je leur souhaite d'ailleurs une excellente fin de thèse) ;
- Zarko Stankovski, pour sa grande réactivité dans les corrections de bugs de Silène ;
- Céline Guénaut, pour son aide précieuse concernant les jeux de données géométriques ;

J'ai trouvé au SERMA une ambiance très chaleureuse et stimulante, dans laquelle j'ai beaucoup apprécié de travailler pendant ces trois ans. J'aimerais remercier tous ceux qui contribuent à cette ambiance, en particulier (dans le désordre et sans vouloir être exhaustif) : Laure Mondelain, Véronique Bellanger, Emiliano Masiello, Igor Zmijarevic, Zarko Stankovski, Jean-Michel Do, Nicolas Huot, Sébastien Lahaye, Mireille Coste, Guillaume Campioni, Sigfried Douce et Alexey Lokhov (avec une mention spéciale pour ce dernier pour l'enthousiasme avec lequel il m'a permis de reprendre le judo).

Enfin, je ne peux pas passer sous silence l'énorme travail de relecture qui a été fait par Marion, alors qu'elle n'est pas spécialiste de la neutronique.

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Introduction | 1 |
| I Contexte physique et méthodes numériques | 3 |
| 1 Neutronique et physique des réacteurs | 5 |
| 1.1 Modélisation du transport neutronique | 6 |
| 1.1.1 Équation de Boltzmann | 6 |
| 1.1.2 Conditions aux limites | 7 |
| 1.1.3 Équation stationnaire | 7 |
| 1.2 Résolution numérique de l'équation du transport | 8 |
| 1.2.1 Calcul de valeur propre | 8 |
| 1.2.2 Discrétisation en énergie | 9 |
| 1.2.3 Traitement de l'anisotropie de diffusion | 10 |
| 1.2.4 Discrétisation en angle | 11 |
| 1.2.5 Algorithme général | 12 |
| 1.3 Schémas de calculs | 12 |
| 1.3.1 Élaboration des données nucléaires | 12 |
| 1.3.2 Calcul de transport | 14 |
| 1.3.3 Calcul de diffusion | 14 |
| 2 Méthode des caractéristiques | 16 |
| 2.1 Transmission et balayage | 18 |
| 2.1.1 Équation de transmission | 18 |
| 2.1.2 Équation de bilan | 19 |
| 2.1.3 Discrétisation en régions homogènes | 20 |
| 2.1.4 Balayage | 20 |
| 2.2 Intégration transverse et traçage | 20 |
| 2.2.1 Formule d'intégration transverse | 20 |
| 2.2.2 Maillage transverse et traçage | 21 |
| 2.3 Traitement des conditions aux limites | 23 |
| 2.3.1 Conditions aux limites ouvertes : trajectoires simples | 23 |
| 2.3.2 Conditions aux limites fermées : trajectoires composées | 23 |
| 2.3.3 Domaines fermés : trajectoires cycliques | 24 |
| II Améliorations de la méthode d'intégration transverse | 29 |
| 3 Intégration transverse dans la méthode des caractéristiques | 31 |
| 3.1 Limites de la formule classique d'intégration transverse | 32 |
| 3.1.1 Discontinuités matérielles | 32 |
| 3.1.2 Représentation transverse constante par morceaux | 33 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 3.1.3 | Conséquences sur le pas de traçage | 34 |
| 3.1.4 | Solutions trouvées dans la littérature | 35 |
| 3.2 | Méthode des macrobandes | 37 |
| 3.2.1 | Projection locale des discontinuités | 37 |
| 3.2.2 | Répartition du flux aux interfaces | 39 |
| 3.2.3 | Coefficient de transmission moyen | 40 |
| 3.2.4 | Domaines fermés | 42 |
| 3.2.5 | Aperçu global de la méthode des macrobandes et complexité algorithmique | 43 |
| 4 | Implémentation, résultats numériques, analyse et perspectives | 47 |
| 4.1 | Notes sur l'implémentation de la méthode des macrobandes | 48 |
| 4.1.1 | Découpage des macrobandes en sections | 48 |
| 4.1.2 | Projection locale des discontinuités | 49 |
| 4.1.3 | Redistribution du flux aux interfaces | 51 |
| 4.2 | Résultats numériques | 52 |
| 4.2.1 | Comparaison MOC / macrobandes | 52 |
| 4.2.2 | Convergence | 53 |
| 4.2.3 | Précision | 54 |
| 4.2.4 | Temps de calcul | 56 |
| 4.3 | Perspectives pour la méthode des macrobandes | 57 |
| 4.3.1 | Détermination automatique du pas de traçage optimal | 57 |
| 4.3.2 | Représentation transverse linéaire du flux | 57 |
| III | Traçage en géométries périodiques | 65 |
| 5 | Traçages périodiques | 67 |
| 5.1 | Problématique du traçage en domaines périodiques | 68 |
| 5.1.1 | Conditions aux limites homogènes avec la construction du réseau | 69 |
| 5.1.2 | Conditions aux limites incompatibles avec le réseau | 70 |
| 5.1.3 | Domaines non entièrement périodiques | 70 |
| 5.2 | Méthode générale de traçage périodique | 71 |
| 5.2.1 | Analyse des symétries du traçage local | 71 |
| 5.2.2 | Invariance par symétries internes | 72 |
| 5.2.3 | Construction d'un traçage périodique complet | 73 |
| 5.2.4 | Reconstruction du traçage global – Parties non périodiques | 75 |
| 5.3 | Application aux réseaux habituels | 76 |
| 5.3.1 | Réseaux rectangulaires | 76 |
| 5.3.2 | Réseaux hexagonaux | 80 |
| 6 | Résultats numériques pour le traçage périodique | 84 |
| 6.1 | Détails d'implémentation du traçage périodique | 85 |
| 6.1.1 | Traçage local | 85 |
| 6.1.2 | Macro-traçage | 86 |
| 6.2 | Résultats numériques | 90 |
| 6.2.1 | Cluster de cellules combustibles | 90 |
| 6.2.2 | Cluster d'assemblages | 91 |
| 6.2.3 | Domaine non entièrement périodique | 92 |
| 6.2.4 | Conclusions | 96 |
| 6.3 | Perspectives de développement | 96 |

| | |
|------------------------------------|------------|
| Conclusions et perspectives | 99 |
| Bibliographie | 101 |

Introduction

Les enjeux de recherche et développement concernant les réacteurs nucléaires sont nombreux : accroissement des exigences de sûreté, amélioration du rendement des parcs actuels de centrales, développement de nouveaux concepts de réacteurs. Pour répondre à ces enjeux, il est nécessaire de disposer de méthodes de simulation toujours plus précises et efficaces. En effet, pour des raisons évidentes de sûreté, ainsi qu'à cause de la difficulté (voire impossibilité dans certains cas) d'effectuer des mesures physiques à l'intérieur des cœurs de réacteurs, la plupart des études de réacteurs sont effectuées en simulation numérique.

La simulation complète d'un réacteur nucléaire fait intervenir de nombreux domaines physiques : thermohydraulique, mécanique des structures ou des matériaux et neutronique, pour n'en citer que quelques uns. Il est donc nécessaire de disposer de codes de calculs à la fois assez variés et généraux pour permettre l'étude de nombreux types de réacteurs, et assez performants pour une utilisation industrielle efficace.

La simulation du comportement de la population neutronique est l'une des étapes fondamentales, puisqu'elle permet entre autres de calculer la densité de puissance ou les taux d'épuisement du combustible. Dans ce cadre, nous nous intéressons au flux neutronique, qui est décrit par une équation de Boltzmann. Pour les études concernant le fonctionnement normal du réacteur, les constantes de temps caractéristiques sont de l'ordre de l'heure, c'est-à-dire très largement supérieures à la durée de vie moyenne des neutrons. Dans cette optique, les ressources de calcul sont concentrées sur la bonne prise en compte des effets spatiaux et énergétiques, et l'on néglige les effets temporels en ne résolvant que l'équation de Boltzmann stationnaire.

Différentes techniques numériques ont été mises en place pour résoudre de manière efficace cette équation. Ces techniques ont dû évoluer en fonction de différents facteurs conjoncturels, tels que les besoins de l'industrie ou les moyens techniques disponibles, principalement en ce qui concerne les calculateurs. Depuis quelques années, la méthode des caractéristiques rencontre un succès croissant. Elle offre en effet un bon rapport précision sur temps de calcul, tout en permettant d'opérer en géométrie non structurée, ce qui est un avantage non négligeable pour modéliser les géométries actuelles de réacteurs. Cependant, dans l'état actuel des développements de la méthode, sa consommation de ressources et encore assez importante et ne permet généralement le calcul d'un cœur de réacteur complet qu'en deux dimensions. C'est pourquoi les chaînes de calculs actuellement utilisées font généralement intervenir une simulation finale à trois dimensions à l'échelle du cœur complet, mais en utilisant l'approximation de la diffusion.

Ainsi, l'amélioration des performances de la méthode des caractéristiques est un enjeu important de la simulation neutronique, dans la mesure où elle pourrait conduire à la mise en place d'une chaîne de calculs plus courte et plus exacte. C'est dans ce cadre que ce travail se place, en proposant des améliorations du solveur TDT, développé au CEA dans le cadre du projet APOLLO. L'objectif est ici de permettre l'obtention de résultats de qualité équivalente pour un coût de calcul réduit, en utilisant la méthode des caractéristiques à deux dimensions. Nous chercherons à optimiser l'utilisation de ressources à la fois en ce qui concerne l'espace de stockage nécessaire en mémoire, et l'occupation du micro-processeur.

Comme pour la plupart des méthodes déterministes de simulation numérique, la consommation de ressources de la méthode des caractéristiques est presque directement proportionnelle au niveau de discrétisation requis pour atteindre la précision souhaitée. Ainsi, un premier axe de travail consiste à améliorer la précision de la méthode, en vue de permettre la diminution du degré de discrétisation sans sacrifier la qualité du résultat.

Une étude détaillée des équations de la méthode des caractéristiques montre que l'une des principales sources d'approximations réside dans la méthode d'intégration transverse. Nous nous proposons donc dans un premier temps d'étudier et de mieux comprendre ces approximations, avant de les corriger en introduisant une variante de la méthode des caractéristiques. L'objectif ici est de permettre, à travers des améliorations de la méthode elle-même, d'obtenir un meilleur rapport précision sur coût de calcul.

Par ailleurs, tout en gardant les mêmes équations et algorithmes, la méthode des caractéristiques peut être implémentée de manières très diverses. Les développeurs sont constamment amenés à trouver des compromis entre mémoire et occupation du processeur, leurs choix étant guidés par des facteurs aussi changeants et variés que les besoins de l'industrie, les contraintes techniques des calculateurs, la rapidité d'implémentation ou encore la facilité de maintenance à long terme. Une autre approche consiste donc à travailler sur l'implémentation de la méthode pour en diminuer le coût, les équations et algorithmes restant inchangés.

En ce qui concerne l'occupation de la mémoire, l'une des principales limitations de la méthode des caractéristiques provient du stockage des informations liées à la géométrie. En faisant l'observation que la plupart des technologies actuelles de réacteurs présentent des géométries en grande partie périodiques, nous nous proposons d'étudier l'impact qu'ont ces redondances sur les informations géométriques stockées par le solveur. Nous introduisons une méthode permettant de tirer parti des répétitions de la géométrie pour faire décroître les besoins de la méthode des caractéristiques en termes de capacité de stockage.

Ce mémoire est organisé comme suit : dans une première partie, nous présentons l'état de l'art concernant la simulation numérique en neutronique à l'aide de la méthode des caractéristiques. Nous commençons par introduire brièvement la modélisation du transport neutronique et la discrétisation de l'équation de Boltzmann. Nous détaillons ensuite plus précisément la méthode des caractéristiques au travers de ses équations et algorithmes traditionnellement mis en place.

Dans une deuxième partie, nous nous intéressons plus spécifiquement à l'intégration transverse. Nous montrons les limites des équations classiques de la méthode des caractéristiques et introduisons notre nouvelle variante, destinée à les corriger. Nous détaillons l'implémentation de la méthode des macrobandes que nous avons effectuée au sein du solveur TDT, et montrons son intérêt tant pratique que théorique grâce à l'étude des résultats numériques.

Dans une dernière partie, nous abordons le problème du traitement des informations géométriques dans les domaines de calcul périodiques. Nous introduisons la problématique et présentons notre méthode de traçage permettant de tirer parti des redondances pour limiter la taille de stockage nécessaire. L'implémentation de cette méthode est discutée, ainsi que les résultats qu'elle fournit.

Enfin, nous concluons ce mémoire par une brève discussion des résultats obtenus et des perspectives à étudier à l'avenir.

Première partie

**Contexte physique et méthodes
numériques**

Chapitre 1

Neutronique et physique des réacteurs

Nous présentons dans ce chapitre le contexte de la simulation numérique en neutronique et physique des réacteurs.

Après avoir rappelé quelques bases de modélisation neutronique, l'équation de Boltzmann stationnaire est introduite. Les différentes étapes de discrétisation sont ensuite présentées, pour arriver à la formulation du système d'équations à valeur propre, multigroupes, S_N à résoudre. On resitue enfin la résolution numérique du transport dans le contexte du schéma de calcul traditionnel pour les REP.

Dans le cadre de la physique des réacteurs nucléaires, la neutronique a pour but d'étudier les réactions que les neutrons induisent sur la matière contenue dans le cœur du réacteur. Un intérêt tout particulier est porté aux réactions de fission des noyaux lourds, qui génèrent l'énergie utilisée pour produire de l'électricité.

Dans ce chapitre, la discussion sera principalement centrée sur la résolution numérique du problème du transport des neutrons, et n'évoque que rapidement la modélisation. De plus amples détails sur la physique des réacteurs et la modélisation neutronique sont disponibles par exemple dans Reuss [2003], Reuss et Bussac [1985] ou Lewis et Miller [1993].

Nous étudierons dans ce chapitre les différents outils utilisés dans le cadre de la simulation numérique en neutronique. Dans un premier temps, nous nous concentrerons sur la modélisation neutronique en présentant l'équation de Boltzmann. Nous introduirons ensuite les techniques de simulation numérique du transport des neutrons, en discutant plus spécialement les méthodes de discrétisation utilisées par les méthodes déterministes. Enfin, nous présenterons de manière plus globale l'ensemble de la chaîne de calculs neutronique traditionnellement utilisée pour les études industrielles, par exemple pour les réacteurs à eau pressurisée.

1.1 Modélisation du transport neutronique

La population neutronique d'un système est représentée de manière statistique par la densité neutronique $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ ou le flux neutronique $\psi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = v n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$, qui dépendent de l'instant t considéré, ainsi que des variables indépendantes suivantes :

$$\begin{aligned} \vec{r} = (x, y, z) & \quad - \text{ position} \\ v \text{ ou } E \ (E = \frac{1}{2} m v^2) & \quad - \text{ vitesse ou énergie} \\ \vec{\Omega} & \quad - \text{ vecteur unitaire de direction} \end{aligned}$$

1.1.1 Équation de Boltzmann

L'équation du transport des neutrons, qui permet de modéliser le flux neutronique, prend la forme d'une équation cinétique de Boltzmann, dans laquelle les interactions entre neutrons sont négligées. Pour un domaine géométrique \mathcal{D} , cette équation prend la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \overbrace{L\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}^{\text{transport \& collisions}} \\ = \underbrace{H\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{transfert}} + \underbrace{F\psi(\vec{r}, E, t)}_{\text{fission}} + \underbrace{Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{sources externes}} \quad \text{dans } \mathcal{X}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

où \mathcal{X} est l'espace des phases associé à \mathcal{D} , L , H et F sont des opérateurs explicités ci-dessous, et Q_{ext} représente les sources neutroniques externes au système.

Cette forme intégral-différentielle de l'équation de transport est simplement obtenue en établissant le bilan neutronique dans un élément différentiel de l'espace des phases. Trois phénomènes sont considérés :

- l'opérateur L prend en compte les fuites (transport spatial) ainsi que les collisions :

$$L\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t);$$

- l'opérateur H prend en compte le transfert en angle et en énergie (*scattering*) :

$$H\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \int_{E' \vec{\Omega}'} dE' d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, t) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t);$$

– l'opérateur F caractérise la production de neutrons par fission :

$$F\psi(\vec{r}, E, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_i(E) \int_{E', \vec{\Omega}'} dE' d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_{f_i}(\vec{r}, E', t) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t),$$

où la sommation en i se fait sur tous les isotopes fissiles présents au point \vec{r} .

Les notations suivantes ont été employées :

| | |
|--|---|
| $\Sigma_t(\vec{r}, E, t)$ | – section efficace macroscopique totale ; |
| $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, t)$ | – section efficace différentielle de diffusion ; |
| $\chi_i(E)$ | – spectre de fission ; |
| $\nu \Sigma_{f_i}(\vec{r}, E', t)$ | – nombre moyen de neutrons produits \times section de fission ; |
| $Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ | – source externe de neutrons. |

1.1.2 Conditions aux limites

L'équation de Boltzmann (1.1) est assortie de conditions aux limites du domaine, exprimées sur la frontière entrante de l'espace des phases :

$$\partial\mathcal{X}_- = \left\{ (\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \in \mathcal{X}; \vec{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et } \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0 \right\},$$

où $\partial\mathcal{D}$ est la frontière du domaine géométrique \mathcal{D} et \vec{n} est le vecteur normal à cette frontière.

Suivant la nature du problème modélisé, les conditions aux limites peuvent être de deux types. Il peut s'agir d'une condition de type Dirichlet, dans laquelle on impose une valeur du flux angulaire entrant qui sera vu comme une source surfacique de neutrons. C'est par exemple le cas d'un domaine géométrique convexe entouré par le vide, qu'on modélisera par la condition aux limites suivante :

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = 0 \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-. \quad (1.2)$$

On peut aussi utiliser des conditions aux limites modélisant un déplacement géométrique particulier. Par exemple dans le cas de domaines symétriques ou répétitifs, le problème du transport n'est résolu que sur le motif élémentaire avec des conditions aux limites de réflexion spéculaire (1.3), translation (1.4) ou rotation (1.5) :

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega} - 2\vec{n}(\vec{\Omega} \cdot \vec{n})) \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-, \quad (1.3)$$

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi(\vec{r} - \vec{t}, E, \vec{\Omega}) \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-, \quad (1.4)$$

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \psi(r_{-\theta}(\vec{r}), E, r_{-\theta}(\vec{\Omega})) \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-. \quad (1.5)$$

Dans ces expressions, \vec{t} représente le vecteur caractérisant la translation et r_θ est l'opérateur de rotation d'angle θ .

1.1.3 Équation stationnaire

Dans le cadre de la simulation du fonctionnement normal d'un réacteur nucléaire, on recherche généralement une solution stationnaire à l'équation du transport des neutrons. Les sections efficaces ont en effet des variations très lentes par rapport à la durée de vie moyenne des neutrons.

Cependant, une solution stationnaire de l'équation de Boltzmann ne peut exister que si, à chaque instant, les pertes de neutrons (par absorption ou fuite) sont exactement compensées

par la production (par fission). Dans le cas d'un réacteur sans source externe, on considère donc l'équation stationnaire suivante :

$$L\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{1}{\lambda}F\psi(\vec{r}, E) \quad \text{dans } \mathcal{X}, \quad (1.6)$$

avec les notations de l'équation (1.1). λ est la valeur propre introduite pour permettre l'existence d'une solution stationnaire.

Dans la suite de ce document, nous considérerons uniquement la résolution de l'équation de Boltzmann stationnaire, qui consistera à déterminer conjointement la plus grande valeur propre et le flux neutronique stationnaire associé vérifiant l'équation (1.6).

1.2 Résolution numérique de l'équation du transport

La résolution analytique directe de l'équation du transport n'est en général pas possible. Même si les géométries étaient très simples (ce qui n'est généralement pas le cas pour les réacteurs actuels), les variations des sections efficaces rendraient la description analytique du problème impossible.

Deux grandes approches sont donc généralement utilisées pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann : l'approche probabiliste et l'approche déterministe.

Les méthodes probabilistes, dites de Monte-Carlo, présentent l'avantage de ne pas nécessiter de discrétisation de l'espace des phases. Elles permettent de traiter simplement le problème du transport sans introduire d'approximations. En revanche, ces méthodes sont fondées sur l'examen statistique d'un grand nombre d'histoires de neutrons simulées. L'obtention d'une grande précision dans les résultats est donc conditionnée par la simulation de très nombreuses histoires de neutrons, et donc un temps de calcul très élevé.

Les méthodes déterministes sont en général plus rapides, ce qui justifie leur emploi fréquent par l'industrie du nucléaire. En revanche, elles nécessitent une discrétisation des variables énergétique, angulaire et spatiale, ce qui introduit une approximation dans la résolution. Les méthodes déterministes sont donc toujours validées par comparaison à des méthodes probabilistes ou des mesures physiques.

Dans la suite de ce document, nous nous intéresserons exclusivement aux méthodes de résolution déterministes, en commençant par détailler les différentes étapes de discrétisation de l'équation du transport [Sanchez et McCormick, 1982]. Nous nous intéressons dans cette section principalement aux discrétisations des variables énergétique et angulaire ; la discrétisation spatiale, qui est plus spécifique à la méthode des caractéristiques, sera discutée dans le chapitre prochain.

1.2.1 Calcul de valeur propre

La résolution conjointe du flux neutronique et de la valeur propre dans l'équation (1.6) se fait par itérations (dites externes, ou « de puissance »). À l'itération $n + 1$, le flux neutronique est calculé en utilisant la valeur propre et les sources de fission issues de l'itération précédente n :

$$L\psi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\psi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{1}{\lambda^n}F\psi^n(\vec{r}, E). \quad (1.7)$$

En intégrant (1.6) et (1.7) sur l'espace des phases, on obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} \left(L\psi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - H\psi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right) \\ = \frac{1}{\lambda^{n+1}} \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\psi^{n+1}(\vec{r}, E), \\ \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} \left(L\psi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - H\psi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right) \\ = \frac{1}{\lambda^n} \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\psi^n(\vec{r}, E), \end{aligned}$$

d'où on tire la relation permettant de mettre à jour la valeur propre entre deux itérations :

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n \frac{\iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\psi^{n+1}(\vec{r}, E)}{\iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\psi^n(\vec{r}, E)}. \quad (1.8)$$

Les itérations externes sont arrêtées à convergence de la valeur propre.

1.2.2 Discrétisation en énergie

Nous discrétisons la variable E en considérant des groupes, indexés par g , d'énergie comprise entre E_g et E_{g-1} . Le flux neutronique du groupe g est défini par :

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

La réécriture de l'équation de Boltzmann dans le formalisme multigroupe fait appel à des sections efficaces multigroupes, dont la définition exacte devrait être :

$$\begin{aligned} \Sigma_t^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \frac{1}{\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}); \\ \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) &= \frac{1}{\psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}')} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'). \end{aligned} \quad (1.9)$$

On peut remarquer que la section totale multigroupe Σ_t^g devient dépendante de l'angle. Ce problème peut être résolu de plusieurs manières, la plus simple et la plus classique étant de supposer la séparabilité de la variable énergétique. Sous cette hypothèse, on peut écrire le flux angulaire sous la forme suivante, à l'intérieur d'un groupe d'énergie g :

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = f(E) \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}),$$

avec

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE f(E) = 1.$$

La pondération des sections efficaces par le flux se simplifie alors pour éliminer la dépendance angulaire :

$$\begin{aligned} \Sigma_t^g(\vec{r}) &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma_t(\vec{r}, E) f(E); \\ \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) f(E'). \end{aligned}$$

Une autre méthode de traitement de la dépendance angulaire a été proposée par Bell *et al.* [1967], et ne suppose pas cette séparabilité de la variable énergétique.

Dans tous les cas, les définitions des sections efficaces multigroupes ne peuvent en pratique pas être utilisées, puisqu'elles font apparaître le flux non discrétisé $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, qui est inconnu. On doit donc utiliser des estimations de ces sections efficaces, en utilisant un flux neutronique connu et aussi représentatif que possible du problème traité. Dans le domaine des résonances non résolues, il est nécessaire d'utiliser un formalisme d'autoprotection complexe, permettant de prendre en compte les effets d'interaction mutuelle des résonances en espace et en énergie. Ceci représente une part importante des développements des méthodes déterministes, mais ne sera pas abordé ici. Dans le reste de ce document, nous supposons que les solveurs de transport neutronique disposent en entrée de toutes les données nucléaires multigroupes adaptées au calcul à effectuer.

Après discrétisation dans le formalisme multigroupe, l'équation du transport des neutrons (1.6) se présente sous la forme d'un système de G équations (où G est le nombre de groupes) couplées par des termes sources :

$$\left(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_i^g(\vec{r}) \right) \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (1.10)$$

où $Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ rassemble toutes les sources de neutrons, provenant de la fission ou des diffusions :

$$\begin{aligned} Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = & \sum_{g'} \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \\ & + \frac{1}{\lambda} \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_i^g \sum_{g'} \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_{f_i}^{g'}(\vec{r}) \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \\ & + \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \end{aligned}$$

Le système multigroupe (1.10) est généralement résolu grâce à un processus itératif conventionnel. Dans les groupes de haute énergie, les diffusions ne font que ralentir les neutrons (on parle de ralentissement pur). Le calcul des sources externes à un groupe g fait alors intervenir seulement les groupes g' d'énergie supérieure ($g' < g$). En résolvant successivement les équations monocinétiques pour les groupes d'énergie décroissante, on peut donc supposer les sources de transfert connues. En revanche, dans le domaine de plus faible énergie, le phénomène de thermalisation des neutrons induit un couplage entre les groupes. La résolution des équations monocinétiques pour les groupes thermiques doit donc se faire de manière simultanée (en pratique avec un algorithme de Gauss-Seidel).

Dans la suite de ce document, nous considérerons l'équation intégral-différentielle du transport uniquement en théorie multigroupe. Autant que possible, nous omettrons les indices de groupes pour éviter de surcharger les notations.

1.2.3 Traitement de l'anisotropie de diffusion

De manière classique, l'anisotropie de la source de diffusion est traitée grâce à un développement en harmoniques sphériques. Pour la plupart des matériaux, les milieux sont isotropes. La section efficace de diffusion $\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ ne dépend donc généralement pas de la direction du neutron incident $\vec{\Omega}$, mais seulement de l'angle de diffusion $\mu_0 = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$. Elle peut donc être représentée par un développement sur en polynômes de Legendre P_l :

$$\Sigma_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \Sigma_{sl}(\vec{r}, E) P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'),$$

où les coefficients Σ_{sl} sont obtenus par simple projection :

$$\Sigma_{sl}(\vec{r}, E) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu_0 \Sigma_s(\vec{r}, E, \mu_0) P_l(\mu_0).$$

La source de diffusion devient donc

$$\begin{aligned} Q_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}') \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \Sigma_{sl}(\vec{r}, E) \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}') \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \Sigma_{sl}(\vec{r}, E) \sum_{m=-l}^l A_{lm}(\vec{\Omega}) \phi_{lm}(\vec{r}, E), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le théorème d'addition des harmoniques sphériques et introduit les harmoniques sphériques réelles A_{lm} ainsi que les moments ϕ_{lm} du flux angulaire :

$$\phi_{lm}(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} A_{lm} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}).$$

1.2.4 Discrétisation en angle

Pour la discrétisation de l'espace angulaire, la méthode la plus utilisée est celle des ordonnées discrètes (aussi appelée méthode S_N). Il s'agit d'une méthode collocative, dans laquelle on résout l'équation vérifiée par le flux angulaire uniquement dans un nombre fini de directions. Les intégrales en angle sont approchées par une formule de quadrature de type Gauss.

Pour un ensemble de directions $\{\vec{\Omega}_d, d \in \llbracket 1, N_d \rrbracket\}$, de poids associés $\{w_d, d \in \llbracket 1, N_d \rrbracket\}$ dans la formule de quadrature, l'équation du transport multigroupe (1.10) se ramène au système d'équations :

$$\left(\vec{\Omega}_d \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_t^g(r) \right) \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_d) = Q_s^{g,d}(\vec{r}) + Q^{g,d}(\vec{r}), \quad (1.11)$$

couplées par les termes de source. $Q^{g,d}$ représente les sources de neutrons provenant de la fission ou de sources externes. $Q_s^{g,d}$ est la source de diffusion provenant du flux angulaire dans les autres groupes d'énergie et dans les autres directions :

$$Q_s^{g,d}(\vec{r}) = \sum_{g'} \sum_{l=0}^{\infty} \Sigma_{sl}^g(\vec{r}) \sum_{m=-l}^l A_{lm}(\vec{\Omega}_d) \phi_{lm}^g(\vec{r})$$

Elle est calculée en utilisant les moments du flux angulaire intégrés à l'aide de la formule de quadrature angulaire :

$$\phi_{lm}^g(\vec{r}) = \sum_{d=1}^{N_d} w_d A_{lm}(\vec{\Omega}_d) \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_d)$$

Le choix de la formule de quadrature sera détaillé plus spécifiquement dans les chapitres suivants. Nous pouvons cependant d'ores et déjà remarquer que cette formule de quadrature conditionne d'une part la précision des intégrations en angle, et d'autre part la prise en compte des conditions aux limites.

En effet, dans le cas de la réflexion spéculaire (1.3) ou de la rotation (1.5), la condition aux limites couple les flux angulaires $\psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ et $\psi(\vec{r}, T\vec{\Omega})$ (où T est la transformation associée à la condition aux limites, respectivement : symétrie ou rotation). Si la formule de quadrature angulaire n'est pas stable par cette transformation, la prise en compte de la condition aux limites ne pourra être faite de manière exacte.

1.2.5 Algorithme général

Pour récapituler, la figure 1.1 reprend les grandes étapes de la résolution numérique de l'équation de Boltzmann : pour chaque direction de la formule de quadrature angulaire et pour chaque groupe d'énergie, on résout l'équation (1.11) en utilisant les sources calculées avec le flux de l'itération précédente :

$$\left(\vec{\Omega}_d \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_t^g(r) \right) \psi_{g,d}^{i+1}(\vec{r}) = Q_{g,d}^i(\vec{r}), \quad (1.12)$$

où $\psi_{g,d}^i$ représente le flux angulaire à l'itération i dans le groupe g et dans la direction Ω_d ; $Q_{g,d}^i$ représente les sources de neutrons dans le groupe g et la direction $\vec{\Omega}_d$, calculées à l'aide du flux angulaire de l'itération i . Ce terme source contient deux contributions :

- les sources de collision, qui sont mises à jour à la fin de la résolution dans un groupe d'énergie donné ;
- les sources de fission, qui sont mises à jour à la fin d'une itération externe.

On itère le processus jusqu'à convergence sur la source.

1.3 Schémas de calculs

La géométrie des cœurs de réacteurs est en général relativement complexe et hétérogène. Elle fait intervenir des structures à des échelles différentes, depuis les crayons de combustibles (d'un diamètre d'environ 1 cm) jusqu'à la cuve (d'une taille caractéristique de l'ordre de 4 m). La description complète de la géométrie d'un réacteur nucléaire est donc très lourde.

De plus, l'énergie des neutrons varie dans un domaine très large (de l'ordre de 7 à 8 décades), sur lequel les données nucléaires caractérisant les matériaux présents dans le cœur (sections efficaces) présentent des variations très irrégulières et importantes. Il est donc aussi relativement difficile de décrire très finement toutes les sections efficaces apparaissant dans les phénomènes neutroniques du cœur d'un réacteur.

Pour toutes ces raisons, la discrétisation directe de l'équation du transport à l'échelle du cœur conduirait à un système d'équations gigantesque. La simulation neutronique complète d'un réacteur n'est donc à l'heure actuelle pas envisageable directement (que ce soit à cause de limitations sur la durée des calculs ou la quantité de stockage disponible sur les calculateurs).

Pour pallier cette difficulté, on a recours à des schémas de calculs qui, en enchaînant plusieurs calculs utilisant différents modèles d'approximation, permettent pour un coût raisonnable d'accéder à des résultats précis.

1.3.1 Élaboration des données nucléaires

La modélisation neutronique nécessite la connaissance d'un grand nombre de données nucléaires, caractérisant les interactions entre neutrons et noyaux présents dans le cœur : sections efficaces, rendements de fission, *etc.* Ces données conditionneront la qualité de tous les résultats des simulations neutroniques qui les utilisent. Il est donc absolument indispensable de disposer de bibliothèques de données nucléaires précises, validées et qualifiées pour l'utilisation qu'on veut en faire. C'est l'objet de la chaîne d'élaboration des données nucléaires :

1. évaluation des données nucléaires, à partir de mesures physiques ou de modèles théoriques provenant de la physique nucléaire [Herman, 2005] ;

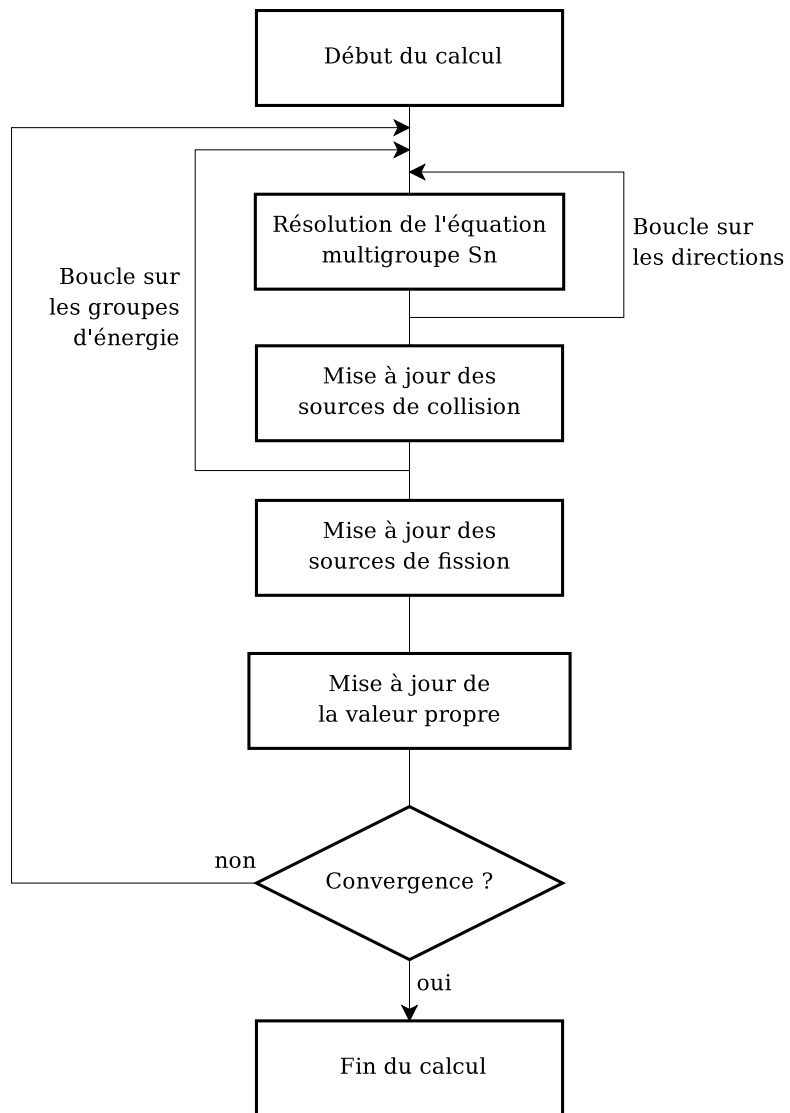


FIG. 1.1: Algorithme général de résolution du problème du transport des neutrons

2. reconstruction de sections efficaces ponctuelles (ou tables de probabilités dans le domaine de résonances non résolues) [MacFarlane et Muir, 1994; Sublet *et al.*, 2006];
3. calcul de sections efficaces multigroupes, éventuellement autoprotégées suivant les isotopes (Cf. section 1.2.2) [Livolant et Jeanpierre, 1974; Coste-Delclaux, 2006];
4. validation et qualification des bibliothèques de données nucléaires grâce à des comparaisons calcul/calcul ou calcul/mesure.

1.3.2 Calcul de transport

À partir des bibliothèques de sections efficaces multigroupes, le code de calcul de transport a pour but de résoudre l'équation de Boltzmann. Les résultats du calcul peuvent être intéressants directement (par exemple : calcul de flux, taux de réactions et facteurs de multiplication dans un cœur de petite taille), ou bien être utilisés pour calculer des sections efficaces homogénéisées (sur des mailles spatiales plus larges) et condensées (sur un maillage énergétique plus grossier) qui pourront être utilisées pour un calcul de diffusion.

Ce calcul est généralement effectué à l'échelle de l'assemblage, d'un motif de quelques assemblages ou éventuellement d'un petit cœur. La discrétisation géométrique est aussi précise que possible et les bibliothèques de sections efficaces utilisées comprennent typiquement quelques centaines de groupes d'énergie. L'un des enjeux actuels en simulation du transport neutronique est d'accroître la performance de ce type de codes pour permettre la simulation de cœurs complets.

En revanche, cette bonne précision dans les descriptions géométrique et énergétique rend le calcul assez lourd, et ne permet pas de traiter la variable temporelle. Les calculs de transport sont donc en général uniquement stationnaires.

1.3.3 Calcul de diffusion

Lorsque le système simulé atteint une taille trop importante, les calculs de transport deviennent vite trop coûteux (voire irréalisables). On résout alors l'équation de la diffusion, qui est une approximation de l'équation de Boltzmann, moins coûteuse en ressources de calcul. Bien que ceci entraîne de grosses approximations, il est important de remarquer que la bonne qualité des résultats est garantie par le fait que les sections efficaces utilisées sont issues d'homogénéisations effectuées à partir de calculs en transport sur des portions du cœur.

Ce type de calculs est généralement effectué à l'échelle du cœur complet. La grande taille du domaine spatial impose d'utiliser une description très peu précise à la fois de la géométrie (les milieux sont fortement homogénéisés) et du domaine énergétique (on utilise en général uniquement deux groupes).

Bien que la précision obtenue soit moindre que celle du calcul de transport, la quantité de ressources nécessaires diminue en revanche assez pour permettre le traitement de la variable temporelle. Ceci permet d'effectuer des calculs transitoires (par exemple : insertion ou extraction de barres de contrôle) ou d'évolution (variation des concentrations isotopiques à l'intérieur du cœur sur de longues échelles de temps).

Au travers de la présentation des différentes techniques de discrétisation utilisées par les méthodes déterministes de résolution de l'équation de Boltzmann, nous avons pu constater les difficultés numériques associées à la simulation du transport neutronique. Ces difficultés sont principalement liées à la grande taille des systèmes à résoudre, et sont pour l'instant contournées grâce à l'utilisation d'une chaîne de calculs faisant intervenir différents solveurs à différentes échelles.

L'un des enjeux actuels des recherches sur les méthodes numériques pour le transport est de diminuer la complexité de la chaîne de calculs. De meilleures méthodes numériques, plus précises ou plus économes en ressources, pourraient permettre de simuler intégralement le transport neutronique à l'échelle du cœur du réacteur, sans passer par l'approximation de la diffusion. Les travaux effectués durant cette thèse sont allés dans ce sens, au travers de l'amélioration du solveur par la méthode des caractéristiques.

Chapitre 2

Méthode des caractéristiques

Nous présentons dans ce chapitre les grandes lignes de la méthode des caractéristiques pour la résolution du problème du transport des neutrons.

Nous introduisons les équations de transmission et de bilan sur lesquelles elle est fondée, ainsi que quelques détails plus spécifiques qui seront utiles pour la compréhension du reste de ce mémoire. En particulier, nous présentons les problématiques liées à la discrétisation spatiale et à l'intégration transverse, ainsi que les différentes techniques de traçage permettant de prendre en compte les conditions aux limites complexes.

La méthode des caractéristiques (*Method of Characteristics*, MOC) est une technique numérique particulièrement adaptée à la résolution des équations aux dérivées partielles de type transport. L'utilisation de la méthode des caractéristiques pour la résolution du problème du transport des neutrons a été introduite dans le code CACTUS [Halsall, 1980] et est largement utilisé dans les codes de calculs de transport neutronique actuels comme par exemple CASMO4 [Smith et Rhodes, 2000], CRX [Hong et Cho, 1998] ou encore APOLLO2 [Sanchez *et al.*, 1988] grâce au solveur TDT qui fera l'objet des développements présentés dans ce document.

Nous commençons par décrire les équations de la méthode des caractéristiques. Dans un premier temps, nous nous intéressons plus spécifiquement à l'équation de transmission, qui permet de traiter analytiquement les variations du flux angulaire dans la direction de propagation. Nous en profitons pour introduire la discrétisation de la variable spatiale et les approximations nécessaires pour pouvoir utiliser cette équation. Dans un second temps, nous introduisons le traitement de la direction orthogonale à la propagation en décrivant la formule d'intégration transverse. Enfin, nous abordons de manière plus spécifique les problématiques liées au traçage en ce qui concerne la prise en compte des conditions aux limites.

Nous considérons dans la suite de ce mémoire des géométries à deux dimensions, et nous nous intéressons uniquement à la résolution de l'équation S_N (1.12), c'est-à-dire que nous considérons un groupe d'énergie et une direction de propagation donnés. Nous verrons dans la section 2.1 que la méthode des caractéristiques accorde une importance toute particulière à la direction de propagation $\vec{\Omega}$ considérée. Pour simplifier les équations et notations, nous nous plaçons donc à partir de maintenant dans le repère orthonormal direct $(O, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}_\perp)$ présenté sur la figure 2.1. O est une origine choisie arbitrairement et $\vec{\Omega}_\perp$ est le vecteur directement orthogonal à $\vec{\Omega}$. Dans ce repère, nous noterons respectivement t et r_\perp les deux coordonnées :

$$\vec{r} = O + t\vec{\Omega} + r_\perp\vec{\Omega}_\perp.$$

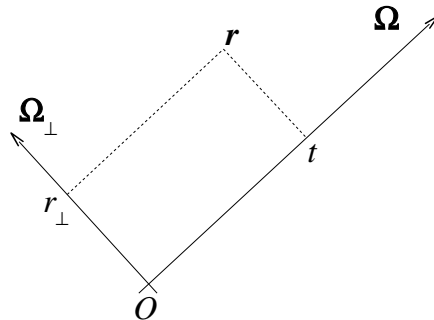


FIG. 2.1: Système de coordonnées utilisé : t est la coordonnée dans la direction $\vec{\Omega}$ de propagation du neutron ; r_\perp est la coordonnée transverse, dans la direction $\vec{\Omega}_\perp$. L'origine O est choisie arbitrairement.

2.1 Transmission et balayage

2.1.1 Équation de transmission

Cas du transport sans collision

Pour mieux appréhender le fonctionnement de la méthode des caractéristiques, commençons par considérer le problème très simple du transport stationnaire et sans collision :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) = 0, \quad \forall \vec{r} \in \mathcal{D}. \quad (2.1)$$

On peut reconnaître dans le produit scalaire $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r})$ l'expression de la dérivée de ψ dans la direction donnée par $\vec{\Omega}$. Ceci signifie que cette équation aux dérivées partielles possède une propriété remarquable : elle peut dégénérer en une équation différentielle ordinaire lorsqu'elle est réécrite le long d'une courbe tangente en tout point à la direction donnée par $\vec{\Omega}$. Une telle courbe est appelée caractéristique. Ici, $\vec{\Omega}$ étant constant, les courbes caractéristiques sont simplement les droites de direction $\vec{\Omega}$.

En notant $u_{\vec{r}_0}(t) = \psi(\vec{r}_0 + t\vec{\Omega})$, nous obtenons donc une équation différentielle ordinaire :

$$\frac{du_{\vec{r}_0}}{dt}(t) = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}_0 + t\vec{\Omega}) = 0,$$

d'où on tire :

$$u_{\vec{r}_0}(t) = u_{\vec{r}_0}(0), \quad \forall \vec{r}_0, \forall t,$$

c'est-à-dire :

$$\psi(\vec{r}_0 + t\vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}_0), \quad \forall \vec{r}_0, \forall t \text{ tels que } \vec{r}_0 + t\vec{\Omega} \in \mathcal{D}.$$

Nous voyons ici que pour l'équation du transport sans collision (2.1), la simple connaissance d'une condition aux limites sur $\partial\mathcal{D}$ suffit à déterminer de manière analytique la solution en tout point de l'espace.

Prise en compte de l'absorption et des sources dans une région homogène

Considérons une région dans laquelle la section efficace Σ et le terme source Q sont constants. L'ajout au second membre de termes d'absorption et de sources ne fait que complexifier un peu le résultat, sans en changer la nature :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) = -\Sigma \psi(\vec{r}) + Q, \quad \forall \vec{r} \in \mathcal{D}. \quad (2.2)$$

Donc pour tout \vec{r}_0 , $u_{\vec{r}_0}$ vérifie l'équation différentielle ordinaire :

$$\frac{du_{\vec{r}_0}}{dt}(t) = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}_0 + t\vec{\Omega}) = -\Sigma u_{\vec{r}_0}(t) + Q,$$

qu'on peut très facilement intégrer analytiquement pour obtenir :

$$u_{\vec{r}_0}(t) = u_{\vec{r}_0}(0) e^{-\Sigma t} + \frac{1 - e^{-\Sigma t}}{\Sigma} Q, \quad \forall \vec{r}_0, \forall t,$$

c'est-à-dire :

$$\psi(\vec{r}_0 + t\vec{\Omega}) = \psi(\vec{r}_0) e^{-\Sigma t} + \frac{1 - e^{-\Sigma t}}{\Sigma} Q, \quad \forall \vec{r}_0, \forall t \text{ tels que } \vec{r}_0 + t\vec{\Omega} \in \mathcal{D}. \quad (2.3)$$

Dans le cas particulier où \vec{r}_0 est le point d'entrée de la caractéristique dans la région, et $\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + t\vec{\Omega}$ est le point de sortie, on obtient l'équation suivante, appelée équation de transmission :

$$\psi^+(\mathcal{T}) = e^{-\Sigma l(\mathcal{T})} \psi^-(\mathcal{T}) + \frac{1 - e^{-\Sigma l(\mathcal{T})}}{\Sigma} Q, \quad (2.4)$$

avec les notations explicitées sur la figure 2.2 : $\psi^\mp(\mathcal{T})$ sont les flux angulaires entrant (-) et sortant (+) de la région le long de la trajectoire \mathcal{T} , et $l(\mathcal{T})$ est la longueur d'intersection entre l'intérieur de la région et la trajectoire.

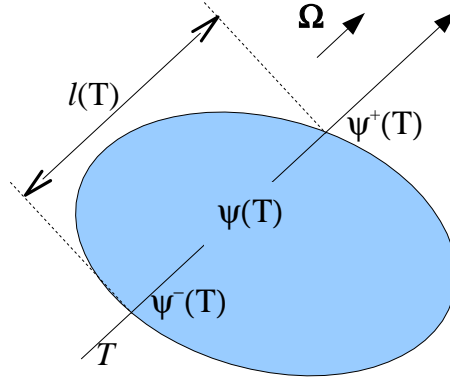


FIG. 2.2: Transmission du flux angulaire le long d'une ligne caractéristique traversant une région homogène. La grandeur géométrique importante est la longueur de corde $l(\mathcal{T})$, qui permet d'obtenir le coefficient de transmission reliant le flux entrant $\psi^-(\mathcal{T})$ au flux sortant $\psi^+(\mathcal{T})$.

2.1.2 Équation de bilan

Bien que le flux en un point soit intéressant, la valeur que nous cherchons à calculer est souvent un flux intégré et moyenné spatialement sur une région homogène. En utilisant l'équation (2.3), nous pouvons commencer par calculer un flux moyenné entre deux points sur la même ligne caractéristique à l'intérieur d'une région homogène :

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{\vec{r}_0, \vec{r}_1} &= \frac{1}{t_1} \int_0^{t_1} dt \psi(\vec{r}_0 + t\vec{\Omega}) \\ &= \frac{\psi(\vec{r}_0) - \psi(\vec{r}_1)}{\Sigma t_1} + \frac{Q}{\Sigma}, \end{aligned}$$

où $t_1 = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|$ est la distance entre les deux points.

Là encore, cette équation peut être réécrite sous une forme plus utile dans le cas où \vec{r}_0 et \vec{r}_1 représentent respectivement les points d'entrée et de sortie de la caractéristique dans la région :

$$\bar{\psi}(\mathcal{T}) = \frac{\psi^-(\mathcal{T}) - \psi^+(\mathcal{T})}{\Sigma l(\mathcal{T})} + \frac{Q}{\Sigma}, \quad (2.5)$$

avec les notations de l'équation (2.4).

Cette équation, appelée équation de bilan, permet d'obtenir des valeurs de flux moyennées le long d'une trajectoire, tout en garantissant de manière exacte la conservation du nombre total de neutrons dans le système.

2.1.3 Discrétisation en régions homogènes

La méthode des caractéristiques repose sur une discrétisation spatiale selon laquelle le domaine géométrique \mathcal{D} est un maillage (non structuré) de régions \mathcal{R}_i :

$$\mathcal{D} = \bigsqcup_i \mathcal{R}_i.$$

Comme les équations de transmission (2.4) et de bilan (2.5) ne permettent de calculer le flux neutronique qu'à l'intérieur d'une région homogène, leur utilisation nécessite de faire les approximations suivantes :

$$\begin{cases} \Sigma(\vec{r}) = \Sigma_i, \\ Q(\vec{r}) = Q_i, \end{cases} \quad \forall \vec{r} \in \mathcal{R}_i, \forall i, \quad (2.6)$$

selon lesquelles les sections efficaces et termes sources sont constants par région. Remarquons que cette représentation du terme source Q est cohérente avec la représentation du flux comme une fonction constante par région résultant de l'équation de bilan (2.5).

2.1.4 Balayage

Chaque ligne caractéristique interceptant le domaine géométrique peut être vue comme une suite de segments, définis par les intersections de cette ligne avec les régions du système. Ceci fournit naturellement un ensemble discret de points (les intersections de la ligne caractéristique avec les frontières des régions) entre lesquels l'approximation de régions homogènes (2.6) nous permet d'appliquer les équations de transmission (2.4) et de bilan (2.5).

L'application successive de ces équations sur les différents segments d'une trajectoire caractéristique permet, en partant des conditions aux limites données sur la première région, de calculer le flux angulaire moyen sur chaque segment le long de cette droite. Cette opération est appelée "balayage" d'une caractéristique.

Le balayage est le cœur du solveur par la méthode des caractéristiques. Il est intéressant de remarquer que le balayage d'une trajectoire ne nécessite de connaître que très peu d'informations sur la géométrie : seule la longueur des segments est intéressante ; les données précises sur la position de la trajectoire à l'intérieur du système sont complètement inutiles.

En revanche, le balayage est assez coûteux en temps de calcul, en particulier à cause des termes exponentiels qui interviennent dans l'équation de transmission (2.4). C'est pourquoi on utilise souvent une tabulation de la fonction exponentielle, qui permet d'interpoler très rapidement les valeurs nécessaires durant le balayage.

2.2 Intégration transverse et traçage

2.2.1 Formule d'intégration transverse

Les équations précédentes nous permettent d'obtenir les variations du flux angulaire le long d'une ligne caractéristique, que ce soit par des valeurs ponctuelles au niveau des frontières des régions (équation de transmission (2.4)), ou par des valeurs moyennes sur

les segments (équation de bilan (2.5)). Cependant, la grandeur qui nous intéresse est le flux angulaire moyen à l'intérieur des régions.

Il nous faut donc prendre en compte la variable transverse r_\perp . Écrivons par exemple l'expression du flux angulaire moyen sur une région \mathcal{R}_i :

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_i &= \frac{1}{V_i} \int_{r_\perp} dr_\perp \int_t dt \psi(r_\perp \vec{\Omega}_\perp + t \vec{\Omega}) \\ &= \frac{1}{V_i} \int_{r_\perp} dr_\perp l_i(\mathcal{T}_{r_\perp}) \bar{\psi}_i(\mathcal{T}_{r_\perp}),\end{aligned}$$

avec les notations des figures 2.1 et 2.3 : \mathcal{T}_{r_\perp} est la droite caractéristique associée à la coordonnée transverse r_\perp ; V_i est le volume de la région \mathcal{R}_i ; $l_i(\mathcal{T}_{r_\perp})$ et $\bar{\psi}_i(\mathcal{T}_{r_\perp})$ sont respectivement la longueur de corde et le flux moyen associés à la trajectoire \mathcal{T}_{r_\perp} . Nous voyons que l'intégration dans la direction de propagation est déjà prise en compte par l'équation de bilan. Il ne reste donc plus qu'à effectuer une intégration dans la direction transverse.

L'approximation de cette intégrale se fait à l'aide d'une formule de quadrature obtenue en considérant un ensemble de trajectoires parallèles recouvrant la région considérée. Si nous imaginons que chaque ligne \mathcal{T}_k est associée à un "tuyau" qui l'entoure et la sépare des lignes voisines (figure 2.3), nous pouvons associer la section Δ_k de ce tuyau comme poids de \mathcal{T}_k dans la formule de quadrature :

$$\int_{r_\perp} dr_\perp l_i(\mathcal{T}_{r_\perp}) \bar{\psi}_i(\mathcal{T}_{r_\perp}) = \sum_k \Delta_k l_k^i \bar{\psi}_k^i, \quad (2.7)$$

ce qui conduit à l'approximation suivante du flux moyen dans la région :

$$\bar{\psi}_i = \frac{\sum_k \Delta_k l_k^i \bar{\psi}_k^i}{\sum_k \Delta_k l_k^i}. \quad (2.8)$$

Dans ces deux équations, $\bar{\psi}_k^i = \bar{\psi}(\mathcal{T}_k)$ est le flux moyen dans la région \mathcal{R}_i le long de la trajectoire \mathcal{T}_k , et $l_k^i = l_i(\mathcal{T}_k)$ est la longueur d'intersection de cette trajectoire avec la région.

La précision de ce type d'intégration sera discutée de manière beaucoup plus détaillée dans le chapitre 3, mais nous pouvons dès maintenant remarquer que, dans le cas où le traçage est effectué à pas constant, cette formule de quadrature n'est rien d'autre qu'une intégration par la formule des rectangles.

2.2.2 Maillage transverse et traçage

Les frontières des régions définissent naturellement une discrétisation des lignes caractéristiques, ce qui permet d'appliquer facilement les équations de balayage. En revanche, le découpage du domaine géométrique en régions n'induit aucune discrétisation naturelle et utilisable¹ en ce qui concerne la coordonnée transverse r_\perp . Pour traiter cette coordonnée, on doit donc définir, pour chaque angle $\vec{\Omega}$ de la formule de quadrature, un maillage $\{I_k, k \in \llbracket 1, K \rrbracket\}$ dans la direction transverse (figure 2.3). Ce maillage permet d'introduire la formule de quadrature qui sera utilisée pour l'équation d'intégration transverse (2.7).

Pour fournir au balayage l'ensemble des informations géométriques dont il a besoin, on trace l'ensemble des trajectoires \mathcal{T}_k de direction $\vec{\Omega}$ et passant par le centre² des mailles transverses I_k (figure 2.4). L'ensemble des trajectoires ainsi obtenues est appelé "traçage".

¹Nous reviendrons sur ce point de manière beaucoup plus détaillée dans le chapitre 3.

²L'immense majorité des implémentations de la méthode des caractéristiques font passer les droites caractéristiques au milieu des mailles transverses. D'autres solutions ont cependant été envisagées, dans lesquelles l'origine de chaque droite caractéristique est choisie de manière optimale dans la maille [Yamamoto, 2008].

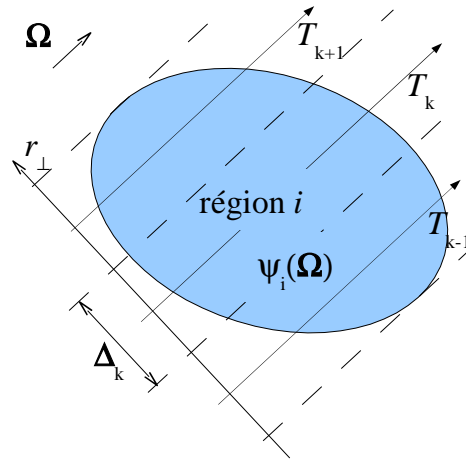


FIG. 2.3: Formule de quadrature pour l'intégration transverse : les trajectoires \mathcal{T}_k sont les points d'évaluation, placés au centre de chaque maille transverse ; les bornes du maillage transverse définissent les frontières de bandes ou "tuyaux" entourant les trajectoires et dont la largeur constitue le poids associé à une trajectoire dans la formule de quadrature.

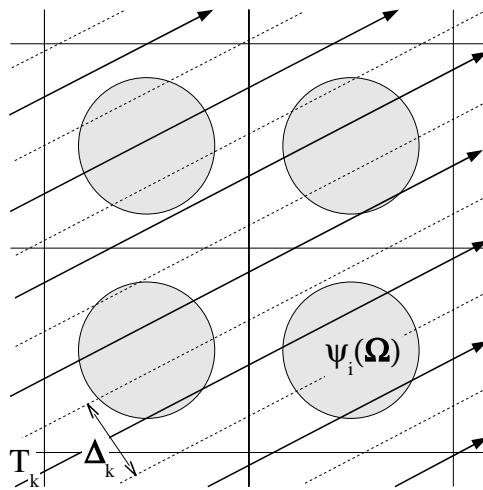


FIG. 2.4: Traçage des trajectoires sur un domaine : on définit un maillage transverse à pas constant ; une trajectoire est tracée au centre de chaque maille.

Il est important de noter la très forte dépendance entre le traçage et le traitement de la géométrie dans la méthode des caractéristiques :

1. Le traçage ne contient que des données géométriques : angle de propagation, liste des régions traversées et longueurs d'intersections correspondantes. Ceci permet de ne le calculer qu'une seule fois au début du calcul MOC.
2. Le traçage contient toutes les informations géométriques nécessaires au solveur : une fois le traçage effectué, le solveur MOC ne connaît plus les détails de la géométrie (forme des régions, relations de voisinage, etc.), ni même les conditions aux limites (cf. section 2.3). Comme nous l'avons déjà remarqué au sujet de la formule de quadrature angulaire (section 1.2.4), la détermination du traçage conditionne donc non seulement la précision des intégrations en espace, mais aussi la bonne prise en compte des conditions aux limites.

2.3 Traitement des conditions aux limites

2.3.1 Conditions aux limites ouvertes : trajectoires simples

Lorsque les conditions aux limites sont ouvertes (équation 1.2), c'est-à-dire lorsqu'on considère que l'extérieur du domaine géométrique (convexe) est vide, tous les neutrons sortant du domaine géométrique sont perdus pour le système : ils ne pourront jamais y entrer à nouveau.

Ceci est modélisé par l'arrêt des trajectoires caractéristiques aux frontières du domaine. Après le balayage de la dernière région traversée par une trajectoire, on commence à balayer la trajectoire suivante. Les flux angulaires sortants sont utilisés pour calculer des courants neutroniques sur la frontière, mais ne resservent plus pour le balayage. Ceci conduit à la forme la plus simple du balayage, présentée sur l'algorithme 1.

Algorithme 1 Balayage simple

pour chaque trajectoire tracée **faire**
 initialiser le flux angulaire à partir des conditions aux limites ;
 mettre à jour la direction de la trajectoire courante ;
 pour chaque région interceptée par la trajectoire **faire**
 mettre à jour le flux angulaire en utilisant l'équation de transmission (2.4) ;
 calculer le flux moyen le long du segment à l'aide de l'équation de bilan (2.5) ;
 mettre à jour le flux moyen dans la région à l'aide de la formule d'intégration (2.7) ;
 fin pour
 cumuler la contribution du flux angulaire sortant au courant ;
fin pour

2.3.2 Conditions aux limites fermées : trajectoires composées

En revanche, dans le cas de conditions aux limites fermées (eq. 1.3, 1.4 et 1.5) modélisant un domaine symétrique ou répétitif, le flux angulaire sortant du domaine est réutilisé pour calculer le flux angulaire entrant.

La prise en compte de ce type de conditions aux limites peut se faire de plusieurs manières [Sanchez *et al.*, 2002]. La technique qui sera utilisée dans la suite de ce document permet de prendre en compte de manière exacte les conditions aux limites, directement à l'intérieur du traçage.

Lorsqu'une caractéristique atteint une condition aux limites fermée, le flux angulaire sortant est directement connecté avec le flux angulaire entrant correspondant. Ceci est réalisé en

prolongeant la caractéristique grâce au mouvement géométrique correspondant à la condition aux limites considérée. Par exemple, la réflexion spéculaire (1.4) est modélisée en faisant “rebondir” la trajectoire par réflexion sur les bords du domaine géométrique (figure 2.5).

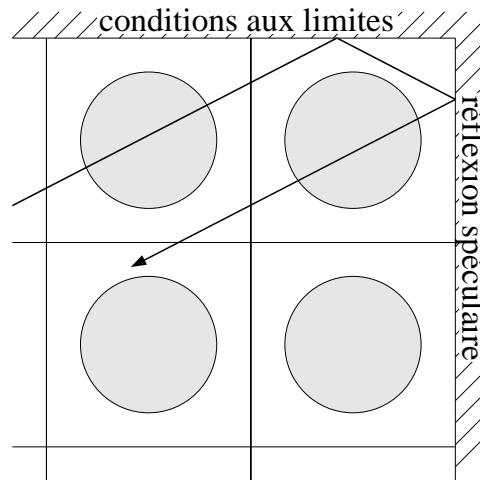


FIG. 2.5: Prise en compte des conditions aux limites dans le traçage : la trajectoire “rebondit” sur les bords correspondant à des conditions aux limites de réflexion spéculaire. Les tronçons correspondent aux parties rectilignes de la trajectoire, entre deux conditions aux limites.

Ainsi, pour le traçage, le bord du domaine ne marque plus l’arrêt de la caractéristique, mais simplement un changement de direction et de position du flux angulaire. La structure des trajectoires se complexifie donc, chaque trajectoire étant maintenant composée de plusieurs “tronçons” de directions différentes. La phase de traçage est aussi compliquée par la nécessité d’éviter de tracer plusieurs fois la même trajectoire caractéristique : deux directions couplées par des conditions aux limites ne peuvent maintenant plus être tracées indépendamment l’une de l’autre.

Pour le balayage, la seule différence notable est le changement de direction, qui conduit à la structure présentée dans l’algorithme 2. Au niveau spatial, étant donné que l’intégralité des données géométriques sont stockées dans le traçage, tout se fait de manière transparente : le flux angulaire sortant de la dernière région est directement réinjecté dans la bonne région en continuant à balayer le tronçon suivant de la trajectoire courante.

2.3.3 Domaines fermés : trajectoires cycliques

La technique de traçage décrite précédemment permet de traiter le cas des domaines ouverts, c’est-à-dire contenant au moins une condition aux limites ouverte. En revanche, le cas de domaines entièrement entourés de conditions aux limites fermées est plus problématique : les domaines fermés modélisent des réseaux infinis de motifs identiques. Dans ces conditions les trajectoires sont de longueur infinie et il est nécessaire de disposer d’une stratégie permettant de les tracer. Autrement dit : si le bord du domaine ne contient aucune condition aux limites ouverte permettant de débiter ou terminer le traçage, jusqu’où va-t-on continuer à calculer la trajectoire ?

Du point de vue du balayage, un autre problème posé par les domaines fermés est le calcul des flux angulaires entrants. En effet, le long d’une frontière ouverte, le flux angulaire entrant est directement donné par les conditions aux limites de type Dirichlet. En revanche,

Algorithme 2 Balayage par tronçons

pour chaque trajectoire tracée **faire**
 initialiser le flux angulaire à partir des conditions aux limites ;
 pour chaque tronçon de la trajectoire **faire**
 mettre à jour la direction courante ;
 pour chaque région interceptée par le tronçon **faire**
 mettre à jour le flux angulaire en utilisant l'équation de transmission (2.4) ;
 calculer le flux moyen le long du segment à l'aide de l'équation de bilan (2.5) ;
 mettre à jour le flux moyen dans la région à l'aide de la formule d'intégration (2.7) ;
 fin pour
 fin pour
 cumuler la contribution du flux angulaire sortant au courant ;
fin pour

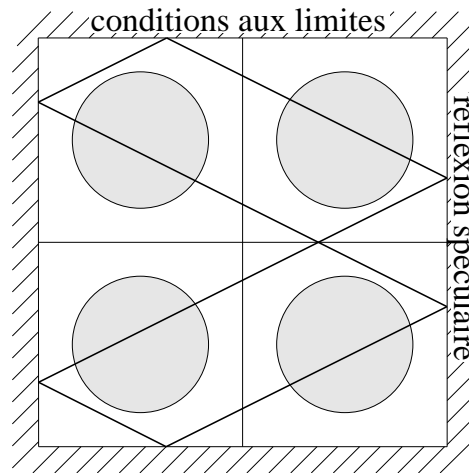


FIG. 2.6: Trajectoire cyclique dans un domaine entièrement fermé : grâce à un choix judicieux des directions de la formule de quadrature angulaire, cette trajectoire composée revient à son point de départ après une période finie.

le flux angulaire entrant le long d'une frontière fermée est obtenu par application des conditions aux limites à un flux angulaire sortant. Il y a donc un couplage fort entre les flux angulaires entrants et sortants le long de toutes les frontières du domaine.

Ce problème a lui aussi fait l'objet de nombreuses études et peut être résolu de plusieurs manières. La technique privilégiée dans APOLLO2 consiste à traiter de manière exacte les conditions aux limites dans les domaines fermés en considérant des trajectoires cycliques. Il est en effet possible de montrer [Sanchez *et al.*, 2002] qu'il existe un ensemble de directions, dense dans $[0; 2\pi]$, générant des trajectoires aux propriétés particulières : ces trajectoires repassent périodiquement, après un certain nombre de conditions aux limites, par leur point de départ (figure 2.6).

Il est donc possible de tracer de telles trajectoires cycliques en n'en considérant qu'une période. Le balayage d'une telle trajectoire permet d'obtenir une relation entre le flux entrant

initial ψ_0^- et le flux sortant final ψ_0^+ :

$$\psi_0^+ = \underbrace{\psi_0^-}_{\alpha} e^{-\tau(0,l)} + \underbrace{\int_0^l dt Q(t) e^{-\tau(t,l)}}_{\beta},$$

dans laquelle t est l'abscisse le long de la trajectoire, comptée à partir de la frontière entrante ; l est la longueur de la période (donc $t = 0$ et $t = l$ correspondent tous deux au point de départ du traçage) ; $\tau(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} dt \Sigma(t)$ est la distance optique entre les points d'abscisses t_1 et t_2 .

L'égalité de ψ_0^- et ψ_0^+ , par périodicité de la trajectoire, permet d'établir une équation algébrique donnant la valeur du flux entrant initial :

$$\psi_0 = \frac{\beta}{1 - \alpha} = \frac{\int_0^l dt Q(t) e^{-\tau(t,l)}}{1 - e^{-\tau(0,l)}} \quad (2.9)$$

Ceci conduit à un balayage plus complexe que les précédents, présenté sur l'algorithme 3. Deux balayages successifs sont nécessaires pour calculer les valeurs des termes α et β , puis mettre à jour les flux angulaires par région après avoir déterminé la valeur du flux entrant initial ψ_0 .

Algorithme 3 Balayage cyclique

pour chaque trajectoire tracée **faire**

initialiser $\alpha = 1$. et $\beta = 0$. ;

pour chaque tronçon de la trajectoire **faire**

mettre à jour la direction courante ;

pour chaque région i interceptée par le tronçon **faire**

cumuler la contribution de la région à α : $\alpha = \alpha * e^{-\Sigma_i l_i}$;

cumuler la contribution de la région à β : $\beta = \beta * e^{-\Sigma_i l_i} + (1 - e^{-\Sigma_i l_i}) * Q_i$;

fin pour

fin pour

initialiser le flux angulaire à l'aide de l'équation (2.9) ;

pour chaque tronçon de la trajectoire **faire**

mettre à jour la direction courante ;

pour chaque région interceptée par le tronçon **faire**

mettre à jour le flux angulaire en utilisant l'équation de transmission (2.4) ;

calculer le flux moyen le long du segment à l'aide de l'équation de bilan (2.5) ;

mettre à jour le flux moyen dans la région à l'aide de la formule d'intégration (2.7) ;

fin pour

fin pour

fin pour

La description des principes de la méthode des caractéristiques nous a permis de mieux appréhender le fonctionnement interne du solveur de flux. Nous pouvons distinguer deux phases principales dans la résolution du problème du transport neutronique par la méthode des caractéristiques :

- 1. Le traçage. Il s'agit de tracer des trajectoires neutroniques traversant le domaine à traiter. L'intégralité du traitement de la géométrie et des conditions aux limites est effectué durant cette phase. C'est aussi elle qui détermine le degré de discrétisation dans la direction transverse. Effectuée seulement une fois au début du calcul, elle requiert relativement peu de ressources de traitement. En revanche, les données calculées et stockées durant le traçage peuvent devenir très volumineuses ; la réduction de la taille de ces données est donc un enjeu important.*
- 2. Le balayage. Il s'agit de la phase de calculs intensifs durant laquelle le flux angulaire est évalué, à l'aide des équations de transmission et de bilan. Toutes les informations géométriques nécessaires au bon déroulement du balayage ont déjà été précalculées et stockées durant la phase de traçage ; les seules données directement accessibles au balayage sont celles concernant les matériaux (sections efficaces, etc.). Le balayage est réalisé à chaque itération ; son optimisation est donc primordiale pour la bonne efficacité du solveur.*

Nous avons détaillé ici de manière plus approfondie les problématiques liées au traçage, qui ont fait plus spécifiquement l'objet des travaux présentés dans ce mémoire. L'amélioration de la précision de l'intégration transverse fera l'objet des chapitres 3 et 4. Un deuxième axe de travail est présenté dans les chapitres 5 et 6 : il s'agit d'optimiser la taille de stockage nécessaire pour les informations de traçage, dans le cas où le domaine géométrique étudié est composé en partie d'un réseau de cellules identiques.

Deuxième partie

Améliorations de la méthode d'intégration transverse

Chapitre 3

Intégration transverse dans la méthode des caractéristiques

Le premier axe de travail que nous abordons dans ce mémoire est relatif à la précision de la formule d'intégration transverse dans la méthode des caractéristiques.

Nous détaillons ici l'impact du traçage sur la précision de l'intégration transverse, et les limites des méthodes d'intégration traditionnelles, en particulier en ce qui concerne les discontinuités matérielles. Nous proposons ensuite une nouvelle méthode de traçage permettant d'accroître la précision de l'intégration transverse, sur la base d'une projection locale des discontinuités.

L'impact du choix du traçage sur la précision des résultats donnés par la méthode des caractéristiques a fait l'objet de nombreux travaux. Cependant, la plupart de ces études se sont concentrées sur les approximations induites par le choix de la formule de quadrature S_N . En revanche, la littérature reste relativement peu fournie en ce qui concerne la discrétisation dans la direction transverse à la propagation. Ainsi, le pas de traçage reste souvent un paramètre entièrement déterminé par l'utilisateur, qui doit l'ajuster au mieux pour accroître la qualité du calcul.

Dans ce chapitre, nous présenterons une nouvelle méthode de traçage, permettant d'ajuster automatiquement et localement le pas de traçage en fonction de la géométrie locale. Ceci permet à la fois d'améliorer la précision du calcul, et d'épargner à l'utilisateur un ajustement manuel du pas de traçage en fonction du type de géométrie étudié.

Lors de la construction du traçage, outre le traitement des conditions aux limites, l'un des principaux enjeux est la qualité des méthodes d'intégration transverses qui résultera de ce traçage. Nous avons présenté dans la section 2.2 la méthode traditionnelle d'intégration transverse ; nous essaierons ici d'en montrer les limites, principalement en ce qui concerne la prise en compte des discontinuités matérielles. Nous présentons ensuite une méthode, dite des "macrobandes", que nous avons développée pour améliorer la précision des formules de quadrature transverses. L'implémentation de cette méthode dans le solveur TDT ainsi que les résultats numériques obtenus seront discutés dans le chapitre 4.

3.1 Limites de la formule classique d'intégration transverse

Comme nous l'avons vu dans la section 2.2, la formule d'intégration transverse est basée sur un maillage dans la direction donnée par $\vec{\Omega}_\perp$. Lorsque nous avons introduit la formule de quadrature (2.7), nous n'avons considéré qu'une seule région, et avons donc en conséquence introduit un maillage transverse adapté à cette région. On voit en effet dans la figure 2.3 que les bornes du maillage transverse (c'est à dire les frontières des bandes entourant les trajectoires caractéristiques) coïncident avec les frontières de la région.

Cependant, le domaine géométrique est généralement composé de nombreuses régions, ce qui rend difficile la construction d'un maillage adapté à toutes les régions (cf. section 3.1.4). Par manque d'une méthode permettant de générer un maillage transverse performant, l'approche généralement utilisée consiste à définir un maillage à pas constant. Ce pas de traçage, qui est un paramètre déterminé par l'utilisateur, permet d'ajuster le niveau de précision des intégrations transverses, au prix d'un accroissement des ressources requises par le calcul.

Nous étudions dans cette section les approximations induites par le choix d'un tel maillage à pas constant.

3.1.1 Discontinuités matérielles

La première source d'approximation introduite par la formule de quadrature transverse est la non-coïncidence des bornes du maillage avec les frontières des régions. Dans l'équation (2.8), les trajectoires caractéristiques prises en compte lors de l'intégration dans une région \mathcal{R}_i sont celles qui traversent cette région :

$$\bar{\psi}_i = \frac{\sum_{k; \mathcal{I}_k \cap \mathcal{R}_i \neq \emptyset} \Delta_k l_k^i \bar{\psi}_k^i}{\sum_{k; \mathcal{I}_k \cap \mathcal{R}_i \neq \emptyset} \Delta_k l_k^i}.$$

Cependant, lors du traçage dans un domaine complet, les frontières des bandes ne peuvent pas coïncider avec toutes les frontières des régions. Dans ce cas, une bande traversant une

région peut ne pas la recouvrir entièrement (donc son poids Δ_k devrait être diminué en conséquence). Dans les cas extrêmes, une bande peut même recouvrir partiellement une région qui n'est pas traversée par la trajectoire centrale (figure 3.1).

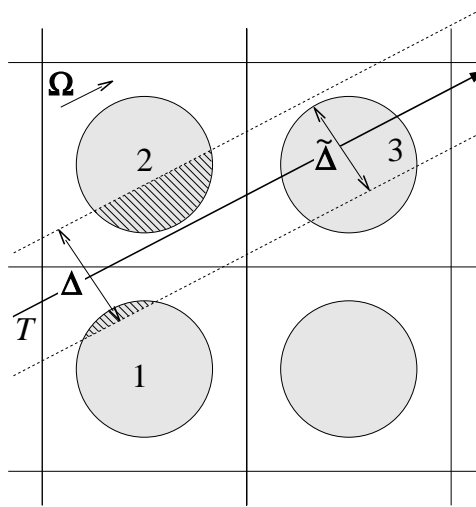


FIG. 3.1: Exemple de problèmes de discontinuités matérielles :

- La trajectoire \mathcal{T} ne traverse pas les régions 1 et 2 et ne contribue donc pas au flux angulaire moyen dans ces régions. Pourtant, des parties non négligeables de ces régions (symbolisées par les aires hachurées), sont recouvertes par le "tuyau" associé à \mathcal{T} .
- La trajectoire \mathcal{T} traverse la région 3 et va donc contribuer avec un poids Δ dans la formule de quadrature utilisée pour calculer le flux angulaire moyen dans cette région. Cependant, le "tuyau" associé à \mathcal{T} ne recouvre la région 3 que sur une largeur $\tilde{\Delta} < \Delta$.

La mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles dans la méthode d'intégration transverse classique conduit à plusieurs problèmes. D'une part, la précision de la formule de quadrature est réduite par le fait que les bornes d'intégration sont inexactes. D'autre part, la convergence de l'intégration se fait de manière non monotone quand le pas de traçage tend vers 0. En effet, lorsque le pas de traçage évolue, les bornes du maillage transverse peuvent basculer d'un côté à l'autre des discontinuités matérielles, provoquant ainsi de manière aléatoire une sur-évaluation du flux angulaire dans certaines régions et une sous-évaluation dans d'autres.

3.1.2 Représentation transverse constante par morceaux

Même dans le cas où les bornes du maillage transverse correspondent aux frontières projetées des régions, la formule de quadrature en rectangles conduit à une précision assez médiocre de l'intégration. D'une part, le flux angulaire moyen par segment est supposé constant par morceaux selon la direction transverse. De plus, l'évaluation de ce flux est faite uniquement sur la base de la transmission du flux le long des trajectoires au centre des mailles transverses.

Ceci signifie que seule la longueur d'intersection entre la trajectoire centrale et la région est calculée, et que cette longueur est supposée être représentative de la transmission sur toute l'étendue de la maille transverse. Une telle méthode conduit à deux types d'erreurs numériques :

- (a) l'intégration du volume d'une région est entachée d'erreur dès lors qu'au moins un des éléments formant sa frontière n'est pas rectiligne. Pour des éléments rectilignes, la longueur d'intersection entre la trajectoire et la région est une fonction impaire de la variable transverse, donc les erreurs d'intégration à gauche et à droite du centre de la maille se compensent ;
- (b) à cause de la forme exponentielle de l'intégrande, il n'existe pas de telle compensation pour le flux angulaire. La formule d'intégration du flux reste donc toujours approximative, sauf dans le cas très particulier où la longueur des cordes serait constante dans la direction transverse.

Les erreurs sur le volume numérique sont en général compensées par une renormalisation des cordes [Sanchez *et al.*, 2002] : on définit pour chaque région \mathcal{R}_i un facteur de correction du volume

$$\rho_i = \frac{V_i}{\sum_k \Delta_k l_k^i},$$

dans lequel V_i est le volume analytique de la région. Par la suite, dans toutes les équations de la méthode des caractéristiques, les cordes l_k^i sont renormalisées par ce facteur et remplacées par $\tilde{l}_k^i = l_k^i \rho_i$.

Il n'en reste pas moins que l'intégration numérique du flux angulaire est entachée d'erreur. Par cohérence avec l'approximation de flux constant par morceaux selon la direction transverse, l'équation de transmission (2.4) devrait être moyennée sur la bande définie par une maille transverse :

$$\bar{\psi}_{i,k}^+ = \frac{\int_{r_\perp \in I_k} dr_\perp \left(e^{-\Sigma_i l(\mathcal{T}_{r_\perp})} \psi_{i,k}^- + \frac{1 - e^{-\Sigma_i l(\mathcal{T}_{r_\perp})}}{\Sigma} Q \right)}{\int_{r_\perp \in I_k} dr_\perp},$$

$$\bar{\psi}_{i,k}^+ = T_{i,k} \psi_{i,k}^- + \frac{1 - T_{i,k}}{\Sigma} Q, \quad (3.1)$$

où $\{I_k, k \in \llbracket 1, K \rrbracket\}$ est le maillage transverse introduit dans la section 2.2.2, $\bar{\psi}_{i,k}^\mp$ sont les flux angulaires moyens dans la maille I_k sur les frontières entrante ($-$) et sortante ($+$) de la région \mathcal{R}_i . $T_{i,k}$ est le coefficient de transmission moyen à travers \mathcal{R}_i dans la maille I_k :

$$T_{i,k} = \frac{\int_{r_\perp \in I_k} dr_\perp e^{-\Sigma_i l(\mathcal{T}_{r_\perp})}}{\int_{r_\perp \in I_k} dr_\perp}, \quad (3.2)$$

L'utilisation de l'équation de transmission classique (2.4) dans la plupart des implémentations de la méthode des caractéristiques revient à faire l'approximation

$$T_{i,k} \sim e^{-\Sigma_i l(\mathcal{T}_k)}. \quad (3.3)$$

3.1.3 Conséquences sur le pas de traçage

Il est clair que la formule d'intégration transverse par les rectangles converge lorsque le maillage se raffine. Par ailleurs, les effets de la non-prise en compte des discontinuités

matérielles sont directement proportionnels à la distance entre les frontières d'une cellule et la borne la plus proche dans le maillage transverse. Ces effets sont donc eux aussi contrôlés par la taille des mailles transverses.

En conséquence, la méthode des caractéristiques traditionnelle impose d'utiliser des pas de traçage relativement petits pour obtenir des résultats précis et une convergence uniforme et monotone vers ces résultats.

L'objectif principal du travail présenté ici est de proposer une technique permettant d'éliminer les approximations de l'intégration transverse, et de relâcher ainsi le maillage transverse. Ceci permettrait d'économiser des ressources de calcul sans perdre en précision sur le résultat.

3.1.4 Solutions trouvées dans la littérature

Bien qu'il s'agisse d'un problème relativement peu étudié (en comparaison par exemple avec les travaux effectués sur la discrétisation angulaire), quelques solutions y ont déjà été proposées dans la littérature.

Projection globale des discontinuités

Malgré l'approximation 3.3, une méthode d'intégration d'ordre plus élevé que les rectangles pourrait permettre d'obtenir une meilleure précision dans l'intégration, à condition que les discontinuités matérielles soient prises en compte. Cette stratégie constitue l'une des approches traditionnellement employées [Sanchez *et al.*, 2002].

On peut ainsi commencer par projeter toutes les discontinuités matérielles sur le plan transverse à la direction de propagation. Ceci permet d'obtenir un maillage transverse qui vérifie nécessairement par construction la bonne prise en compte des discontinuités matérielles. Ce maillage peut ensuite être raffiné à l'aide d'une formule de quadrature de Gauss-Legendre à l'intérieur de chaque maille.

Cette méthode présente cependant un certain nombre de limites. Pour un système complexe tel que ceux habituellement étudiés par l'industrie nucléaire, le nombre de régions est généralement très important. La projection globale de toutes les discontinuités matérielles conduit alors à un maillage beaucoup plus fin que celui qui serait obtenu par les méthodes traditionnelles utilisant un pas constant, comme nous le montre l'exemple de la figure 3.2.

De plus, grâce à la finesse du maillage ainsi obtenu, la plupart des régions sont déjà couvertes par un grand nombre de mailles. Dans ces conditions l'utilisation d'une formule de quadrature de Gauss-Legendre apporte un surcroît de précision inutile au regard des contraintes industrielles. Le surcoût important en termes de ressources de calcul n'est pas contrebalancé par le gain en précision.

En revanche, au niveau de l'implémentation, cette technique présente l'avantage de ne nécessiter que peu de modifications par rapport aux méthodes traditionnelles. La phase de traçage doit simplement être précédée d'une projection des discontinuités pour déterminer le maillage transverse. Les trajectoires gardent la même structure et sont tracées de la même manière que dans la méthode usuelle. De plus, aucune modification au niveau du balayage n'est requise.

Projection locale des discontinuités

Pour éviter la projection globale des discontinuités, coûteuse et conduisant à une trop grande finesse des mailles générées, une autre approche consiste à effectuer la projection des discontinuités uniquement à une échelle locale.

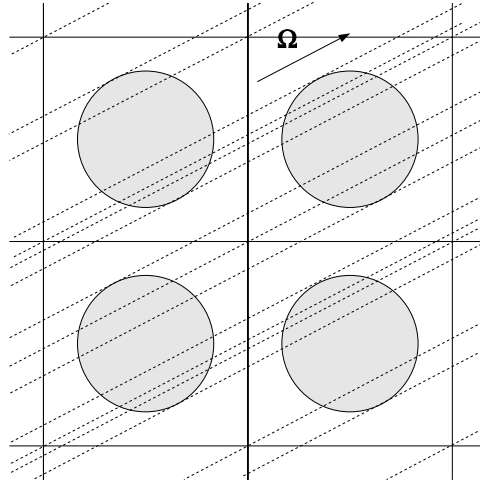


FIG. 3.2: Projection globale des discontinuités : même sur une géométrie aussi simple que celle-ci, la projection globale de toutes les discontinuités matérielles conduit à un nombre important de mailles transverses.

Ainsi, pour des domaines géométriques complexes (*clusters* multi-assemblages ou petits cœurs de réacteur), Yamamoto *et al.* [2005] proposent de n'effectuer la projection des discontinuités qu'à l'échelle de la cellule (crayon de combustible). Le faible nombre de régions contenues dans la cellule permet d'obtenir des mailles transverses relativement larges, qu'il est possible de raffiner efficacement en utilisant une formule de quadrature de Gauss-Legendre.

Dans une telle approche, chaque cellule dispose de son propre traçage, généré à partir d'un maillage transverse correspondant à la projection locale des discontinuités matérielles contenues dans la cellule. Il se pose alors un problème aux interfaces entre cellules contiguës : comme les trajectoires tracées dans les deux cellules ne sont pas continues, il est nécessaire d'interpoler les flux angulaires entrant dans la deuxième cellule à partir des flux sortant de la première (Cf. figure 3.3).

Bien que cette approche présente un bon compromis entre précision des intégrations transverses et coût du calcul, elle introduit donc une approximation non négligeable en termes de représentation du flux. Dans un système complexe, les interpolations successives conduisent non seulement à une accumulation d'erreurs sur les flux angulaires, mais elles génèrent aussi une dispersion numérique non maîtrisée.

Par ailleurs, cette technique ne permet pas de choisir de manière flexible l'échelle à laquelle est faite la projection locale des discontinuités. D'une part les géométries industrielles ne possèdent pas toutes une composition multi-échelle aussi forte et exploitable que le traditionnel modèle cellule-assemblage-cœur. D'autre part, on peut se demander si la projection des discontinuités à l'échelle de la cellule conduit au meilleur compromis entre coût de calcul et précision des interpolations aux interfaces.

En ce qui concerne l'implémentation, cette technique nécessite la refonte totale à la fois du traçage et du balayage. Le traçage se fait maintenant en plusieurs fois, cellule par cellule. Le balayage doit lui aussi être radicalement modifié pour s'adapter à cette nouvelle structure. De plus, il est nécessaire de prendre en compte les dépendances entre cellules : une cellule amont doit être balayée avant ses cellules aval, pour permettre l'utilisation des formules d'interpolation aux interfaces. On se rapproche donc ici plutôt d'un balayage de

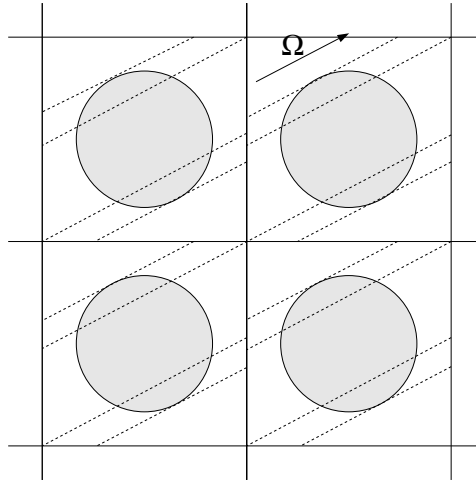


FIG. 3.3: Projection locale : les discontinuités matérielles ne sont projetées que localement à l'échelle d'une cellule combustible. Le nombre de mailles transverses est réduit, mais il faut assurer la transmission du flux au travers des interfaces entre deux cellules : les bandes de deux cellules adjacentes ne coïncident pas nécessairement entre elles.

méthode des caractéristiques courtes [Zmijarevic, 1999] que d'un balayage traditionnel de méthode des caractéristiques.

3.2 Méthode des macrobandes

La méthode que nous avons développée tente de conserver les avantages de la projection locale des discontinuités, tout en évitant la dispersion numérique générée par l'interpolation des flux angulaires à chaque interface entre cellules. Par ailleurs, plutôt que d'utiliser une formule de quadrature de Gauss-Legendre et d'ainsi augmenter le nombre de trajectoires à tracer et à balayer, notre méthode utilise directement le coefficient de transmission moyen de l'équation (3.2).

Par ailleurs, nous essayons de privilégier les implémentations proches de la méthode traditionnelle afin de faciliter la mise en place de notre méthode et de permettre des comparaisons significatives entre notre nouvelle méthode et la méthode classique.

3.2.1 Projection locale des discontinuités

Nous proposons un traitement des discontinuités grâce à un traçage à deux niveaux. Dans un premier temps, nous considérons les bandes définies par un maillage transverse classique à pas constant (figure 3.4(a)). Nous découpons ces bandes, que nous appellerons "macrobandes", en plusieurs "sections" séparées par des "interfaces" (figure 3.4(b)). Dans un deuxième temps, les discontinuités matérielles sont projetées localement dans chaque section (figure 3.5). Ceci permet de définir des "sous-bandes" continues et homogènes.

Pour que l'intégrale (3.2), utilisée pour le coefficient de transmission, soit bien définie, il faut garantir que toutes les trajectoires tracées à l'intérieur d'une même sous-bande vont traverser les mêmes régions, dans le même ordre. Ceci impose quelques contraintes sur les interfaces entre sections :

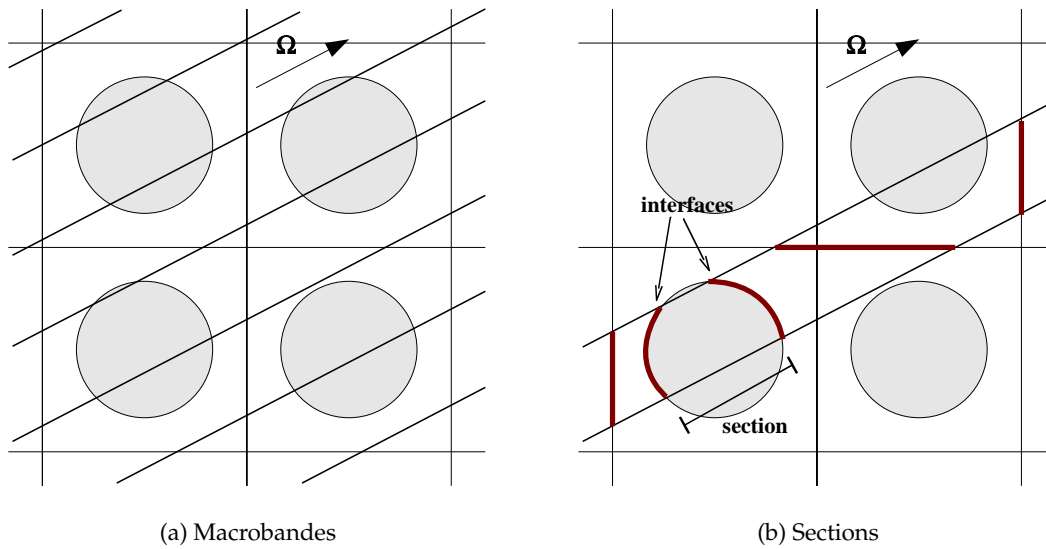


FIG. 3.4: Définition des macrobandes et des sections : les macrobandes sont définies simplement à l'aide d'un maillage transverse à pas constant. Au sein d'une macrobande, les sections sont délimitées par des interfaces vérifiant certaines contraintes.

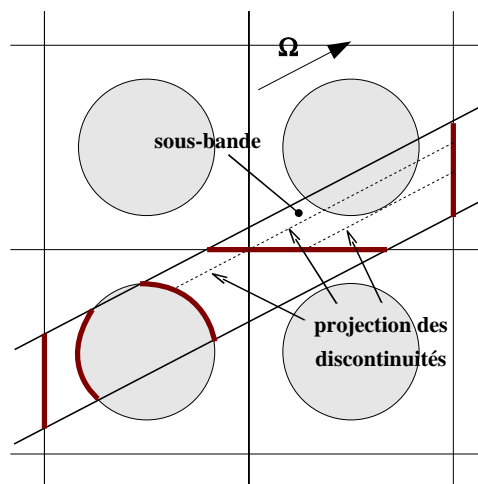


FIG. 3.5: Projection locale des discontinuités : la projection est effectuée uniquement à l'échelle de la section, ce qui limite le nombre de sous-bandes.

- (a) les interfaces doivent traverser continûment d'un bord à l'autre la macrobande, en suivant les frontières de régions qui la composent ;
- (b) les sections définies par les interfaces doivent être convexes par rapport à la direction $\vec{\Omega}$, c'est-à-dire que l'intersection d'une section avec toute droite de direction $\vec{\Omega}$ doit être convexe. Exprimé autrement : dans le repère $(O, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}_\perp)$, à chaque valeur de r_\perp ne correspondent qu'un point sur l'interface d'entrée et un point sur l'interface de sortie de la section.

3.2.2 Répartition du flux aux interfaces

Le flux est propagé en utilisant l'équation de transmission (3.1) le long de chaque sous-bande. Comme les sections peuvent ne pas avoir le même nombre de sous-bandes, il est nécessaire de redistribuer le flux angulaire à chaque interface pour déterminer les flux entrant dans les sous-bandes d'une section à partir des flux sortants de la section précédente (figure 3.6).

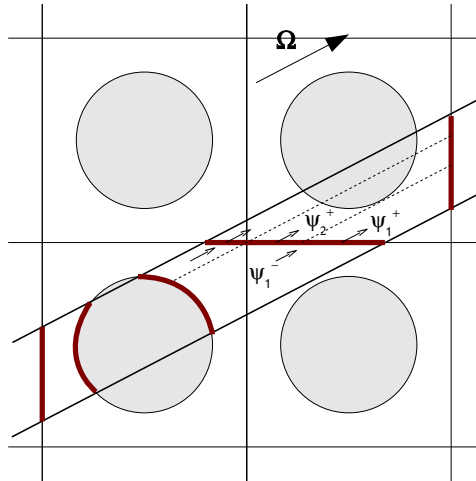


FIG. 3.6: Redistribution du flux aux interfaces : le nombre de sous-bandes étant différent entre l'amont et l'aval d'une interface, il est nécessaire de répartir les flux amont dans les sous-bandes aval, en garantissant la conservation du bilan neutronique.

Les flux angulaires entrant dans la section aval sont calculés par combinaison linéaire des flux sortant de la section amont. Les coefficients sont déterminés de manière à conserver le bilan global des neutrons. Pour réduire autant que possible la dispersion numérique que la répartition introduit, le flux angulaire entrant dans une sous-bande aval ne fait intervenir que les flux angulaires sortants des sous-bandes amont qui la recouvrent. En supposant que les flux angulaires sont constants par sous-bande, nous obtenons ainsi la formule de répartition suivante :

$$\psi_k^{aval} = \sum_{k'} \frac{\Delta_{k,k'}}{\Delta_k} \psi_{k'}^{amont}, \quad (3.4)$$

dans laquelle la sommation en k' est effectuée uniquement sur les sous-bandes amont qui recouvrent la sous-bande aval d'indice k , Δ_k représente la section de la sous-bande aval k et $\Delta_{k,k'}$ est la section d'intersection entre les sous-bandes amont d'indice k' et aval d'indice k .

Les coefficients $\frac{\Delta_k k'}{\Delta_k}$ utilisés dans cette formule ne font intervenir que des informations géométriques. Ils peuvent donc être calculés dès la phase de traçage, et stockés de la même manière que le reste des informations sur les trajectoires.

3.2.3 Coefficient de transmission moyen

Grâce à la projection locale des discontinuités et à la définition de sous-bandes homogènes, il est possible d'utiliser le coefficient de transmission moyen T .

Cas de frontières droites

Nous pouvons noter que si les frontières des régions étaient des segments de droite, le calcul de T pourrait être effectué analytiquement pour obtenir l'expression

$$T_{i,k} = \frac{e^{-\Sigma_i l_{i,k}} \sinh(\Sigma_i a_{i,k})}{\Sigma_i a_{i,k}},$$

$$a_{i,k} = \frac{\Delta_k (\tan \alpha_{i,k}^+ - \tan \alpha_{i,k}^-)}{2},$$

avec les notations de la figure 3.7 : $l_{i,k}$ est la longueur de corde moyenne, Δ_k est la section de la sous-bande, $\alpha_{i,k}^\mp$ sont les angles que forment les frontières entrante (–) et sortante (+) avec la direction transverse $\vec{\Omega}_\perp$.

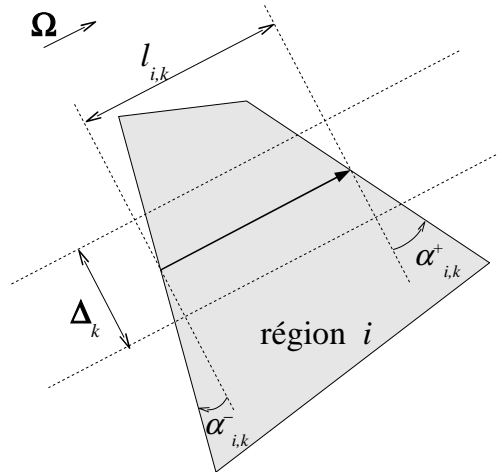


FIG. 3.7: Calcul du coefficient de transmission dans le cas de frontières droites : il est possible d'intégrer analytiquement le coefficient de transmission dans la direction transverse.

Un tel résultat est très attrayant, dans la mesure où les seules données à stocker par sous-bande sont les deux paramètres $l_{i,k}$ et $a_{i,k}$. De plus, lors du balayage d'une sous-bande, l'évaluation de la valeur de T ne requiert l'évaluation que des deux fonctions : exponentielle et sinus hyperbolique.

Malheureusement, ce résultat ne peut pas être généralisé pour des frontières de régions courbes : même dans le cas simple des arcs de cercles il n'y a pas d'expression analytique

de T , puisque celui-ci contient maintenant un terme du type :

$$\int_a^b dx e^{-\Sigma f(x)},$$

dans lequel la fonction f n'est pas linéaire en x .

Cas général

Il est important de noter ici une différence qualitative importante entre l'expression exacte (3.2) du coefficient T et son approximation (3.3). L'approximation en exponentielle garde un découplage fort entre les données géométriques (longueur de la corde moyenne) et les données nucléaires (section efficace de la région). Au contraire, l'intégrale apparaissant dans l'expression exacte de T couple de manière très forte les longueurs de cordes avec la section efficace. Sans moyen de découpler les deux (par exemple à l'aide d'une formule analytique telle que celle étudiée ci-dessus), l'évaluation de l'intégrale devra se faire entièrement durant le balayage qui est le seul moment du calcul où les sections efficaces sont connues.

Ainsi, les techniques consistant à utiliser une formule de quadrature précise (par exemple Gauss-Legendre) pour évaluer l'intégrale conduisent nécessairement à un accroissement des ressources nécessaires au calcul. L'augmentation du nombre de trajectoires nécessaires entraîne un accroissement de la quantité de données de traçage à stocker ainsi que, de manière plus problématique, un surcoût du balayage nécessaire pour les parcourir.

Pour éviter autant que possible l'accroissement du coût de balayage, nous introduisons un découplage des données géométriques et nucléaires à l'aide d'un développement de Taylor à l'ordre n_T pour le terme exponentiel :

$$e^{-\Sigma l} = e^{-\Sigma \bar{l}} \sum_{p=0}^{n_T} (-1)^p \alpha_p (l - \bar{l})^p \Sigma^p,$$

qui conduit à l'expression suivante pour le coefficient de transmission moyen T :

$$T_{i,k} = e^{-\Sigma \bar{l}_{i,k}} \left[1 + \sum_{p=1}^{n_T} \alpha_{i,k,p} \Sigma_i^p \right], \quad (3.5)$$

$$\alpha_{i,k,p} = \frac{(-1)^p}{p! \Delta_k} \int_{r_{\perp} \in I_k} dr_{\perp} (l_i(r_{\perp}) - \bar{l}_{i,k})^p.$$

La longueur de corde moyenne $\bar{l}_{i,k}$ est mise en facteur dans le développement de Taylor pour minimiser l'erreur d'approximation pour des ordres n_T faibles. Comme le montre la figure 3.8, elle n'est généralement pas atteinte au centre de la sous-bande. Son expression, ainsi que celle des coefficients $\alpha_{i,k,p}$, ne fait intervenir que des données géométriques. Il est donc possible de les évaluer durant le traçage, en utilisant une formule de quadrature de Gauss-Legendre d'ordre faible ou même une formule des rectangles suffisamment fine.

L'équation (3.5) permet d'obtenir une valeur précise du coefficient de transmission T pour des ordres de Taylor n_T faibles, sans trop alourdir le balayage. Il est nécessaire de stocker $1 + n_T$ coefficients par sous-bande (la longueur moyenne \bar{l} et les coefficients de Taylor α_p , $p \in \llbracket 1, n_T \rrbracket$). Durant le balayage, la seule opération supplémentaire par rapport à la méthode classique est l'évaluation de la sommation, qui est peu coûteuse.

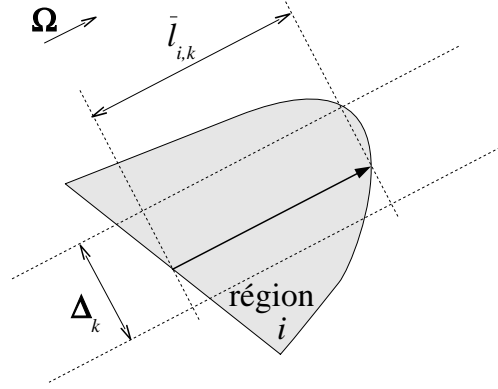


FIG. 3.8: Calcul du coefficient de transmission dans le cas général : l'intégration se fait numériquement ; un développement de Taylor permet de découpler sections efficaces et longueurs de cordes ; la longueur de corde moyenne n'est pas nécessairement atteinte au centre de la maille transverse.

3.2.4 Domaines fermés

Lorsque le domaine géométrique est fermé par des conditions aux limites de translation, rotation ou symétries, il est nécessaire de disposer d'un moyen de calculer les flux angulaires entrant dans le domaine. Nous avons vu au paragraphe 2.3.3 comment ce problème était traité traditionnellement, à l'aide de trajectoires cycliques. Nous étudions ici comment la méthode des macrobandes peut être adaptée pour les calculs en domaines fermés.

Traçage cyclique

Nous prenons ici l'exemple simple d'un domaine rectangulaire de dimensions $a \times b$, entouré de conditions aux limites de translation. D'après les résultats classiques sur le traçage périodique [Sanchez *et al.*, 2002], les angles ϕ générant des trajectoires cycliques sont caractérisés par :

$$\begin{aligned} \exists(m, n) \in \mathbb{N}^2; \\ \tan \phi = \frac{m b}{n a}, \end{aligned}$$

et les trajectoires ne doivent être tracées que dans une bande de largeur w donnée par :

$$w = \frac{a}{m}.$$

Pour utiliser la méthode des macrobandes dans ce domaine fermé, on peut donc tracer un nombre entier K de macrobandes de largeur $\Delta = w/K$. Ceci peut cependant poser des problèmes dans le cas où l'un des quatre sommets du domaine est contenu dans une macrobande. En effet, lors du traitement des conditions aux limites, cette macrobande serait séparée en deux parties distinctes ce qui poserait de gros problèmes d'implémentation. Deux techniques permettent d'éviter ce cas particulier :

- (a) inclusion des projections des sommets dans le maillage transverse ;
- (b) décalage de la bande de largeur w tracée, pour éviter qu'elle ne contienne un sommet.

Pour éviter un raffinement inutile du maillage transverse, la deuxième technique devrait être préférée à la première si possible.

Comme dans le cas d'un traçage cyclique traditionnel, les lignes caractéristiques définissant les frontières des macrobandes subissent les transformations correspondant aux conditions aux limites définies sur le bord du domaine. On obtient ainsi un traçage de macrobandes cycliques, qui peut être décomposé en sections et sous-bandes exactement de la même manière que dans le cas non cyclique.

Valeur du flux entrant

Comme dans le cas du traçage traditionnel cyclique, il est nécessaire de disposer d'une relation couplant les flux d'entrée et de sortie dans une macrobande, pour être en mesure de déterminer les flux cycliques permettant d'initialiser le balayage.

Considérons une macrobande cyclique. La combinaison des équations de transmission (3.1) et de redistribution aux interfaces (3.4) permet d'obtenir la relation suivante :

$$\begin{aligned}\psi_{s+1}^- &= R_s \psi_s^+ \\ &= R_s T_s \psi_s^- + R_s Q_s,\end{aligned}$$

dans laquelle ψ_s^\mp est le flux angulaire entrant ($-$) ou sortant ($+$) de la section s , R_s est une matrice contenant les coefficients de redistribution du flux angulaire lors du passage par l'interface de sortie de la sections s , et T_s est une matrice diagonale contenant les coefficients de transmission dans les sous-bandes de la section s .

Ainsi, comme dans le cas du traçage cyclique traditionnel, le flux angulaire sortant de la dernière section de la macrobande cyclique, qui est aussi le flux angulaire entrant dans la première section, est donné par une relation de la forme :

$$\psi_0 = T \psi_0 + Q,$$

où T et Q représentent respectivement les termes globaux de transmission et de source :

$$\begin{aligned}T &= \prod_s R_s T_s, \\ Q &= \sum_s \left[\prod_{s' > s} R_{s'} T_{s'} \right] R_s Q_s.\end{aligned}$$

Le calcul des matrices T et Q peut être effectué lors d'un balayage préliminaire. Il fait intervenir des matrices de taille variable (en fonction des nombres de sous-bandes contenues dans les sections). Néanmoins, les matrices de redistribution associées à la première interface garantissent que les matrices globales T et Q sont carrées.

3.2.5 Aperçu global de la méthode des macrobandes et complexité algorithmique

En résumé, la méthode des macrobandes est organisée ainsi :

- (1) Pour chaque direction $\vec{\Omega}$ de la formule de quadrature, nous définissons un maillage transverse à pas constant, définissant les macrobandes.
- (2) Chaque macrobande est décomposée en sections.
- (3) Par projection locale des discontinuités, chaque section est décomposée en sous-bandes homogènes.
- (4) La propagation du flux le long de chaque sous-bande est effectuée en utilisant le coefficient de transmission moyen (3.5).
- (5) Aux interfaces entre sections, le flux angulaire est redistribué en respectant la conservation du nombre de neutrons grâce à l'équation (3.4).

Les phases de traçage et balayage dans la méthode des macrobandes sont détaillées plus précisément dans les algorithmes 4 et 5. Nous voyons que le traçage est rendu relativement complexe à cause des différents niveaux d'imbrication. En revanche, l'algorithme de balayage n'est que peu modifié : les seuls ajouts sont la boucle au niveau des sous-bandes et la redistribution du flux aux interfaces.

Au vu de ces algorithmes, nous pouvons effectuer une comparaison des coûts de la méthode des caractéristiques traditionnelle et de la méthode des macrobandes (tableau 3.1). Nous nous intéressons à la fois aux ressources CPU utilisées par le balayage (évaluation d'exponentielles, multiplications, additions) et à la taille de stockage consommée par le traçage (nombre de flottants). Les complexités algorithmiques présentées sont exprimées en nombre d'opérations par segment de trajectoire tracé.

Alors qu'il est possible de donner des valeurs exactes pour la complexité de la méthode traditionnelle, celle de la méthode des macrobandes est plus difficile à exprimer. En effet, le coût de l'opération de redistribution dépend des nombres de sous-bandes dans les sections, qui n'est pas corrélé de manière simple au nombre de segments tracés. Par ailleurs ce coût, qui est supporté à chaque interface, doit être réexprimé en termes de nombre d'opérations par région balayée. À cause de toutes ces raisons, nous ne pouvons pas prédire la valeur exacte du coût de la redistribution du flux aux interfaces. En revanche, nous pouvons l'évaluer *a posteriori* pour un problème particulier, en introduisant un paramètre supplémentaire

$$r = \frac{\bar{n}_{sb}}{\bar{n}_{reg}}, \quad (3.6)$$

où \bar{n}_{sb} est le nombre moyen de sous-bandes par section, et \bar{n}_{reg} est le nombre moyen de régions par sous-bande. r représente donc le coût de la redistribution aux interfaces, rapporté au nombre de régions. Les complexités algorithmiques détaillées dans le tableau 3.1 pour la méthode des macrobandes sont donc exprimées en fonction de ce paramètre r , dont la valeur sera estimée pour chaque problème considéré.

TAB. 3.1: Comparaison des complexités théoriques des méthodes traditionnelle et des macrobandes, exprimées en nombre d'opérations par région balayée.

Le paramètre r représente le coût moyen de la redistribution du flux aux interfaces dans la méthode des macrobandes.

| méthode | exponentielles | multiplications | additions | taille de stockage |
|---------------------------|----------------|-----------------|-----------|--------------------|
| traditionnelle | 1 | 2 | 2 | 1 |
| macrobandes ($n_T > 0$) | 1 | $3 + n_T + r$ | $2 + n_T$ | $1 + n_T + 2r$ |
| macrobandes ($n_T = 0$) | 1 | $2 + r$ | 2 | $1 + 2r$ |

Algorithme 4 Méthode des macrobandes : traçage

pour chaque direction $\vec{\Omega}$ dans la formule de quadrature **faire**
définir un maillage transverse à pas constant ;
pour chaque macrobande **faire**
initialiser l'interface initiale sur le bord du domaine ;
pour chaque interface **faire**
créer une nouvelle section entre l'interface précédente et l'interface courante ;
projeter les discontinuités à l'intérieur de la section ;
calculer les coefficients de redistribution à l'interface d'entrée de la section ;
pour chaque sous-bande dans la section **faire**
définir une formule d'intégration transverse ;
pour chaque trajectoire de la formule de quadrature transverse **faire**
pour chaque région interceptée par la trajectoire **faire**
mettre à jour l'évaluation de la corde moyenne \bar{l} ;
fin pour
fin pour
pour chaque trajectoire de la formule de quadrature transverse **faire**
pour chaque région interceptée par les trajectoires **faire**
cumuler la contribution de la trajectoire aux coefficients α (eq. (3.5)) ;
fin pour
fin pour
fin pour
fin pour
fin pour
fin pour

Algorithme 5 Méthode des macrobandes : balayage

pour chaque direction $\vec{\Omega}$ dans la formule de quadrature **faire**
pour chaque macrobande **faire**
initialiser le flux entrant avec les conditions aux limites ;
redistribuer le flux à travers l'interface entrante initiale ;
pour chaque tronçon de la macrobande **faire**
mettre à jour la direction courante
pour chaque section dans la macrobande **faire**
pour chaque sous-bande **faire**
pour chaque région traversée par la sous-bande **faire**
évaluer le coefficient de transmission T ;
propager le flux à l'aide de l'équation de transmission (3.1) ;
mettre à jour le flux moyen dans la région à l'aide de la formule (2.7) ;
fin pour
fin pour
redistribuer le flux à travers l'interface sortante ;
fin pour
fin pour
fin pour
fin pour

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés de manière plus spécifique à la technique d'intégration transverse dans la méthode des caractéristiques. Nous avons analysé trois sources potentielles majeures d'erreurs numériques :

- la mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles, qui occasionne des problèmes de convergence en fonction du pas de traçage ;*
- l'utilisation d'une formule d'intégration transverse en rectangles, peu adaptée à la forme des intégrandes apparaissant dans les équations de la méthode des caractéristiques ;*
- l'utilisation d'une représentation transverse constante par morceaux du flux angulaire.*

Nous avons détaillé plus précisément les deux premières approximations ci-dessus, et proposé une méthode, dite des "macrobandes" permettant d'en limiter les effets. Pour prendre en compte les discontinuités matérielles, la méthode des macrobandes repose sur une amélioration du traçage dans laquelle le domaine est séparé en macrobandes et sections. La projection des discontinuités matérielles est faite uniquement localement, évitant ainsi un raffinement excessif du maillage d'intégration transverse. Un nouveau coefficient de transmission est introduit pour rétablir la cohérence entre intégration transverse et représentation du flux.

Nous discutons dans le chapitre prochain l'implémentation de cette méthode, ainsi que les résultats numériques auxquels elle conduit.

Chapitre 4

Implémentation, résultats numériques, analyse et perspectives

Nous nous intéressons ici à tous les aspects relatifs à l'introduction dans le solveur TDT de la méthode des macrobandes, décrite au chapitre 3.

Nous présentons brièvement les points essentiels de l'implémentation, avant de nous intéresser aux résultats numériques obtenus. Ceci nous permettra de tirer quelques conclusions sur l'intérêt de la méthode des macrobandes, ainsi que ses limites. Nous présentons enfin deux pistes d'amélioration de la méthode des macrobandes.

Nous avons implémenté la méthode des macrobandes dans le solveur de transport TDT. Bien que cette méthode requière relativement peu de modifications par rapport à la méthode des caractéristiques traditionnelle, elle introduit tout de même quelques nouveautés algorithmiques. De plus, devant les difficultés d'implémentations posées par certaines de ces nouveautés, des compromis ont dû être trouvés entre la performance de la méthode et la complexité du code. Nous détaillerons ces choix d'implémentation dans un premier temps.

Nous nous intéressons ensuite aux résultats numériques que nous avons obtenus à l'aide de la nouvelle méthode. Des comparaisons avec les résultats donnés par la méthode des caractéristiques traditionnelle nous permettront de quantifier les avantages et limites de la méthode des macrobandes.

Pour conclure sur le sujet de l'intégration transverse, nous proposons enfin quelques perspectives détaillant de nouvelles fonctionnalités ou améliorations potentielles pour la méthode des macrobandes.

4.1 Notes sur l'implémentation de la méthode des macrobandes

4.1.1 Découpage des macrobandes en sections

L'une des opérations les plus délicates à implémenter dans notre méthode des macrobandes est le découpage des macrobandes en sections durant la phase de traçage. En effet, la détection d'interfaces vérifiant toutes les conditions énumérées au paragraphe 3.2.1 n'est pas aisée. Étant donné que cette étape du calcul est effectuée une fois pour toutes durant la phase de traçage au début du calcul, nous ne sommes pas vraiment contraints par l'efficacité algorithmique de la détection des interfaces : le temps de traçage est négligeable devant la durée des itérations de balayage. Cependant, le temps de développement est ici assez critique : mettre au point un algorithme complet permettant de traiter toutes les configurations possibles d'interfaces aurait demandé une lourde charge de travail, avant même d'avoir une idée du gain potentiel de la méthode des macrobandes.

Pour faciliter l'implémentation du traçage, nous avons donc préféré renforcer les contraintes, au risque de construire quelques sections plus longues que strictement nécessaire¹. En pratique, nous imposons donc les contraintes suivantes sur les interfaces :

- (a) les interfaces doivent traverser de part en part la macrobande ;
- (b) une interface peut être définie par :
 - i. *un élément unique* de frontière de régions qui la composent ;
 - ii. *une suite d'éléments sur la frontière du domaine géométrique* ;
- (c) les sections définies par les interfaces doivent être convexes par rapport à la direction $\vec{\Omega}$.

L'ajout de la condition (b) permet de détecter plus aisément les interfaces potentielles : il est beaucoup plus facile de vérifier si un élément de frontière traverse une macrobande que de tester intégralement un ensemble — potentiellement immense — de suites d'éléments contigus. Cependant, (b.i) est trop restrictive en ce qui concerne les bords du domaine géométrique : il est inévitable de prévoir la condition (b.ii) dans le cas où une macrobande recouvre plusieurs éléments de la frontière du domaine (mais là encore la tâche sera simplifiée par le fait que seuls les éléments du bord du domaine sont à explorer).

Une fois les conditions (a) et (b) vérifiées, la condition (c) l'est forcément, pour peu que les éléments de frontière des régions ne puissent pas prendre de forme trop exotique. Dans

¹Le renforcement des contraintes sur les interfaces, conduisant à la génération de sections plus longues, n'est d'ailleurs pas nécessairement mauvaise. En effet, de longues sections accroissent certes inutilement le nombre de sous-bandes, mais la diminution du nombre d'interfaces réduit le coût de la redistribution du flux. Il serait sans doute nécessaire d'effectuer une étude plus approfondie pour déterminer la longueur optimale des sections.

les géométries industrielles, le plus souvent décrites uniquement à l'aide de segments et d'arcs de cercles, n'importe quel élément traversant de part en part une macrobande le fait nécessairement en vérifiant la condition (c).

Malgré cela, le découpage des macrobandes en sections n'est pas entièrement trivial. L'algorithme 6 présente les grandes lignes de la méthode que nous avons implémentée. L'idée générale en est de parcourir simultanément les deux trajectoires bordant la macrobande. Lorsque les deux trajectoires traversent simultanément le même élément, alors nous avons trouvé une interface entre deux sections. Il faut néanmoins prêter attention aux cas particuliers tels que celui décrit sur la figure 4.1, en vérifiant aussi que les régions situées après l'interface coïncident de part et d'autre de la macrobande. Lorsque la fin d'un tronçon est atteinte, il est nécessaire d'effectuer la recherche complète d'une suite d'éléments de frontière selon la condition (b.ii).

Algorithme 6 Méthode des macrobandes : détection des interfaces entre sections

```

définir le maillage transverse à pas constant ;
tracer les trajectoires correspondant aux bornes du maillage transverse ;
pour chaque trajectoire  $\mathcal{T}_i$  tracée faire
    déterminer la direction  $\vec{\Omega}_i$  de  $\mathcal{T}_i$  ;
    déterminer l'interface d'entrée le long du bord entre  $\mathcal{T}_{i-1}$  et  $\mathcal{T}_i$  ;
    pour chaque tronçon de trajectoire faire
        tant que on peut trouver d'autres interfaces faire
            pour chaque élément  $e_{i-1}$  traversé par  $\mathcal{T}_{i-1}$  faire
                déterminer la région  $r_{i-1}$  traversée par  $\mathcal{T}_{i-1}$  immédiatement après  $e_{i-1}$  ;
                pour chaque élément  $e_i$  traversé par  $\mathcal{T}_i$  faire
                    déterminer la région  $r_i$  traversée par  $\mathcal{T}_i$  immédiatement après  $e_i$  ;
                    si  $e_{i-1} = e_i$  et  $r_{i-1} = r_i$  alors
                        sortir des deux boucles : on vient de trouver une interface ;
                    fin si
                fin pour
            fin pour
            si aucune interface n'a été trouvée avant la fin du tronçon alors
                déterminer l'interface de sortie le long du bord entre  $\mathcal{T}_{i-1}$  et  $\mathcal{T}_i$  ;
            fin si
            définir une nouvelle section entre l'interface précédente et la nouvelle ;
            projeter les discontinuités à l'intérieur de la section nouvellement créée ;
            calculer les coefficients de redistribution pour l'interface précédente ;
        fin tant que
    fin pour
    calculer les coefficients de redistribution pour la dernière interface ;
fin pour

```

4.1.2 Projection locale des discontinuités

Deuxième étape spécifique à la méthode des macrobandes, la projection locale des discontinuités doit être effectuée avec soin. Là encore, il s'agit d'une partie de la phase de traçage donc la recherche d'un algorithme optimal n'est pas prioritaire étant donné le faible impact du temps de traçage sur la durée du calcul. En revanche, il est absolument essentiel que la projection locale des discontinuités donne un résultat correct : d'une part l'oubli d'une discontinuité matérielle conduit à l'impossibilité de définir le coefficient de transmission moyen (3.2), d'autre part la détection d'une discontinuité inexistante (i.e. un faux

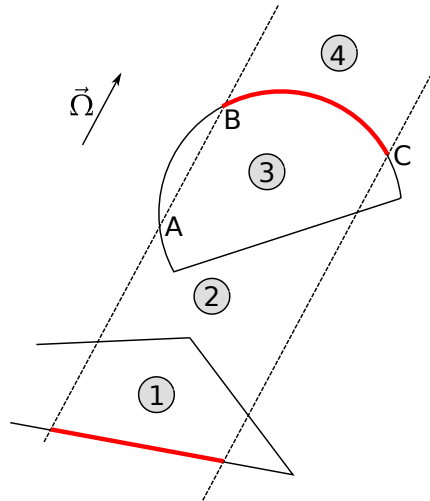


FIG. 4.1: Cas particulier posant problème dans la détection des interfaces : lorsque la ligne de gauche traverse pour la première fois l'arc de cercle au point A, on peut détecter que cet arc de cercle traverse de part en part la macrobande jusqu'au point C. Cependant, l'arc de cercle (AC) n'est pas une interface valide : en effet, le point A se trouve à l'interface entre les régions 2 et 3, alors que le point C est positionné à la limite entre les régions 3 et 4. En revanche, l'arc de cercle (BC) est bien une interface valide, permettant de clôturer la section entre les régions 3 et 4.

positif) conduit à la création d'une sous-bande inutile et donc à un surcoût de balayage dans les itérations internes.

La projection locale des discontinuités est résumée sur l'algorithme 7. Elle fait apparaître deux tâches élémentaires :

- (a) construction de la liste d'éléments de surfaces contenus (au moins partiellement) dans la section ;
- (b) détection des discontinuités matérielles présentes dans la section, c'est-à-dire à la fois dans l'étendue transverse de la macrobande et dans l'intervalle délimité par les deux interfaces de la section.

Bien que l'algorithme soit itératif pour des raisons évidentes d'efficacité, l'étape (a) est, dans l'esprit, réalisée de manière récursive : une liste d'éléments à traiter est initialisée avec les éléments de surface contenus dans les interfaces ainsi que ceux traversés par les trajectoires extrêmes de la macrobande. Ensuite, pour chaque élément de la liste, on considère tous les éléments composant la frontière des régions voisines. Si ces éléments intersectent la section, ils sont ajoutés à la liste pour être traités plus tard. La bonne terminaison de l'algorithme est assurée par un mécanisme interdisant de traiter plusieurs fois le même élément.

Pour l'étape (b), nous distinguons différents cas permettant de simplifier la recherche selon la forme des éléments surfaciques et leur position (fig. 4.2) :

- (b.i) Si l'élément de surface considéré est l'un des constituants d'une interface délimitant la section : on n'a pas besoin de projeter les discontinuités.
- (b.ii) Si l'élément est un segment ou un cercle complet et s'il est certain que l'élément est au moins partiellement contenu dans la section : toute discontinuité se trouvant à l'intérieur de l'étendue transverse de la macrobande est aussi nécessairement à l'intérieur de la section.
- (b.iii) Dans le cas général : pour chacune de ces discontinuités, il ne suffit pas de savoir si

elle appartient à l'étendue transverse de la macrobande ; il faut aussi vérifier qu'elle est bien située en aval de l'interface d'entrée et en amont de l'interface de sortie.

Algorithme 7 Méthode des macrobandes : projection locale des discontinuités

```

pour chaque élément surfacique  $e$  contenu dans les interfaces délimitant la section faire
    ajouter  $e$  à la liste des éléments à traiter ;
fin pour
pour chaque élément surfacique  $e$  traversé par les trajectoires extrêmes de la section faire
    si  $e$  ne figure pas dans la liste à traiter alors
        projeter les discontinuités de l'élément  $e$ , en utilisant le cas (b.ii) si possible ;
        ajouter  $e$  à la liste des éléments à traiter ;
    fin si
fin pour
tant que il reste au moins un élément  $e$  à traiter dans la liste faire
    pour chaque région  $r$  bordée par  $e$  faire
        pour chaque élément  $e'$  entourant  $r$  faire
            si  $e'$  n'a pas encore été traité et ne figure pas dans la liste à traiter alors
                projeter les discontinuités de  $e'$ , dans le cas général (b.iii) ;
                si  $e'$  possède une discontinuité à l'intérieur de la section alors
                    ajouter  $e'$  à la liste des éléments à traiter ;
                fin si
            fin si
        fin pour
    fin pour
fin tant que

```

4.1.3 Redistribution du flux aux interfaces

Contrairement aux étapes discutées précédemment, la redistribution du flux aux interfaces intervient durant le balayage. Il s'agit donc d'une opération très critique pour l'optimisation des ressources de calcul.

Dans l'implémentation actuelle, les coefficients de redistribution de l'équation (3.4) sont calculés et stockés de manière séquentielle lors du traçage. Lors du balayage, une sous-routine est appelée à chaque interface pour calculer les flux aval en fonction des flux amont. Les coefficients de répartition sont remis sous forme matricielle :

$$R_{k,k'} = \frac{\Delta_{k,k'}}{\Delta_k},$$

et les flux amont et aval sont représentés sous la forme d'un vecteur. Ainsi, la répartition des flux amont dans les sous-bandes aval est calculée sous la forme d'un produit matrice-vecteur :

$$\psi^{aval} = R \psi^{amont}.$$

Cette opération est, dans l'implémentation actuelle de la méthode des macrobandes, le principal goulot d'étranglement restreignant l'efficacité de la méthode en termes de temps de calcul. Il semblerait que ceci soit dû à la conjonction de deux facteurs principaux :

- l'appel d'une routine à chaque interface induit un coût non négligeable ;
- la remise en forme d'une matrice de coefficients à partir du vecteur de stockage n'est pas optimale.

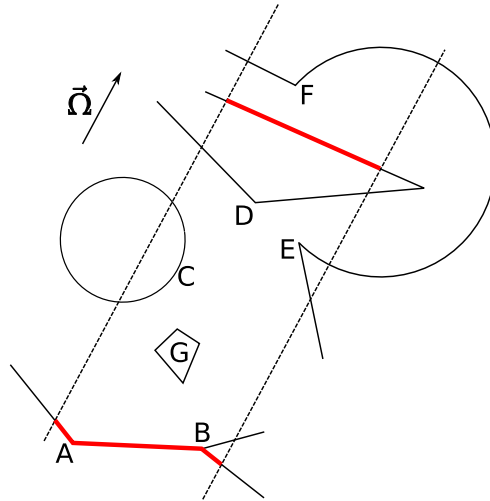


FIG. 4.2: Cas particuliers dans la projection des discontinuités :

- A et B – points sur une interface ; ne projeter que s’il s’agit d’une intersection avec un autre élément ;
- C et D – cercle ou segment intersectant le bord de la section ; discontinuités à projeter ;
- E et F – arc de cercle intersectant le bord de la section ; faire attention à la position des points ;
- G – région intégralement contenue à l’intérieur de la section ; toutes les discontinuités sont à projeter.

4.2 Résultats numériques

Dans cette section, nous détaillons les résultats obtenus avec notre implémentation de la méthode des macrobandes dans le solveur de transport TDT. Nous nous intéressons principalement à la précision de la méthode en elle-même plutôt qu’à celle de la modélisation neutronique ou géométrique.

C’est pourquoi nous utiliserons comme résultats de référence ceux d’un calcul avec la méthode des caractéristiques traditionnelle, convergée grâce à une discrétisation transverse très fine (pas de traçage de 0.005 cm). En effet, la méthode des macrobandes converge vers le même résultat que la méthode traditionnelle quand le pas de traçage tend vers 0.

4.2.1 Comparaison MOC / macrobandes

Nous nous intéressons principalement à deux critères dans les comparaisons entre méthode traditionnelle et macrobandes :

- Nature de la convergence : nous avons vu au paragraphe 3.1.1 que la mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles pouvait engendrer une convergence non-uniforme de la méthode. Le mode de convergence de la méthode des macrobandes sera donc le premier critère permettant de déterminer son efficacité par rapport aux macrobandes.
- Précision du résultat : l’objectif principal de l’amélioration de la méthode d’intégration transverse avec les macrobandes est de permettre l’obtention d’une meilleure précision avec un pas de traçage équivalent. Ceci sera donc notre deuxième critère de comparaison.

En ce qui concerne la comparaison des précisions à pas de traçage équivalent, une attention particulière doit être portée à la notion de pas de traçage pour les deux méthodes. La comparaison d’un pas de traçage traditionnel avec la largeur de macrobandes serait en effet

peu honnête, dans la mesure où la transmission est effectuée au niveau des sous-bandes.

Nous introduisons donc la notion de “pas de traçage effectif” pour la méthode des macrobandes. Il s’agit de la largeur moyenne des sous-bandes sur lesquelles est calculée la transmission du flux :

$$\Delta_{eff} = \frac{\Delta}{\bar{n}_{sb}}, \quad (4.1)$$

où Δ est la largeur des macrobandes, et \bar{n}_{sb} est le nombre moyen de sous-bandes par section. La valeur de \bar{n}_{sb} dépend fortement de la géométrie ainsi que du pas de traçage Δ choisi par l’utilisateur. Il est donc impossible de prédire la valeur de Δ_{eff} avant d’avoir effectué le calcul. En revanche, une fois le traçage effectué, il est tout à fait possible de mesurer le pas de traçage effectif utilisé. Ce sont ces types d’évaluations qui ont été utilisés dans les graphiques que nous présentons ci-dessous.

La précision des calculs sera évaluée sur la base des taux d’absorption total. Dans tous les essais numériques que nous avons effectués, l’utilisation d’un autre taux de réaction, comme par exemple le taux de fission total, donne des résultats extrêmement similaires.

Le tableau suivant récapitule les paramètres des différents calculs analysés dans le reste de cette section :

| Paramètre | Valeur | | |
|-------------------|---------------------------|----------------------------|------------------------------|
| | cellule REP (fig. 4.3) | cellule RBMK (fig. 4.4) | assemblage REP (fig. 4.5) |
| Type de problème | source | valeur propre | valeur propre |
| Nombre de groupes | 1 | 3 | 3 |
| Pas de traçage : | | | |
| référence | 0.005 cm | 0.005 cm | 0.005 cm |
| cas tests | 0.001–1 cm | 0.005–0.3 cm | 0.005–0.8 cm |

4.2.2 Convergence

Nous effectuons les premiers essais numériques sur une cellule combustible simplifiée de réacteur à eau pressurisée (REP), dont la géométrie est présentée sur la figure 4.3(a). Il s’agit ici d’un problème à source à un groupe. Cette cellule ne comprenant que deux régions de calcul (crayon combustible et eau), il n’y a quasiment aucune compensation possible entre les erreurs dues aux discontinuités matérielles. Ceci en fait un cas-test idéal pour l’étude de la convergence des deux méthodes.

La figure 4.3(b) montre l’erreur relative sur les taux d’absorption moyen en fonction du pas de traçage pour les deux méthodes. Le calcul de référence utilisé est une méthode des caractéristiques traditionnelle convergée avec un pas de traçage de 0.005 cm. Nous pouvons vérifier que les deux méthodes convergent bien vers la même valeur lorsque la discrétisation transverse se raffine.

Les effets de la mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles sont particulièrement visibles pour la méthode des caractéristiques traditionnelle : tant que le pas de traçage n’est pas plus fin que 0.05 cm, la convergence n’est pas monotone. Non seulement l’erreur oscille fortement, mais elle change même régulièrement de signe.

En revanche, la méthode des macrobandes sous-évalue uniformément les taux d’absorption, et présente une convergence monotone même lorsque la discrétisation transverse est grossière (pas de traçage effectif de 1 cm). De plus, on observe de manière très nette que

la convergence est linéaire en fonction du pas de traçage : un pas de traçage $\Delta = 0.5$ cm conduit à une erreur de 0.5% ; un pas de traçage double $\Delta = 1$ cm conduit à une erreur de 1% environ.

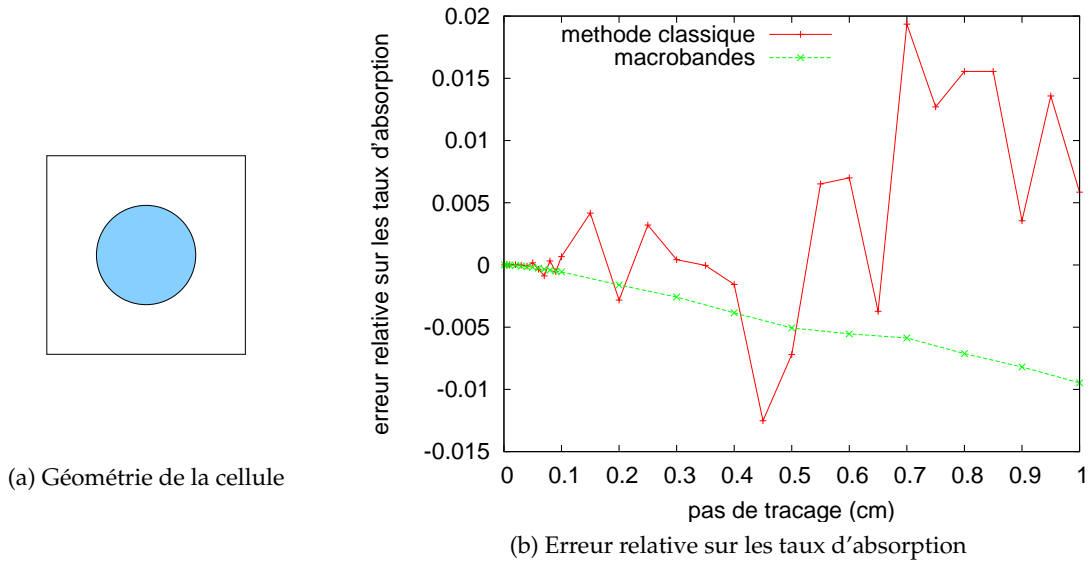


FIG. 4.3: Comparaison entre les résultats de la méthode des caractéristiques traditionnelle et la méthode des macrobandes sur une cellule combustible REP simplifiée. La méthode traditionnelle converge de manière non monotone ; la méthode des macrobandes converge linéairement.

4.2.3 Précision

En ce qui concerne la précision du calcul, nous pouvons observer sur la figure 4.3 que pour un pas de traçage équivalent, la technique des macrobandes est jusqu'à six fois plus précise que la méthode des caractéristique classique. Inversement, pour une précision donnée, la méthode des macrobandes permet de relâcher la discrétisation transverse d'un facteur cinq.

Ces résultats restent valides pour des géométries plus complexes : nous avons effectué des calculs à valeur propre et à 3 groupes, pour le quart de cellule RBMK présenté sur la figure 4.4(a) ou le huitième d'assemblage REP de la figure 4.5(a), qui comportent environ 500 régions de calcul. Pour éviter les erreurs de compensation générées par une intégration globale sur le domaine, nous présentons sur les figures 4.4(b) et 4.5(b) l'erreur relative maximale sur les taux d'absorption par région. Malgré cela, nous pouvons constater que le nombre important de régions et la grande taille optique du système induisent de fortes compensations d'erreurs qui masquent en partie les problèmes de convergence de la méthode traditionnelle. Les bonnes propriétés de convergence de la méthode des macrobandes, ainsi que le gain en précision qu'elle apporte, restent toutefois bien visibles. Par exemple sur le quart d'assemblage RBMK, une précision de 1% peut-être obtenue avec un pas de traçage effectif $\Delta_{eff} = 0.1$ cm, alors que la même précision nécessite un pas de traçage $\Delta = 0.02$ cm avec la méthode traditionnelle.

Il est intéressant de remarquer que le gain relatif en précision est quasiment constant et ne varie qu'assez peu avec le pas de traçage. Ceci signifie qu'à toutes les échelles, l'erreur due à la précision de l'intégration transverse est du même ordre que le pas de traçage.

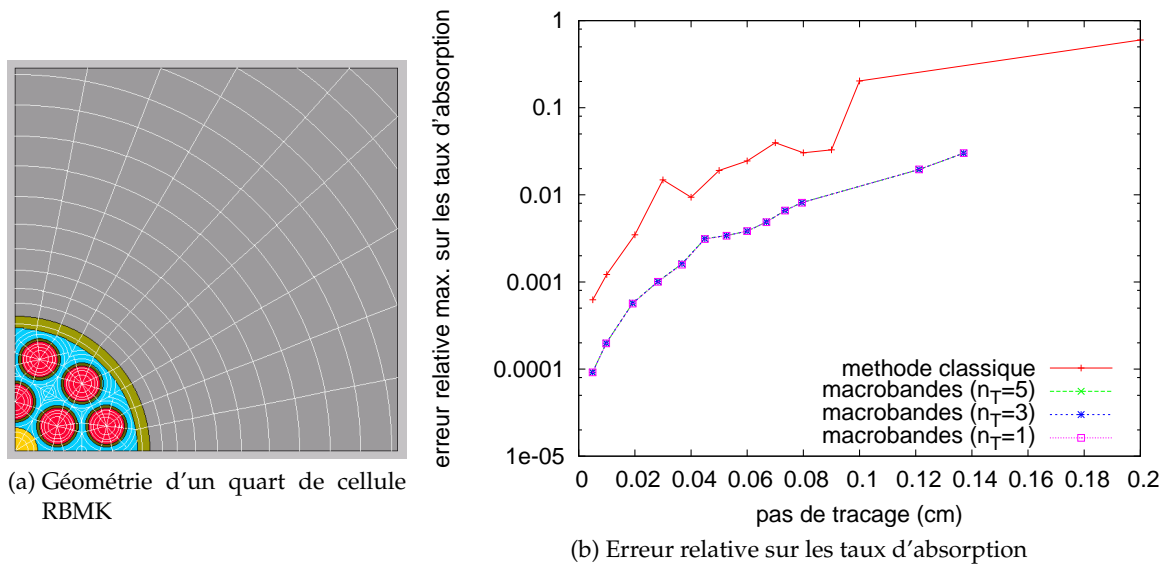


FIG. 4.4: Comparaison entre les résultats de la méthode des caractéristiques traditionnelle et la méthode des macrobandes sur une cellule RBMK.

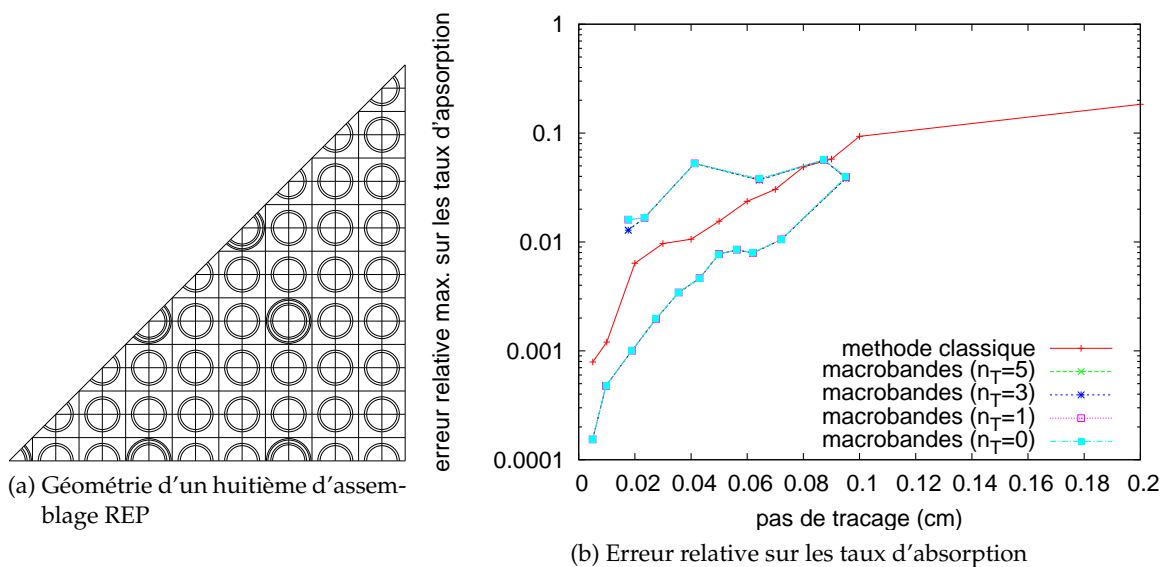


FIG. 4.5: Comparaison entre les résultats de la méthode des caractéristiques traditionnelle et la méthode des macrobandes sur un assemblage REP barré.

Influence de l'ordre du développement de Taylor

En ce qui concerne l'ordre n_T du développement de Taylor, il est assez surprenant de constater que son influence est quasiment négligeable. Même dans le cas de l'assemblage REP barré (fig. 4.5), dans lequel les sections efficaces atteignent de fortes valeurs susceptibles de mettre en défaut le développement de Taylor, on n'observe quasiment aucune différence entre un développement d'ordre 5 et d'ordre 0.

Il est intéressant de remarquer que l'ordre 0 dans le développement de Taylor revient à ne considérer qu'une seule corde moyenne dans l'intégration transverse sur une sous-bande. Ceci est quasiment équivalent à la formule d'intégration traditionnelle qui ne considère que la corde centrale. Par ailleurs, le coût du balayage d'une sous-bande (redistribution non comprise) est ainsi ramené à celui du balayage d'une région dans la méthode traditionnelle.

Variations du pas de traçage effectif en fonction du pas de traçage macroscopique

La figure 4.5(b) présente une particularité intéressante au niveau de la courbe représentant la précision de la méthode des macrobandes en fonction du pas de traçage effectif. On voit ici que le pas de traçage effectif n'est pas monotone : pour de grandes valeurs du pas de traçage global Δ , les macrobandes sont tellement larges qu'il est difficile d'y trouver des interfaces pour séparer les sections. La longueur des sections s'allonge donc jusqu'à un point où le nombre de discontinuités matérielles devient très important. Ceci provoque l'accroissement du nombre moyen \bar{n}_{sb} de sous-bandes par section servant à définir le pas de traçage effectif Δ_{eff} de l'équation (4.1).

Comme on peut le voir sur la figure 4.6, cet accroissement est très surlinéaire (courbe continue). Les trop grandes valeurs du pas de traçage global Δ conduisent donc finalement à un pas de traçage effectif Δ_{eff} très fin (courbe en pointillés), ce qui coûte très cher en ressources de calcul, mais ne permet pas de gagner en précision à cause de la grande dispersion numérique occasionnée par la redistribution du flux à travers des interfaces trop larges.

Lorsque le pas de traçage global diminue, la longueur des sections diminue et on retrouve un mode de fonctionnement normal dans lequel le pas de traçage effectif décroît presque linéairement avec la largeur des macrobandes.

Entre ces deux régimes se trouve un point pour lequel le pas de traçage effectif atteint sa valeur maximale Δ_{eff}^{max} . Ce point caractérise en quelque sorte la limite du domaine d'efficacité de la méthode des macrobandes : aller au-delà signifie nécessairement une dégradation du rapport qualité sur coût en ressources.

4.2.4 Temps de calcul

Comme nous l'avons souligné dans le paragraphe 4.1.3, notre implémentation de la méthode des macrobandes n'est pas optimale, particulièrement en ce qui concerne la redistribution du flux angulaire aux interfaces, durant le traçage. Une comparaison des temps de calcul observés avec la méthode des macrobandes et le solveur TDT classique pour la même précision ne tourne donc pour l'instant pas en faveur des macrobandes.

Nous pouvons cependant étudier, d'un point de vue algorithmique, les gains potentiels en ressources de calcul. Les résultats précédemment cités montrent que la méthode des macrobandes permet de relâcher d'un facteur 5 environ le pas de traçage effectif, pour une précision équivalente des résultats.

Par ailleurs, nous avons pu observer que l'ordre n_T du développement de Taylor, même s'il est réduit à 0, n'a qu'un impact négligeable sur la qualité des résultats. D'après l'étude de complexité effectuée au paragraphe 3.2.5, ceci ramène la complexité algorithmique de la méthode des macrobandes à celle de la méthode traditionnelle, sans compter le coût de la

redistribution des flux angulaires. Dans les exemples cités plus haut, le coût de cette redistribution se monte environ à $r \simeq 0.6$ opération par sous-bande. La complexité de la méthode des macrobandes est donc environ 1.3 fois supérieure à celle des caractéristiques traditionnelle.

Ainsi, le gain maximal théorique accessible grâce à la méthode des macrobandes est de l'ordre d'un facteur $5/1.3 \simeq 3.8$ sur les temps de balayage. Même s'il est illusoire d'espérer observer de tels gains en pratique, il nous semblerait réaliste d'attendre au moins une réduction des temps de calcul de 50 à 60%.

4.3 Perspectives pour la méthode des macrobandes

4.3.1 Détermination automatique du pas de traçage optimal

À l'heure actuelle, la plupart des études effectuées à l'aide de la méthode des caractéristiques utilisent un pas de traçage recommandé, déterminé *a priori* en fonction du type de géométrie considéré. Pour traiter une géométrie nouvelle, il est souvent nécessaire d'effectuer une étude de la convergence de la méthode en fonction du niveau de discrétisation transverse, afin de déterminer le pas de traçage optimal.

Pour éviter de telles études, la remarque effectuée ci-dessus sur la variation du pas de traçage effectif Δ_{eff} en fonction du pas de traçage macroscopique Δ pourrait constituer une heuristique utile en ce qui concerne la détermination automatique d'un pas de traçage adapté à une géométrie particulière. En effet, la valeur maximale du pas de traçage effectif Δ_{eff}^{max} , présentée sur la figure 4.6, peut être déterminée uniquement sur la base d'informations géométriques, avant de commencer à effectuer réellement le calcul. Plutôt que de recommander un pas de traçage pour chaque type de géométrie, on pourrait donc recommander d'utiliser une certaine fraction du pas de traçage effectif maximal. Par exemple :

$$\Delta_{eff} = \frac{\Delta_{eff}^{max}}{2} \text{ pour une précision attendue de l'ordre du pourcent ;}$$

$$\Delta_{eff} = \frac{\Delta_{eff}^{max}}{5} \text{ pour une précision attendue de l'ordre du pourmille.}$$

La mise en place d'une telle fonctionnalité nécessiterait la réalisation d'un grand nombre d'études pour vérifier la validité des recommandations en fonction du pas de traçage effectif maximal dans différentes configurations géométriques. En revanche, son implémentation requerrait peu de modifications au code existant :

- une routine permettant d'effectuer un traçage à différents pas de discrétisation pour déterminer le pas de traçage effectif maximal Δ_{eff}^{max} ;
- la mise en place d'une table de correspondance $\Delta \leftrightarrow \Delta_{eff}$ permettant à l'utilisateur de n'entrer dans le jeu de données que le pas de traçage effectif, le code déterminant lui-même automatiquement le pas de traçage macroscopique correspondant.

4.3.2 Représentation transverse linéaire du flux

Dans le paragraphe 3.1.2, nous avons brièvement discuté une approximation fondamentale de l'intégration transverse : la représentation du flux constante par morceaux dans les bandes associées aux trajectoires caractéristiques. Bien que la méthode des macrobandes rende la formule d'intégration consistante avec cette représentation, il n'en reste pas moins qu'il s'agit d'une source potentielle d'erreurs.

L'un des axes d'amélioration de la méthode des macrobandes serait donc d'introduire une représentation plus précise pour la variation du flux dans la direction transverse. Nous

détaillons ici deux techniques permettant d'améliorer la représentation transverse du flux angulaire.

Transmission le long des sous-bandes

I – Points de Gauss

Une première technique consiste à établir une formule de quadrature de Gauss d'ordre n_G à l'intérieur de chaque sous-bande. À chaque point de Gauss est associé une trajectoire caractéristique le long de laquelle le flux est transmis. L'intégration transverse se fait en utilisant les poids donnés par la formule de quadrature.

L'intérêt de cette technique est qu'elle est totalement indépendante du reste de l'algorithme : la transmission peut s'effectuer à l'aide de l'équation traditionnelle (2.4) ou bien avec la formule moyennée transversalement (3.1) ; de même la redistribution du flux aux interfaces reste quasiment inchangée.

II – Représentation linéaire

On peut aussi imaginer utiliser une représentation polynomiale de la dépendance du flux angulaire dans la direction transverse. De telles représentations nécessitent l'adaptation des équations de transmission et de redistribution. Nous détaillons ici la représentation linéaire du flux.

Supposons la forme suivante pour le flux angulaire :

$$\psi(r_{\perp}) = \bar{\psi} + r_{\perp} \psi_{\perp}, \quad \forall r_{\perp} \in [r_{\perp}^{-}, r_{\perp}^{+}], \quad (4.2)$$

où r_{\perp}^{-} et r_{\perp}^{+} sont respectivement les bornes inférieure (–) et supérieure (+) de la bande d'intégration transverse.

L'injection de cette forme dans l'équation de transmission (2.3) nous donne :

$$\begin{aligned} \psi^{+}(r_{\perp}) &= e^{-\Sigma l(r_{\perp})} \psi^{-}(r_{\perp}) + \frac{1 - e^{-\Sigma l(r_{\perp})}}{\Sigma} Q \\ &= e^{-\Sigma l(r_{\perp})} \bar{\psi}^{-} + e^{-\Sigma l(r_{\perp})} r_{\perp} \psi_{\perp}^{-} + \frac{1 - e^{-\Sigma l(r_{\perp})}}{\Sigma} Q. \end{aligned}$$

Pour obtenir l'expression du flux de sortie ψ^{+} sous la forme linéaire 4.2, nous le projetons sur la base canonique des polynômes de degré inférieur ou égal à 1 :

$$\bar{\psi}^{+} = \langle \psi^{+}, 1 \rangle = \bar{\psi}^{-} M_0 + \psi_{\perp}^{-} M_1 + \frac{1 - M_0}{\Sigma} Q, \quad (4.3)$$

$$\psi_{\perp}^{+} = \langle \psi^{+}, r_{\perp} \rangle = \bar{\psi}^{-} M_1 + \psi_{\perp}^{-} M_2 + \frac{1 - M_1}{\Sigma} Q, \quad (4.4)$$

avec

$$M_i = \int_{r_{\perp}^{-}}^{r_{\perp}^{+}} dr_{\perp} e^{-\Sigma l(r_{\perp})} r_{\perp}^i, \quad \forall i \in \llbracket 0, 2 \rrbracket.$$

Il est intéressant de remarquer que M_0 correspond exactement au coefficient de transmission moyen T défini par l'équation (3.2).

De la même manière que pour l'établissement de la méthode des macrobandes (paragraphe 3.2.3), nous nous trouvons ici face à un choix concernant différentes méthodes d'évaluation des intégrales M_i .

II(a) Utilisation d'une formule de quadrature de Gauss-Legendre d'ordre n_G pour évaluer les intégrales M_i , $i \in \llbracket 0, 2 \rrbracket$ durant le balayage.

II(b) Utilisation d'un développement de Taylor similaire à (3.5) pour intégrer de manière semi-exacte les M_i , $i \in \llbracket 0, 2 \rrbracket$ au moment du traçage :

$$M_i = e^{-\Sigma \bar{l}} \left[1 + \sum_{p=1}^{n_T} M_{i,p} \Sigma_i^p \right], \quad \forall i \in \llbracket 0, 2 \rrbracket;$$

$$M_i^p = \frac{(-1)^p}{p! (r_{\perp}^+ - r_{\perp}^-)} \int_{r_{\perp} \in I_k} dr_{\perp} (l(r_{\perp}) - \bar{l})^p r_{\perp}^i, \quad \forall (i, p) \in \llbracket 0, 2 \rrbracket \times \llbracket 0, n_T \rrbracket.$$

II(c) Utilisation d'un développement de Taylor similaire à (3.5) pour intégrer de manière semi-exacte M_0 et M_1 au moment du traçage. Plutôt que d'utiliser l'équation (4.4), le coefficient M_2 n'est pas évalué et on assimile ψ_{\perp}^+ à un simple taux d'accroissement :

$$\psi_{\perp}^+ = \psi^+(r_{\perp}^+) - \psi^+(r_{\perp}^-).$$

Le tableau 4.1 présente une comparaison des complexités théoriques des différentes techniques utilisées. Le coût de la redistribution du flux aux interfaces n'y est pas mentionné. On y voit que la représentation linéaire n'est intéressante que si elle est couplée à un développement de Taylor pour les coefficients de transmission M_i . Par ailleurs, il faudrait un gain important en précision pour compenser les coûts additionnels non négligeables par rapport à la méthode traditionnelle de représentation transverse constante par morceaux.

Des études plus approfondies seraient nécessaires pour déterminer plus précisément les intérêts comparés de ces différentes techniques.

Redistribution du flux aux interfaces

Dans le cas de la représentation transverse linéaire du flux angulaire, il convient d'adapter aussi la formule de répartition du flux aux interfaces (3.4).

En reprenant la représentation linéaire (4.2) dans toutes les sous-bandes d'une section, nous obtenons :

$$\psi^{\pm} = \sum_k I_k^{\pm}(r_{\perp}) \left(\bar{\psi}_k^{\pm} + r_{\perp} \psi_{\perp,k}^{\pm} \right),$$

dans laquelle I_k^{\pm} est la fonction indicatrice de la k -ème maille transverse dans la section amont (-) ou aval (+).

Par projection du flux amont sur les fonctions linéaires par morceaux définies sur les

TAB. 4.1: Comparaison des complexités algorithmiques des différentes méthodes d'amélioration de la représentation transverse du flux angulaire :

- 0 – Méthode actuelle : représentation transverse constante.
- I – Valeur du flux aux points de Gauss.
- II(a) – Représentation linéaire ; Gauss-Legendre pour M_0, M_1 et M_2 .
- II(b) – Représentation linéaire ; Taylor pour M_0, M_1 et M_2 .
- II(c) – Représentation linéaire ; Taylor pour M_0, M_1 ; approx. pour ψ_{\perp}^+ .

| | mémoire (taille de traçage) | opérations |
|-------|---|--|
| 0 | 1 (longueur de corde au centre) | 1 exp. (balayage 2 mult. traditionnel) |
| I | n_G (longueurs de cordes) | n_G exp. (balayage $2 n_G$ mult. traditionnel) |
| II(a) | n_G (longueurs de cordes) | n_G exp. (reconstruction de $3(1 + n_G)$ mult. M_0, M_1, M_2) 6 mult. (balayage) |
| II(b) | 1 (longueur de corde moyenne \bar{l}) $3 n_T$ (coefficients M_i^k) | 1 exp. (reconstruction de $3(1 + n_T)$ mult. M_0, M_1, M_2) 6 mult. (balayage) |
| II(c) | 2 (longueurs de cordes extrêmes) $2 n_T$ (coefficients M_i^k) | 2 exp. (reconstruction de $2(1 + n_T)$ mult. M_0, M_1, ψ_{\perp}^+) 6 mult. (balayage) |

mailles aval, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 R_{k,k}^0 \bar{\psi}_k^+ &= \langle \psi^-, 1 \rangle = \int dr_{\perp} I_k^+(r_{\perp}) \psi^-(r_{\perp}) \\
 &= \sum_j \int dr_{\perp} I_j^-(r_{\perp}) I_k^+(r_{\perp}) (\bar{\psi}_j^- + r_{\perp} \psi_{\perp,j}^-) \\
 &= \sum_j R_{j,k}^0 \bar{\psi}_j^- + R_{j,k}^1 \psi_{\perp,j}^-
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{k,k}^2 \psi_{\perp,k}^+ &= \langle \psi^-, r_{\perp} \rangle = \int dr_{\perp} I_k^+(r_{\perp}) r_{\perp} \psi^-(r_{\perp}) \\
 &= \sum_j \int dr_{\perp} I_j^-(r_{\perp}) I_k^+(r_{\perp}) r_{\perp} (\bar{\psi}_j^- + r_{\perp} \psi_{\perp,j}^-) \\
 &= \sum_j R_{j,k}^1 \bar{\psi}_j^- + R_{j,k}^2 \psi_{\perp,j}^-
 \end{aligned}$$

où l'on a noté :

$$R_{j,k}^i = \int dr_{\perp} I_j^-(r_{\perp}) I_k^+(r_{\perp}) r_{\perp}^i.$$

Ceci nous permet, comme dans le cas de la représentation transverse constante par morceaux du flux angulaire, de déterminer des matrices de répartition aux interfaces entre deux sections.

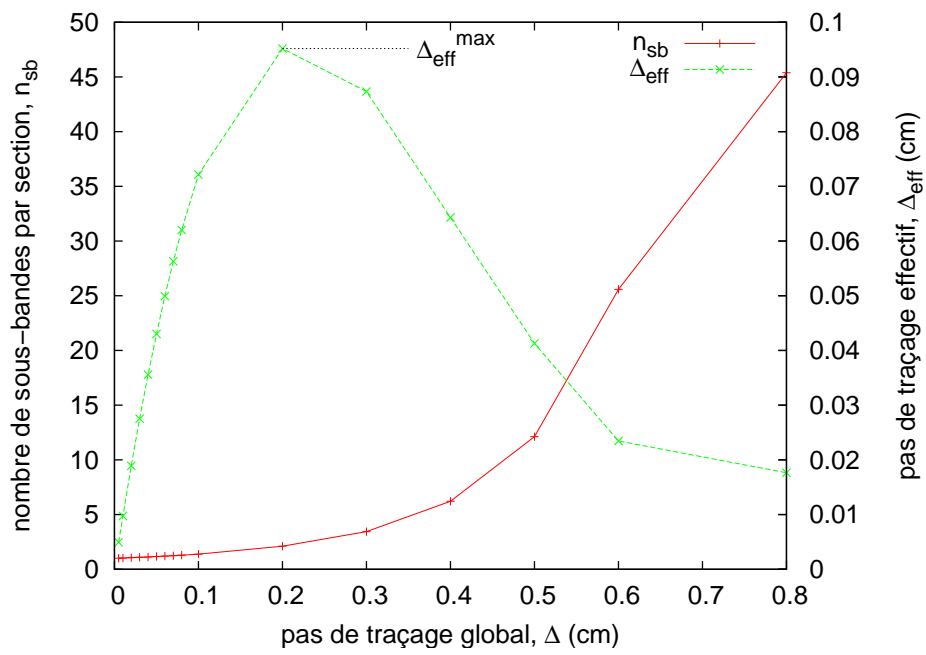


FIG. 4.6: Variations du pas de traçage effectif en fonction du pas de traçage global, pour la géométrie du huitième d'assemblage REP (fig. 4.5(a)).

Nous avons détaillé dans ce chapitre l'implémentation que nous avons faite de la méthode des macrobandes, ainsi que les résultats numériques obtenus.

L'observation d'une nette amélioration des propriétés de convergence avec la méthode des macrobandes suggère qu'elle parvient bien à capturer les discontinuités matérielles pour éliminer les oscillations. Par ailleurs, l'obtention d'un gain significatif de précision, à pas de traçage équivalent, confirme l'analyse faite dans le paragraphe 3.1 : la précision globale de la méthode des caractéristiques est limitée par celle de la méthode d'intégration transverse.

En revanche, il est assez surprenant de constater la faible importance de l'ordre du développement de Taylor utilisé pour évaluer la valeur du coefficient de transmission. La possibilité d'obtenir des résultats précis même avec un développement d'ordre 0 suggère que l'immense majorité des erreurs de l'intégration transverse provient de la mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles. Nous pouvons ainsi conclure a posteriori qu'il était inutile d'utiliser une équation de transmission améliorée.

Il s'agit ici d'un résultat très important, dans la mesure où il oriente la recherche d'une meilleure précision du côté du traçage plutôt que de celui du balayage. On peut imaginer le développement de nouvelles techniques de traçage, plus efficaces, visant exclusivement à prendre en compte les discontinuités matérielles, sans imposer de ralentissement au niveau du balayage.

Outre l'optimisation de l'implémentation de la redistribution du flux aux interfaces, il serait intéressant d'effectuer quelques études supplémentaires sur la méthode des macrobandes. En particulier, l'étude de l'impact d'une meilleure représentation des variations transverses du flux angulaire permettrait de cibler plus exactement encore l'origine des imperfections de la méthode d'intégration transverse traditionnelle.

Troisième partie

Traçage en géométries périodiques

Chapitre 5

Traçages périodiques

Le deuxième axe de travail que nous présentons ici concerne la taille de stockage nécessaire pour le traçage, lorsque le système contient un réseau de cellules géométriquement identiques.

Nous détaillons en premier lieu la problématique de construction d'un traçage en domaine périodique, en particulier en ce qui concerne les symétries à vérifier. Dans un second temps, nous proposons une méthode générale de traçage périodique, adaptée à toutes les géométries de réseau usuelles. Nous traitons aussi le cas des systèmes complexes, dans lesquels il est nécessaire de disposer d'une méthode de traçage permettant de traiter aussi bien les parties périodiques (comme par exemple un réseau d'assemblages) que les parties non périodiques (comme le réflecteur).

La plupart des réacteurs présentent une géométrie fortement périodique : le cœur du réacteur contient un réseau d'assemblages identiques du point de vue de leur géométrie. Ces assemblages eux-mêmes peuvent être composés d'un réseau périodique de cellules combustibles identiques. Dans ces conditions, on peut essayer de tirer parti des répétitions de la géométrie pour diminuer la taille de stockage nécessaire pour le traçage. L'enjeu est d'autant plus important que la taille du traçage devient un critère déterminant dans l'implémentation de la méthode des caractéristiques sur des géométries complexes, notamment en trois dimensions.

À notre connaissance, ce genre d'optimisation n'a pour l'instant pas été étudié en détails. Une implémentation de ce type de technique a été proposée dans des codes de transport neutronique comme CHAPLET [Kosaka et Saji, 2000] ou CASMO [Smith et Rhodes, 2002], mais sont très spécifiques aux réacteurs à eau légère actuels, en ne prenant en compte que des assemblages de forme carrée. Nous proposons ici une méthode de traçage générale, permettant de traiter toutes les formes de réseau habituelles (rectangle, carré ou hexagone).

Dans la suite de ce chapitre, le mot "cellule" sera utilisé pour désigner l'élément générateur du réseau périodique, qu'il s'agisse par exemple d'un assemblage ou d'une cellule combustible. À moins que cela ne soit spécifié explicitement, les réseaux que nous considérerons sont construits par translation.

5.1 Problématique du traçage en domaines périodiques

La problématique associée au traçage en géométries périodiques est la suivante : imaginons un réseau périodique infini de cellules identiques, aussi bien du point de vue géométrique que de celui des milieux les composant. Dans un tel système, le flux neutronique sera lui aussi périodique. Dans ce genre de cas, on ne résout donc le problème que sur une seule cellule, en utilisant des conditions aux limites adéquates (translation ou réflexion spéculaire) pour simuler la présence du reste du réseau. C'est par exemple ce qui est traditionnellement fait pour les calculs de transport neutronique sur les assemblages. En ce qui concerne la méthode des caractéristiques, ceci conduit à une technique de traçage particulière qui a fait l'objet du paragraphe 2.3.3.

Imaginons maintenant que la symétrie du réseau est brisée, soit par des conditions aux limites (le réseau n'est plus infini), soit par la présence de matériaux différents dans les cellules (par exemple, des assemblages identiques en termes de géométrie qui ont évolué différemment). Dans ce cas, la périodicité du flux est rompue. Il devient nécessaire d'effectuer le calcul sur l'intégralité du domaine. Pour autant, la géométrie du réseau continue de présenter des propriétés de périodicité ou de symétrie. Pour pouvoir profiter des redondances géométriques sans imposer d'approximations sur le flux, il nous faut donc découpler les deux notions. Au niveau structurel, ceci ne pose pas de problème particulier dans la méthode des caractéristiques : la représentation du flux est fondée sur la discrétisation du domaine en régions, alors que la description géométrique passe entièrement par la notion de traçage. Dans le cas qui nous occupe, il nous faut donc garder la même représentation du flux sur les régions, mais modifier le traçage de sorte qu'il permette la prise en compte de la périodicité du réseau.

On peut donc observer de nombreuses similitudes entre le traçage cyclique sur un domaine fermé et le traçage que nous tentons de construire sur un domaine périodique (quelles que soient ses conditions aux limites) :

- tous deux ont pour but de représenter, à l'aide d'un nombre fini de données, une trajectoire neutronique de grande taille ;
- tous deux ont un lien fort avec la modélisation de déplacements géométriques, sous la forme de conditions aux limites pour le traçage cyclique, et de structure du réseau

pour le traçage périodique.

Ainsi, il semble naturel d'utiliser pour un traçage en domaines périodiques le même type de techniques que pour un traçage cyclique : n'effectuer le traçage que pour une seule cellule du réseau, mais s'assurer que ce traçage contient toutes les informations nécessaires pour représenter une trajectoire globale sur le domaine géométrique complet. C'est l'approche que nous suivons dans la suite de ce chapitre.

5.1.1 Conditions aux limites homogènes avec la construction du réseau

Considérons dans un premier temps le cas extrêmement simple d'un réseau de cellules rectangulaires entouré de vide, comme celui de la figure 5.1. La seule différence entre un tel réseau et un réseau infini est la présence de conditions aux limites (1.2), de type dirichlet.

Essayons donc de traiter notre réseau fini de la même manière que le réseau infini : effectuons un traçage cyclique sur une cellule de base à laquelle sont ajoutées des conditions aux limites de translation (1.4) représentant l'influence du reste du réseau. Dans la suite, nous nous référerons à ce traçage cyclique sous l'appellation "traçage local", par opposition à un "traçage global" représentant les trajectoires neutroniques sur l'intégralité du domaine géométrique. Suivant la terminologie introduite au paragraphe 2.3.3, le traçage local agrège différentes trajectoires cycliques, elle-mêmes composées de plusieurs tronçons. Pour simplifier, nous ne nous intéresserons ici qu'à une seule trajectoire ; le traçage local est donc vu comme un ensemble de tronçons définis sur la cellule de base du réseau.

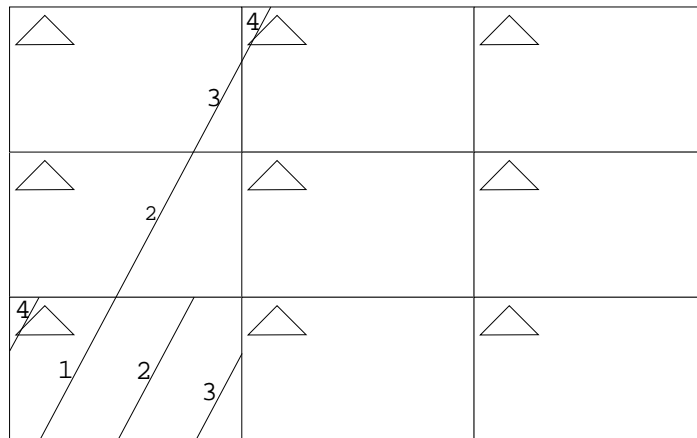


FIG. 5.1: Réseau par translation entouré de vide : le traçage cyclique local sur la cellule en bas à gauche contient tous les segments nécessaires pour reconstruire une trajectoire globale.

Considérons maintenant une trajectoire globale, traversant l'intégralité du domaine géométrique. Étant données les conditions aux limites ouvertes, cette trajectoire n'est composée que d'un tronçon. En revanche, ce tronçon peut être décomposé en une série de segments, définis comme les intersections de la trajectoire avec les différentes cellules du réseau. Comme chaque cellule du réseau est identique à la cellule de base, de même chaque segment de trajectoire sur une cellule quelconque est identique à un segment défini sur la cellule de base.

La méthode de construction du traçage local (cyclique) garantit que, pour toute trajectoire globale prolongeant un tronçon du traçage local, les différents segments globaux sont identiques à des tronçons présents dans le traçage local. Ainsi, dans ce cas, un simple traçage cyclique sur la cellule de base du réseau peut permettre de reconstruire un traçage global

sur l'intégralité du domaine. De fait, cette reconstruction est extrêmement simple, puisque le n -ème segment de la trajectoire globale correspond au n -ème tronçon de la trajectoire locale.

En étudiant la figure 5.2, on peut facilement se convaincre que ceci reste vrai dans le cas où les conditions aux limites au bord du réseau sont compatibles avec son mode de construction.

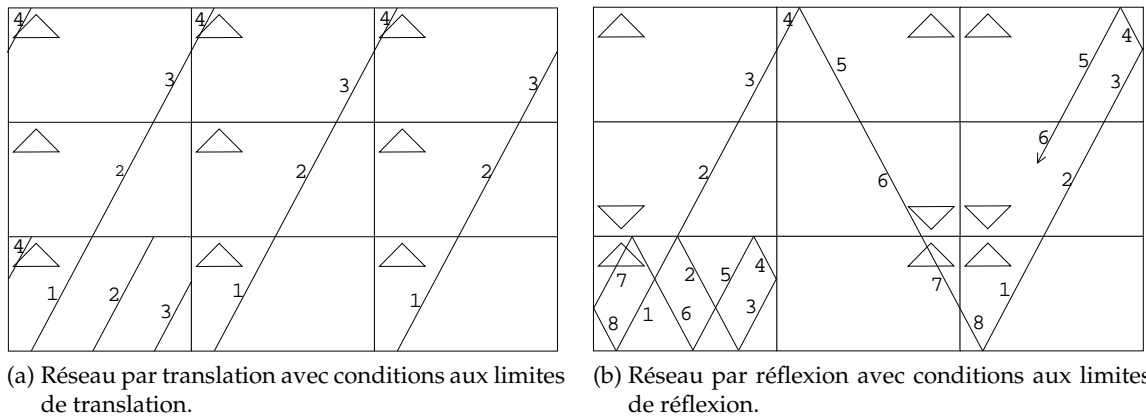


FIG. 5.2: Réseau avec conditions aux limites compatibles : un traçage cyclique sur la cellule en bas à gauche suffit pour reconstruire une trajectoire globale, même en prenant en compte les conditions aux limites. Les cellules sont marquées avec un triangle pour matérialiser leur orientation.

5.1.2 Conditions aux limites incompatibles avec le réseau

En revanche, il n'en va pas de même pour un réseau construit par translation et entouré de conditions aux limites de réflexion (ou *vice-versa*), comme celui de la figure 5.3. En effet, on constate très rapidement dans ce cas qu'une partie des segments nécessaires pour représenter une trajectoire globale n'est pas présente dans le traçage local. La figure 5.3 présente un traçage local effectué sur la cellule de base en utilisant les conditions aux limites de réflexion (i.e. les mêmes conditions aux limites que sur le domaine global). Si le traçage local avait été effectué en utilisant des conditions aux limites de translation (i.e. des conditions aux limites représentant la construction du réseau), la situation aurait été la même : certains segments de trajectoire globale n'auraient pas été représentés dans le traçage local. Même en combinant ces deux types de traçages locaux, il reste encore des segments globaux absents du traçage local.

Dans ce qui suit, nous nous intéressons donc aux conditions nécessaires pour que le traçage local sur la cellule de base contienne tous les segments nécessaires pour reconstruire une trajectoire globale. Un tel traçage local sera qualifié de "complet".

5.1.3 Domaines non entièrement périodiques

En pratique, de nombreux réacteurs présentent une géométrie constituée seulement en partie d'un réseau périodique. Les écarts par rapport à un système entièrement périodique peuvent être de deux types :

- un morceau de géométrie non-périodique : c'est le cas par exemple d'un réflecteur entourant le cœur d'un réacteur à eau légère ;

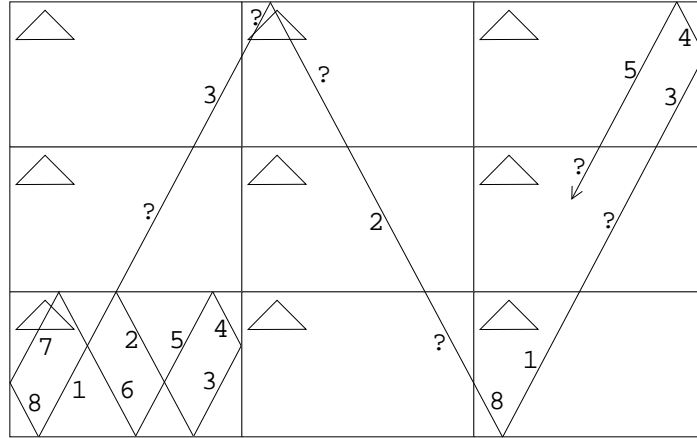


FIG. 5.3: Réseau par translation avec conditions aux limites de réflexion : le traçage cyclique (par réflexion) sur la cellule en bas à gauche ne contient pas tous les segments nécessaires pour reconstruire une trajectoire globale.

- quelques cellules différentes des autres : certains réacteurs sont construits comme des réseaux d’assemblages de même forme et dimension, mais de géométries internes non nécessairement identiques.

Le premier cas nécessite l’emploi d’une technique permettant de raccorder un traçage périodique avec un traçage traditionnel sur les parties non périodiques. Ainsi, on peut profiter des redondances géométriques dans le réseau tout en permettant le calcul des parties non périodiques.

Le deuxième cas est plus simple : il suffit de disposer d’un traçage local périodique pour chaque type de géométrie interne de cellule. Si tous les traçage locaux sont construits de la même manière, on peut les raccorder les uns aux autres de manière transparente, sans avoir besoin de connaître à l’avance les relations de voisinage entre un type de cellule et un autre.

5.2 Méthode générale de traçage périodique

Pour développer une méthode générale de traçage local périodique complet, il est naturel de considérer le cadre de la théorie des groupes. Ce formalisme, qui a déjà été utilisé dans des domaines aussi variés que la cristallographie ou la physique quantique [Tung, 1985; Steinberg, 1994], nous permettra d’étudier de manière rigoureuse les symétries du réseau global et leur répercussion sur le traçage local.

5.2.1 Analyse des symétries du traçage local

Notons \mathcal{C}_0 la cellule de base du réseau. Chaque cellule \mathcal{C} du réseau est construite en appliquant à \mathcal{C}_0 une translation, éventuellement composée avec une isométrie laissant \mathcal{C}_0 invariante (par exemple une rotation ou une réflexion). Notons \mathcal{G}_T le groupe des translations utilisées pour construire le réseau, \mathcal{G}_{int} le groupe des isométries correspondant aux symétries internes de la forme de la cellule \mathcal{C}_0 , et \mathcal{G} le groupe généré par leur union :

$$\mathcal{G} = \langle \mathcal{G}_T \cup \mathcal{G}_{int} \rangle.$$

Les conditions aux limites sont définies par une isométrie m_b rendant le réseau invariant. Comme m_b transforme \mathcal{C}_0 en une autre cellule du réseau, on peut nécessairement décompo-

ser m_b de la manière suivante :

$$\exists(t, m_b^{loc}) \in (\mathcal{G}_T, \mathcal{G}_{int}); \quad m_b \mathcal{C}_0 = t \circ m_b^{loc} \mathcal{C}_0.$$

Soit \mathcal{T} une trajectoire globale sur le réseau; ses segments sont ses intersections avec les cellules du réseau. Chaque cellule du réseau étant identique aux autres, nous pouvons définir une relation d'équivalence sur les segments :

$$\begin{aligned} \mathcal{T} \cap \mathcal{C} \equiv \mathcal{T}' \cap \mathcal{C}' \quad \text{si et seulement si} \\ \exists m \in \mathcal{G}; \mathcal{C} = m \mathcal{C}' \text{ et } \mathcal{T} = m \mathcal{T}', \end{aligned} \quad (5.1)$$

où \mathcal{T} et \mathcal{T}' sont deux trajectoires, et \mathcal{C} et \mathcal{C}' deux cellules du réseau traversées par ces trajectoires.

Invariance par translation

Supposons dans un premier temps un réseau \mathcal{L}_∞ infini et construit uniquement avec des translations (i.e. $\mathcal{G}_{int} = \{I\}$). Considérons une trajectoire \mathcal{T} , et intéressons nous à l'ensemble de ses intersections avec les cellules du réseau :

$$\forall t \in \mathcal{G}_T, \begin{cases} t \mathcal{C}_0 \in \mathcal{L}_\infty, \\ \mathcal{T} \cap (t \mathcal{C}_0) \equiv (t^{-1} \mathcal{T}) \cap \mathcal{C}_0. \end{cases}$$

Pour que le traçage local sur \mathcal{C}_0 puisse représenter la trajectoire \mathcal{T} , et donc *a fortiori* pour qu'il soit complet, il doit donc contenir l'ensemble des intersections de \mathcal{C}_0 avec l'orbite de \mathcal{T} par l'action du groupe \mathcal{G}_T :

$$\mathcal{G}_T \mathcal{T} = \{t \mathcal{T}; t \in \mathcal{G}_T\}$$

De plus, la condition de cyclicité des trajectoires locales impose que la direction de \mathcal{T} soit définie par l'une des translations de \mathcal{G}_T [Sanchez *et al.*, 2002]. Dans ce cas, on peut montrer que $\mathcal{G}_T \mathcal{T}$ peut aussi être obtenu par l'action du groupe engendré par une seule translation t_0 :

$$\exists t_0 \in \mathcal{G}_T; \quad \mathcal{G}_T \mathcal{T} = \{t_0^i \mathcal{T}; i \in \mathbb{Z}\}.$$

$\mathcal{G}_T \mathcal{T}$ est donc un réseau de droites parallèles, séparées par une distance constante :

$$\Delta_{\vec{\Omega}} = \vec{t}_0 \cdot \vec{\Omega}_\perp, \quad (5.2)$$

où nous avons noté \vec{t}_0 le vecteur associé à la translation t_0 .

5.2.2 Invariance par symétries internes

Considérons maintenant le cas général d'un réseau \mathcal{L} possédant des conditions aux limites et des irrégularités (i.e. des cellules obtenues à partir de \mathcal{C}_0 par translation et application d'une isométrie de \mathcal{G}_{int}). Étudions une trajectoire globale \mathcal{T} sur ce réseau :

$$\forall(t, m) \in \mathcal{G}_T \times \mathcal{G}_{int}, \begin{cases} t \circ m \mathcal{C}_0 \in \mathcal{L}_\infty, \\ \mathcal{T} \cap (t \circ m \mathcal{C}_0) \equiv (m^{-1} \circ t^{-1} \mathcal{T}) \cap \mathcal{C}_0. \end{cases}$$

En plus d'être invariant par l'action du groupe \mathcal{G}_T , un traçage complet doit aussi être invariant par l'action du groupe \mathcal{G}_{int} , c'est à dire qu'un traçage local complet doit être stable par l'action du groupe \mathcal{G} .

En conclusion, un traçage local complet est donc nécessairement l'intersection de la cellule \mathcal{C}_0 avec un ensemble de lignes droites, stable par la translation t_0 ainsi que par les transformations de \mathcal{G}_{int} . Il est intéressant de remarquer que cette dernière contrainte impose aussi la stabilité de la formule de quadrature angulaire par l'action de \mathcal{G}_{int} . En effet, la présence d'un segment de direction $\vec{\Omega}$ dans le traçage local entraîne également celle de segments de direction $m\vec{\Omega}$, avec $m \in \mathcal{G}_{int}$.

5.2.3 Construction d'un traçage périodique complet

Un tel traçage local complet n'est pas nécessairement facile à construire en raison de la multiplicité des symétries internes à assurer (six rotations et six réflexions pour l'hexagone, par exemple).

Une méthode simple pourrait consister à déterminer un premier traçage cyclique sur la cellule de base, puis à le compléter avec son orbite par l'action du groupe \mathcal{G} (figure 5.4). C'est l'approche utilisée par la méthode DNPL (*Direct Neutron Path Linking Technique*, Kosaka et Saji [2000]). L'inconvénient majeur de cette technique réside dans le fait que nous n'exerçons aucun contrôle sur le traçage qui en résultera :

- Nous ne maîtrisons pas le nombre de tronçons du traçage local, qui dépend à la fois du nombre de symétries internes à vérifier et des éventuelles propriétés de symétrie déjà présentées par le traçage cyclique local. Par exemple, on peut remarquer sur la figure 5.4 que le traçage cyclique initial est déjà symétrique par rapport au centre de la cellule. Ses images par les deux réflexions de \mathcal{G}_{int} sont donc identiques, ce qui restreint le nombre de segments du traçage local complet généré.
- Pour un pas de traçage quelconque, il n'y a aucune raison que les images du traçage cyclique initial se complètent pour générer un traçage local à pas constant. Ceci conduit à une couverture non uniforme du domaine géométrique, comme nous le constatons sur les figure 5.4 et 5.5. Pour utiliser efficacement type de méthode de construction, il est donc nécessaire de disposer d'une technique permettant de déterminer un pas de traçage optimal générant un traçage local à pas constant.

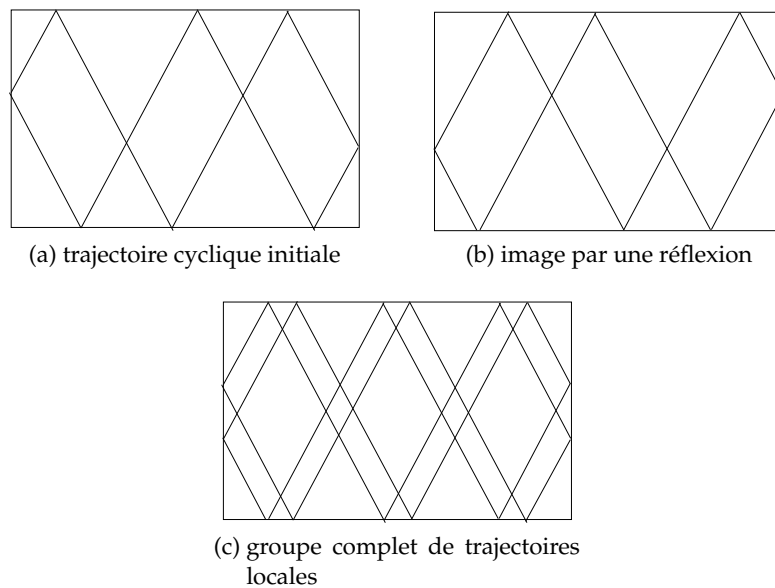


FIG. 5.4: Construction incrémentale d'un traçage local complet : un traçage cyclique initial (a) est construit, puis est combiné avec ses images (b) par les différentes transformations de \mathcal{G}_{int} , pour donner un traçage local complet (c).

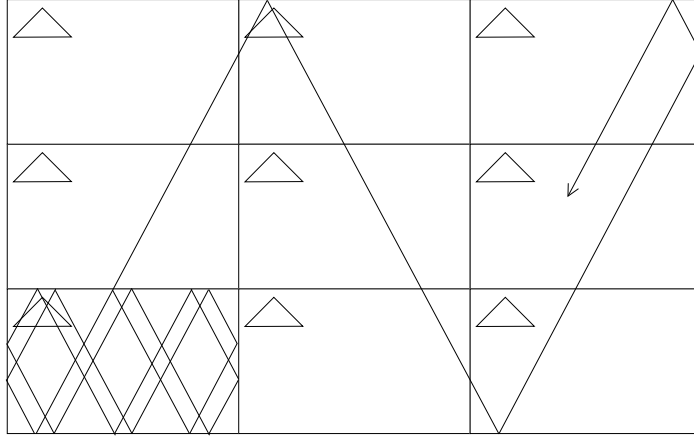


FIG. 5.5: Réseau par translation entouré de conditions aux limites de réflexion spéculaire. Le traçage local sur la cellule en bas à gauche est complet, mais présente une distance de séparation non uniforme entre les segments parallèles consécutifs.

Nous proposons ici une méthode permettant de construire un traçage complet à pas régulier entre les segments de même direction. Nous avons besoin de l'hypothèse supplémentaire que toutes les isométries de \mathcal{G}_{int} possèdent un point invariant O commun. Bien qu'il s'agisse en théorie d'une lourde perte de généralité, cette propriété est en pratique toujours vérifiée pour les géométries couramment utilisées : rectangle, carré et hexagone.

Considérons une formule de quadrature angulaire vérifiant les symétries imposées par les transformations de \mathcal{G}_{int} . Plaçons nous sur un axe passant par O , de direction $\vec{\Omega}_0$ distincte de celles apparaissant dans la formule de quadrature angulaire. Nous pouvons définir sur cet axe une abscisse, notée x et comptée à partir de l'origine O . Pour chaque direction $\vec{\Omega}$ de la formule de quadrature nous traçons les segments de trajectoire d'origines

$$x_{\vec{\Omega},i}^{\pm} = \pm \left(i + \frac{1}{2}\right) \frac{\Delta x_0}{k}, \quad i \in \llbracket -I, I \rrbracket,$$

où Δx_0 est la composante du vecteur \vec{t}_0 selon la direction $\vec{\Omega}_0$, avec les notations de la formule (5.2) :

$$\Delta x_0 = \vec{t}_0 \cdot \vec{\Omega}_0 = \frac{\Delta_{\vec{\Omega}}}{\vec{\Omega}_{\perp} \cdot \vec{\Omega}_0}.$$

Dans cette formule, k est un entier choisi par l'utilisateur pour ajuster le pas de traçage et permettre la convergence géométrique de la méthode. I est la borne au delà de laquelle les trajectoires tracées n'entrent plus en intersection avec la cellule :

$$I = \left\lceil \frac{l(P_0(C_0))}{2 \Delta_{x_0}} \right\rceil,$$

où $l(P_0(C_0))$ est la longueur de la projection de la cellule de base C_0 sur l'axe $(O, \vec{\Omega}_0)$.

Comme le montre la figure 5.6 à l'aide du théorème de Thalès, le traçage ainsi obtenu ne dépend pas de la direction $\vec{\Omega}_0$ choisie pour l'axe des abscisses.

Ce traçage vérifie clairement par construction les propriétés d'invariance par les translations de \mathcal{G}_T .

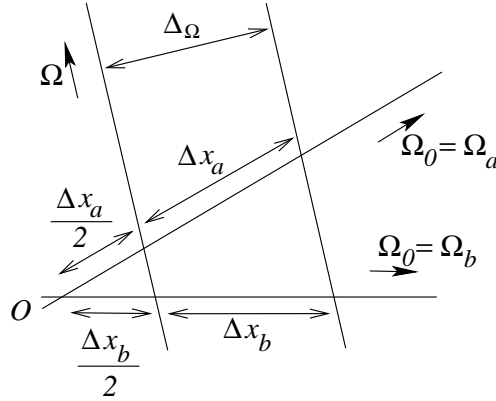


FIG. 5.6: Indépendance du traçage par rapport au choix de l'axe des abscisses : le théorème de Thalès montre que quelle que soit la direction $\vec{\Omega}_a$ ou $\vec{\Omega}_b$ choisie pour l'axe passant par O , les segments obtenus sont toujours les mêmes.

Vérifions maintenant son invariance par les isométries de \mathcal{G}_{int} : soient m et $\vec{\Omega}$ respectivement une isométrie de \mathcal{G}_{int} et une direction de la formule de quadrature angulaire. Soit $(O, \vec{\Omega}_0)$ un axe dont la direction n'appartient pas à la quadrature angulaire. Considérons un segment du traçage, de direction $\vec{\Omega}$ et issu de l'abscisse x sur l'axe $(O, \vec{\Omega}_0)$. Comme les isométries conservent l'alignement des points, son image par m est encore un segment, de direction $\vec{\Omega}' = m\vec{\Omega}$, et issu de l'abscisse x sur l'axe $(O, m\vec{\Omega}_0)$ image de $(O, \vec{\Omega}_0)$ par m . La formule de quadrature vérifiant les symétries imposées par m , la direction $\vec{\Omega}'$ est aussi présente dans la formule de quadrature. De plus le réseau est invariant par m , donc la distance inter-trajectoires est la même pour les directions $\vec{\Omega}$ et $\vec{\Omega}'$: $\Delta_{\vec{\Omega}} = \Delta_{\vec{\Omega}'}$. L'abscisse x sur l'axe $(O, m\vec{\Omega}_0)$ correspond donc nécessairement à l'origine d'un segment du traçage.

Finalement le traçage ainsi construit est invariant par l'action du groupe \mathcal{G} , et est de ce fait complet pour la formule de quadrature choisie.

5.2.4 Reconstruction du traçage global et interfaces avec les parties non périodiques de la géométrie

Une fois que le traçage local complet est déterminé, on peut penser à diverses méthodes pour reconstruire le traçage global. Il est important de garder à l'esprit que cette reconstruction sera effectuée durant le balayage, et doit donc être aussi peu coûteuse que possible pour éviter un ralentissement trop important du calcul.

Le problème est de déterminer, à chaque entrée dans une cellule, le segment du traçage local qui doit être balayé. Ce choix peut être effectué en fonction de diverses informations, principalement :

- les coordonnées du point où on se trouve et la direction dans laquelle on avance ;
- le segment local qui vient d'être balayé ;
- le type de surface qu'on vient de franchir (interface entre deux cellules du réseau, ou condition aux limites globale) ;
- dans le cas d'une interface entre deux cellules, l'orientation des éléments surfaciques.

Numérotation des segments du traçage local

Une première technique pourrait consister à numéroter intelligemment les segments du traçage local, de sorte que le passage d'une cellule à une autre à l'intérieur du réseau ne

correspondre qu'au passage d'un tronçon au suivant dans le traçage local. Dans ce cas, il est nécessaire de traiter les conditions aux limites de manière spécifique, en maintenant à jour une table de correspondance indiquant, pour chaque segment local et chaque condition aux limites, le segment local suivant à balayer.

Il s'agit là d'une technique extrêmement rapide, nécessitant à la fois peu de ressources de calcul et peu de stockage supplémentaire (seule une petite table doit être stockée). En revanche, ce genre de méthode doit être implémentée spécifiquement pour chaque forme de réseau et chaque type de conditions aux limites. De plus, il est relativement complexe d'étendre ce type de technique à des cas où la géométrie contient des parties non périodiques.

En termes de conception logicielle, l'un des inconvénients majeurs est que la logique de traitement de la géométrie (conditions aux limites, parties périodiques et non périodiques), traditionnellement entièrement effectuée durant le traçage, est maintenant en partie déléguée au balayage.

Macro-traçage

Pour pallier ces difficultés, nous proposons ici une méthode permettant de traiter de manière générale différents types de réseaux et de conditions aux limites, ainsi que de permettre un traitement "transparent" des interfaces entre réseau périodique et parties non périodiques du domaine géométrique. Cette technique est fondée sur l'utilisation d'un macro-traçage.

Le macro-traçage n'est en réalité rien d'autre qu'un traçage global sur la géométrie (figure 5.7). Dans les parties non périodiques, ce traçage est strictement identique à un traçage conventionnel : il permet de stocker les régions traversées et longueurs de cordes associées. Dans la partie périodique, le macro-traçage ne contient que la liste des cellules interceptées, et pour chacune d'elle un pointeur permettant d'accéder au segment correspondant du traçage local.

Ainsi, au prix d'un certain espace de stockage supplémentaire, cette technique permet d'avoir un algorithme de balayage peu coûteux et totalement indépendant de la géométrie du réseau ainsi que des conditions aux limites.

5.3 Application aux réseaux habituels

5.3.1 Réseaux rectangulaires

Cas général

On considère un réseau construit à partir de cellules rectangulaires de longueurs a et b . On se place dans un repère (O, x, y) tel que la cellule de base C_0 soit centrée en O et orientée suivant les axes (O, \vec{e}_x) (côté de longueur a) et (O, \vec{e}_y) (côté de longueur b). Le groupe de translations utilisé pour construire le réseau est :

$$\mathcal{G}_T = \{t_{n,m} ; (n, m) \in \mathbb{Z}^2\},$$

avec

$$t_{n,m} \vec{r} = \vec{r} + n a \vec{e}_x + m b \vec{e}_y.$$

La cellule de base possède comme symétries internes les deux réflexions R_x et R_y d'axes respectifs (O, \vec{e}_x) et (O, \vec{e}_y) . Le groupe des symétries internes est donc

$$\mathcal{G}_{int} = \{R_x, R_y, R_x \circ R_y\}.$$

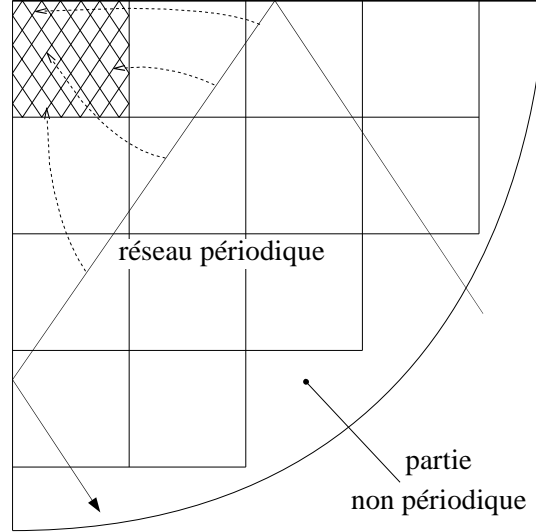


FIG. 5.7: Macro-trajectoire dans un domaine non entièrement périodique : le traçage est conventionnel dans les parties non périodiques ; dans le réseau périodique, on ne fait que pointer vers un segment du traçage local.

Le point O reste invariant par toutes ces transformations ; la méthode précédemment décrite peut donc s'appliquer.

D'après Sanchez *et al.* [2002], les trajectoires cycliques sur \mathcal{C}_0 sont obtenues avec les directions données par les angles $\phi_{n,m}$ associés aux translations $t_{n,m}$ de \mathcal{G}_T :

$$\tan \phi_{n,m} = \frac{m b}{n a};$$

les distances de séparation associées sont données par

$$\Delta_{\perp}^{n,m} = \frac{a}{|m|} |\sin \phi_{n,m}|$$

Pour chaque angle $\phi_{n,m}$ présent dans la formule de quadrature, celle-ci doit aussi contenir l'angle $\pi - \phi_{n,m}$ pour vérifier les symétries de \mathcal{G}_{int} . Cette condition est, de fait, automatiquement réalisée, étant donné que $\pi - \phi_{n,m}$ est l'angle associé à la translation $t_{-n,m}$. De plus, les distances inter-trajectoires associées à ces deux angles sont égales :

$$\begin{aligned} \pi - \phi_{n,m} &= \phi_{-n,m}, \\ \Delta_{\perp}^{n,m} &= \Delta_{\perp}^{-n,m}. \end{aligned}$$

Choisissons comme base de traçage l'axe (O, \vec{e}_x) ; on a alors :

$$\Delta_x^{n,m} = \frac{\Delta_{\perp}^{n,m}}{|\sin \phi_{n,m}|} = \frac{a}{|m|}$$

Le traçage local complet, invariant par toutes les transformations de \mathcal{G} , est obtenu en traçant les segments issus des abscisses

$$x_{i,n,m,k}^{\pm} = \pm \left(i + \frac{1}{2}\right) \frac{a}{k |m|},$$

dans les directions $\phi_{n,m}$ et $\pi - \phi_{n,m}$. La figure 5.8 montre l'exemple d'un tel traçage, pour les angles associés à $(n, m) = (1, 3)$, et dans lequel le pas de traçage a été divisé par $k = 2$. On peut noter l'extrême régularité du traçage obtenu, par exemple par rapport au traçage local présenté sur la figure 5.5.

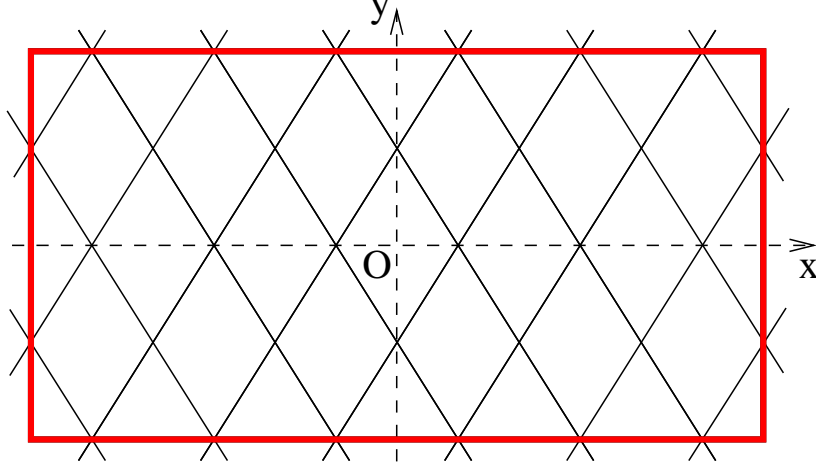


FIG. 5.8: Traçage modulaire sur un réseau rectangulaire : exemple de traçage symétrique par rapport aux axes (O, \vec{e}_x) et (O, \vec{e}_y) , pour les angles associés à $(n, m) = (1, 3)$ et en divisant le pas de traçage par un facteur $k = 2$.

Le choix d'un angle associé à $(n, m) = (2, 3)$ et d'un diviseur $k = 1$ fait cependant apparaître un léger problème (fig. 5.9) : certains segments passent par les sommets du rectangle, qui sont des points singuliers conduisant à des longueurs de corde nulles. Cherchons à déterminer quand ce problème survient pour un pas de traçage non modifié (*i.e.* un facteur $k = 1$). Les angles 0 et $\frac{\pi}{2}$ n'apparaissant pas dans la formule de quadrature, nous pouvons exprimer l'abscisse x d'un point sur un segment en fonction de son ordonnée y :

$$\begin{aligned} x_{i,n,m}(y) &= x_{i,n,m}(0) + \frac{y}{\tan \phi_{n,m}} \\ &= \pm \left(i + \frac{1}{2} \right) \frac{a}{|m|} + \frac{n a y}{m b}, \\ x_{i,n,m}\left(\frac{b}{2}\right) &= \left[\pm \operatorname{sgn}(m) \left(i + \frac{1}{2} \right) + \frac{n}{2} \right] \frac{a}{m}. \end{aligned}$$

Le segment d'origine x_i^\pm passe par le sommet $(\frac{a}{2}, \frac{b}{2})$ du rectangle si et seulement si :

$$\begin{aligned} \frac{a}{2} &= \left[\pm \operatorname{sgn}(m) \left(i + \frac{1}{2} \right) + \frac{n}{2} \right] \frac{a}{m}, \\ \text{i.e.} \quad \pm m &= \operatorname{sgn}(m) (2i + 1) + n, \end{aligned}$$

ce qui ne peut se vérifier que si m et n sont de parités différentes.

Dans ce cas, il est possible d'obtenir un traçage local complet en traçant les segments issus de

$$\hat{x}_{i,n,m}^\pm = \pm i \frac{a}{|m|}.$$

Cependant, dans ce cas, certaines trajectoires passent par le centre de la cellule, ce qui peut poser problème pour le traitement des conditions aux limites (par exemple dans le cas où une moitié de cellule se trouve sur le bord du domaine, figure 5.10).

Une autre solution consiste à imposer que la distance inter-trajectoires $\Delta_x^{n,m}$ soit divisée par un facteur k pair. Ceci revient à considérer que l'angle $\phi_{n,m}$ est aussi donné par le couple (kn, km) . Cette dernière solution est plus souhaitable puisqu'elle permet d'éviter à la fois le passage des segments aux sommets du rectangle et en son centre.

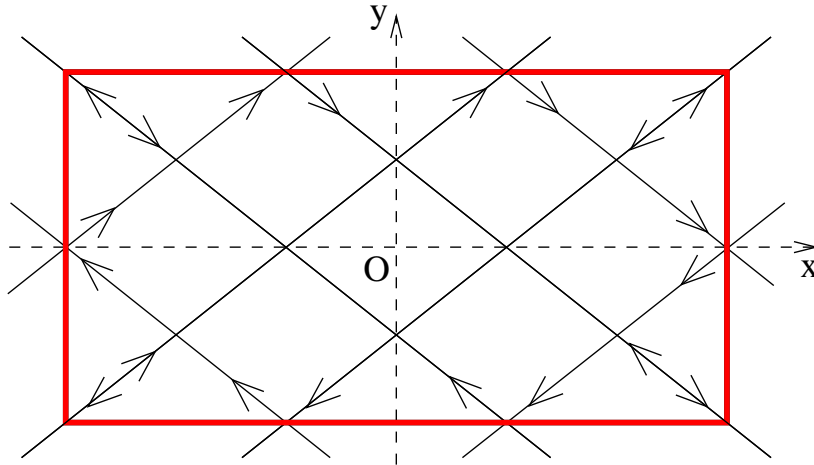


FIG. 5.9: Traçage modulaire sur un réseau rectangulaire : exemple de traçage symétrique par rapport aux axes (O, \vec{e}_x) et (O, \vec{e}_y) , pour les angles associés à $(n, m) = (2, 3)$ et le pas de traçage maximal (*i.e.* $k = 1$). Les segments de trajectoire passant par les sommets de la cellule sont leur propre image par la transformation associée aux conditions aux limites.

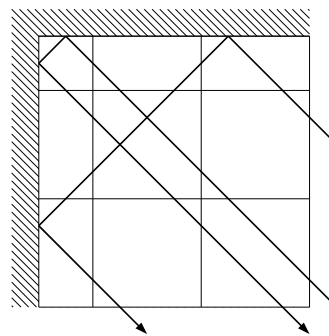


FIG. 5.10: Cellules non entières sur les bords du domaine : lorsque les cellules possèdent une géométrie interne symétrique, les conditions aux limites peuvent être placées sur les axes de symétrie de la cellule, plutôt que sur sa frontière. On obtient ainsi des systèmes dans lesquels des demi-cellules ou des quarts de cellules se trouvent sur les bords

Réseau carré

Dans le cas particulier du réseau carré (de côté a), la cellule possède en plus une symétrie interne par rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$:

$$\mathcal{S}_{int} = \left\{ R_x, R_y, r_{\frac{\pi}{2}} \right\}$$

$$\mathcal{G}_{int} = \langle \mathcal{S}_{int} \rangle.$$

Les symétries imposées sur la formule de quadrature sont donc plus complexes que dans le cas du rectangle : pour chaque angle $\phi_{n,m}$ présent dans la formule de quadrature, les angles suivants doivent aussi y figurer :

$$\pi - \phi_{n,m} = \phi_{-n,m},$$

$$\frac{\pi}{2} + \phi_{n,m} = \phi_{-m,n},$$

$$\frac{\pi}{2} - \phi = \phi_{m,n}.$$

La construction du traçage comme précédemment aboutit à un traçage vérifiant non seulement les symétries par rapport aux axes (O, \vec{e}_x) et (O, \vec{e}_y) , mais aussi l'invariance par rotation d'angle multiple de $\frac{\pi}{2}$ (figure 5.11).

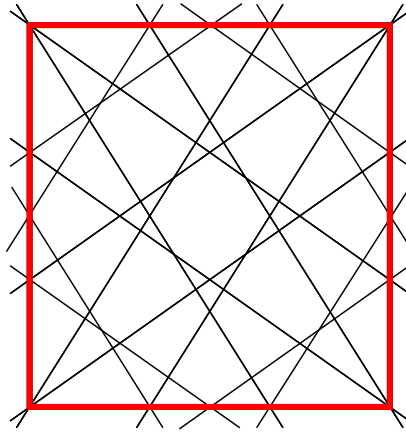


FIG. 5.11: Traçage modulaire sur un réseau carré : exemple de traçage symétrique par rapport aux axes (O, \vec{e}_x) et (O, \vec{e}_y) et invariant par rotation d'angle $\frac{k\pi}{2}$. Les angles associés à $(n, m) = (1, 3)$ sont représentés, avec un pas de traçage divisé par un facteur $k = 1$.

5.3.2 Réseaux hexagonaux

On considère dans cette partie un réseau construit à partir d'une cellule hexagonale régulière de côté a . On se place dans un repère orthonormal $(0, \vec{e}_x, \vec{e}_y)$ centré sur la cellule de base \mathcal{C}_0 . Le groupe de translations permettant de construire le réseau est

$$\mathcal{G}_T = \{ t_{n,m} ; (n, m) \in \mathbb{Z}^2 \},$$

avec

$$t_{n,m} \vec{r} = \vec{r} + \sqrt{3} a (n \vec{e}_d + m \vec{e}_y),$$

$$\vec{e}_d = \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{e}_x + \frac{1}{2} \vec{e}_y.$$

Le groupe des symétries internes est engendré par les réflexions R_y et R_d , d'axes respectifs $(0, \vec{e}_x)$ et $(0, \vec{e}_d)$, ainsi que par les rotations d'angle multiple de $\frac{\pi}{3}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{int} &= \left\{ R_y, R_d, r_{\frac{\pi}{3}} \right\} \\ \mathcal{G}_{int} &= \langle \mathcal{S}_{int} \rangle.\end{aligned}$$

Comme précédemment, le point O est invariant par toutes les symétries internes de la cellule de base et peut donc être utilisé pour construire un traçage complet.

Comme dans le cas du rectangle, les directions conduisant à des tracés cycliques sur la cellule sont données par les angles associés aux translations de \mathcal{G}_T :

$$\tan \phi_{n,m} = \frac{2m+n}{\sqrt{3}n}$$

et les distances inter-trajectoires sont données par :

$$\Delta_{\perp}^{n,m} = \frac{\sqrt{3}a}{|n|} |\cos \phi_{n,m}|$$

Pour vérifier les symétries imposées par les réflexions et rotations de \mathcal{G}_{int} , pour chaque angle $\phi_{n,m}$ de la formule de quadrature, celle-ci doit aussi contenir les angles suivants :

$$\begin{aligned}\frac{\pi}{3} - \phi_{n,m} &= \phi_{m+n,-m} \\ \frac{2\pi}{3} - \phi_{n,m} &= \phi_{m,n} \\ \pi - \phi_{n,m} &= \phi_{-n,m+n} \\ \frac{\pi}{3} + \phi_{n,m} &= \phi_{-m,m+n} \\ \frac{2\pi}{3} + \phi_{n,m} &= \phi_{-n-m,n}\end{aligned}$$

Choisissons l'axe (O, \vec{e}_x) comme base de traçage pour les angles $\phi_{n,m}$ et $\pi - \phi_{n,m}$, qui ont le même intervalle de traçage :

$$\begin{aligned}\Delta_x^{n,m} &= \frac{\Delta_{\perp}}{|\sin \phi|} = \frac{\sqrt{3}a}{|n|} \left| \frac{1}{\tan \phi} \right| = \frac{3a}{|2m+n|}, \\ x_{i,n,m,k}^{\pm} &= \pm \left(i + \frac{1}{2} \right) \frac{3a}{k|2m+n|}.\end{aligned}$$

Nous pourrions continuer à utiliser l'axe (O, \vec{e}_x) pour tracer les autres angles, mais ceci nécessiterait d'utiliser d'autres intervalles de traçage. Nous pouvons à la place tracer les angles $\frac{\pi}{3} + \phi_{n,m}$ et $\frac{\pi}{3} - \phi_{n,m}$ avec le même intervalle $\Delta_x^{n,m}$, mais sur l'axe $(O, \vec{e}_{\frac{\pi}{3}})$. De même, les angles $\frac{2\pi}{3} + \phi_{n,m}$ et $\frac{2\pi}{3} - \phi_{n,m}$ peuvent être tracés avec toujours le même intervalle, mais sur l'axe $(O, \vec{e}_{\frac{2\pi}{3}})$. Nous avons noté ici \vec{e}_{θ} le vecteur unitaire dans la direction donnée par l'angle θ .

La figure 5.12 présente un exemple de traçage obtenu avec cette méthode sur un hexagone avec les angles associés à $(n, m) = (1, 3)$, en divisant le pas de traçage par un facteur $k = 2$.

De la même manière que dans le cas du rectangle, cherchons s'il est possible que les segments ainsi tracés passent par les sommets de l'hexagone, dans le cas où le pas de traçage

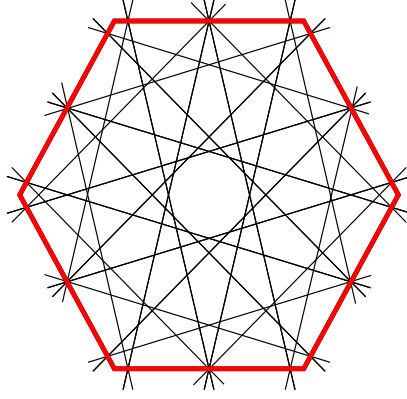


FIG. 5.12: Traçage modulaire sur un réseau hexagonal :
 exemple de traçage symétrique par rapport aux axes (O, \vec{e}_y) et (O, \vec{e}_d) et invariant
 par rotation d'angle $\frac{k\pi}{3}$. Les angles associés à $(n, m) = (1, 3)$ sont représentés,
 avec un pas de traçage divisé par un facteur $k = 2$.

n'est pas modifié ($k = 1$) :

$$x_{i,n,m}^{\pm}(y) = \pm \left(i + \frac{1}{2} \right) \frac{3a}{|2m+n|} + \frac{\sqrt{3}ny}{2m+n},$$

$$x_{i,n,m}^{\pm}\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\right) = \left[\pm \operatorname{sgn}(2m+n) \left(i + \frac{1}{2} \right) + \frac{n}{2} \right] \frac{3a}{2m+n}.$$

Le segment d'origine $x_{i,n,m}^{\pm}$ passe par le sommet $\left(\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2}\right)$ de l'hexagone si et seulement si :

$$\frac{a}{2} = \left[\pm \operatorname{sgn}(2m+n) \left(i + \frac{1}{2} \right) + \frac{n}{2} \right] \frac{3a}{2m+n}$$

$$\text{i.e.} \quad 2m = \pm \operatorname{sgn}(2m+n) (6i+3) + 2n$$

ce qui ne peut jamais se vérifier puisque les deux termes de l'égalité ci-dessus ne sont pas de même parité. Étant données les symétries du problème, l'étude de ce seul sommet suffit pour conclure que, contrairement au cas du rectangle, il n'y a jamais de problème de trajectoire passant par un sommet de l'hexagone.

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés aux problématiques liées au traçage en géométries périodiques. L'objectif était d'effectuer un traçage local uniquement sur une cellule, et de reconstruire les trajectoires globales sur tout le domaine uniquement à partir de segments provenant du traçage local.

Nous avons analysé plusieurs points importants en ce qui concerne l'élaboration du traçage local :

- le traçage local doit vérifier toutes les propriétés de symétrie imposées par les conditions aux limites, la méthode de construction du réseau périodique, et les symétries internes de la forme de la cellule ;*
- la construction directe d'un tel traçage local conduit à une répartition non homogène des trajectoires globales dans le système, ce qui n'est pas optimal pour la qualité des résultats.*

La méthode de construction du traçage local que nous proposons permet de vérifier toutes les contraintes nécessaires, tout en garantissant l'obtention d'un traçage à pas constant pour les trajectoires globales. De plus, notre méthode est très générale, et peut s'appliquer à toutes les formes de réseaux couramment utilisées dans les réacteurs actuels : carré, rectangulaire ou hexagonal.

En ce qui concerne la reconstruction des trajectoires globales, nous proposons une technique de macro-traçage, qui permet de traiter indifféremment le balayage dans le réseau périodique et dans les parties non périodiques de la géométrie, comme par exemple un réflecteur. Ceci est fait au prix d'un léger coût de stockage supplémentaire.

Nous discutons dans le chapitre prochain l'introduction de cette méthode au sein du solveur TDT, ainsi que les résultats numériques que nous obtenons avec notre implémentation.

Chapitre 6

Résultats numériques pour le traçage périodique

Nous nous intéressons ici à tous les aspects relatifs à l'implémentation de la technique de traçage périodique dans le solveur TDT.

Nous présentons brièvement les points essentiels de l'implémentation, en insistant sur les quelques différences avec les algorithmes décrits dans le chapitre précédent. Nous nous intéressons ensuite aux résultats numériques obtenus sur quelques cas tests, ce qui nous permettra de quantifier les gains proposés par la méthode de traçage périodique. Nous présentons enfin quelques pistes de développement de notre implémentation.

Nous avons implémenté notre technique de traçage en domaines périodiques dans le solveur de transport TDT. Les problématiques d'implémentation étant souvent légèrement différentes de celles présentées au chapitre précédent, nous détaillons ici les modifications que nous avons effectuées. Nous présenterons ainsi les choix d'implémentation que nous avons effectués, ainsi que les algorithmes utilisés en pratique.

Dans un deuxième temps, nous nous intéresserons aux résultats numériques que nous avons obtenus avec notre méthode de traçage en géométries périodiques. Nous nous intéresserons en particulier à la quantification des gains en termes de taille de stockage, par rapport à un traçage traditionnel.

Nous envisagerons enfin quelques perspectives de développement pour la méthode de traçage périodique, pour en étendre les fonctionnalités et permettre la simulation de systèmes industriels plus complexes que ceux utilisés dans nos tests.

6.1 Détails d'implémentation du traçage périodique

L'implémentation du traçage périodique a été réalisée dans une version du solveur TDT qui utilise déjà une description géométrique à deux niveaux : une description globale du système complet, dans laquelle certaines régions sont "fictives" et contiennent en réalité des sous-systèmes décrits séparément. Dans un tel modèle, on ne dispose pas d'informations précises sur la structure du réseau : chaque cellule est simplement décrite comme une région contenant une sous-géométrie. Il est ainsi impossible de se fonder sur des informations comme par exemple les coordonnées d'une cellule au sein d'un réseau cartésien.

Ce type de représentation fournit cependant tous les éléments nécessaires à notre implémentation du traçage périodique :

- il est possible de déterminer facilement si une région appartient au réseau périodique (c'est une cellule contenant une sous-géométrie) ou s'il s'agit d'une partie non périodique de la géométrie ;
- la géométrie d'une cellule peut être traitée séparément pour générer le traçage local ;
- la description de la géométrie présente le même type de structure que le macro-traçage que nous souhaitons construire : une description globale pour l'ensemble du système, permettant de traiter les parties non périodiques de manière traditionnelle et ne contenant que des pointeurs vers les cellules périodiques.

Deux aspects principaux dans l'implémentation du traçage périodique nécessitent une attention particulière : la construction du traçage local sur la géométrie de la cellule (*i.e.* la sous-géométrie), et la construction du macro-traçage sur le système complet.

6.1.1 Traçage local

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 5.2.3, notre méthode de construction du traçage local est fondée sur l'utilisation d'un axe passant par le centre des cellules. Ceci est relativement différent des techniques de traçage classiques, qui s'appuient généralement sur un élément du bord de la cellule pour commencer à tracer les caractéristiques. Non seulement l'implémentation d'un traceur utilisant exactement la procédure décrite dans le chapitre précédent nécessiterait une refonte assez conséquente de l'algorithme de traçage, mais perdrait aussi les avantages du traceur traditionnel :

- en se plaçant sur le bord de la cellule, on n'a besoin de tracer que dans un sens (l'autre sens conduisant vers l'extérieur de la cellule) ;
- la description géométrique contient déjà nécessairement les équations des éléments surfaciques composant le bord de la cellule ; il est inutile d'y ajouter le centre de la cellule et ses axes de symétrie ;

- il est beaucoup plus efficace de construire de manière continue des trajectoires locales, plutôt que tracer individuellement et indépendamment les segments du traçage local.

De plus, le traçage local présente de grandes similitudes avec un traçage cyclique sur une cellule. Il serait donc avantageux d'essayer de concilier notre algorithme de construction du traçage périodique avec l'approche traditionnelle du traçage cyclique, pour limiter les efforts de développement tout en évitant les limites de la méthode de construction incrémentale : l'utilisation d'un traçage cyclique local initial quelconque génère en général un traçage à pas non constant.

De fait, bien que ceci ne soit pas directement imposé par le principe de construction, il est clair que notre méthode de génération du traçage local complet produit des trajectoires locales cycliques : ceci est nécessaire pour qu'il puisse décrire des trajectoires globales dans un réseau infini. Ainsi, la seule différence entre notre méthode de construction et une méthode incrémentale ne peut résider que dans le choix des pieds des trajectoires cycliques tracées, qui est déterminé par le pas de traçage ainsi que l'abscisse de la première trajectoire cyclique sur l'axe de traçage.

Le pas de traçage ne pose pas de problème particulier, étant donné qu'il est déjà déterminé par notre méthode de construction, grâce à la formule (5.2). En ce qui concerne la position de la première trajectoire cyclique à tracer, elle est relativement facile à obtenir grâce à des considérations de symétrie : à cause des symétries du traçage local, les pieds des trajectoires cycliques doivent nécessairement être répartis de manière symétrique sur le bord de la cellule de base. En prenant comme base de traçage l'un des éléments de frontière de la cellule et connaissant déjà le pas de traçage, il suffit de déterminer le point de départ de la première trajectoire de sorte que le centre du segment soit un centre de symétrie pour l'ensemble des pieds des trajectoires à tracer. Ensuite, les règles usuelles du traçage cyclique, détaillées par Sanchez *et al.* [2002], s'appliquent pour déterminer la partie de la base de traçage à couvrir. Le processus est détaillé sur la figure 6.1 dans le cas d'un hexagone, moins trivial que les cellules rectangulaires.

6.1.2 Macro-traçage

Comme nous l'avons souligné dans le paragraphe 5.2.4, l'un des problèmes posé par le traçage périodique est celui de la détermination de la succession des segments de traçage locaux à balayer dans une trajectoire globale. Bien que la technique du macro-traçage reporte ce problème à la phase de traçage, il n'en reste pas moins que nous devons disposer d'un algorithme permettant :

- sur une interface entre réseau et partie non périodique, de déterminer quel segment local prolonge continûment un segment global ;
- sur une interface interne au réseau périodique, de déterminer quel segment local succède au segment courant.

Le problème (b) est *a priori* plus simple que (a), étant donné que nous disposons théoriquement d'informations supplémentaires concernant la structure du réseau. Étant donnée la structure de la géométrie dans TDT, ce n'est en réalité pas le cas, puisque les cellules du réseau sont traitées exactement de la même manière que des régions normales. De plus, étant donné que la construction du macro-traçage se fait durant le traçage et non au moment du balayage, il est plus utile de privilégier la simplicité d'implémentation et de maintenance du code plutôt que sa performance. Ainsi, plutôt que d'utiliser un algorithme différent pour optimiser le traitement du cas de figure (b) ci-dessus, nous ne mettons en place qu'une seule méthode de détermination des connexions entre segments.

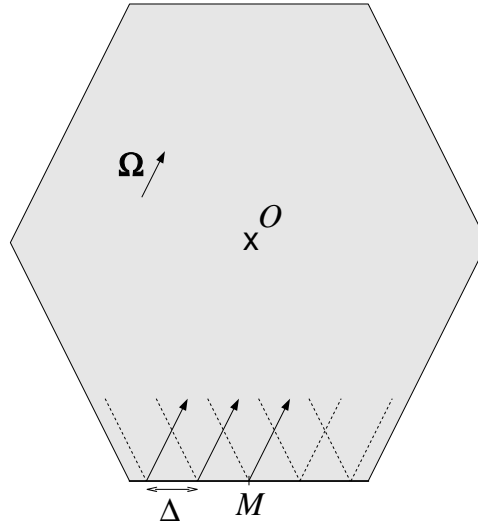


FIG. 6.1: Détermination des trajectoires cycliques à tracer sur un hexagone : étant donné le pas de traçage Δ , on choisit les trajectoires à tracer de sorte que les pieds des caractéristiques forment un ensemble symétrique par rapport au milieu M du segment utilisé comme base de traçage. Les règles classiques du traçage cyclique [Sanchez *et al.*, 2002] permettent de ne tracer que les trois premières trajectoires cycliques (notées avec des flèches) ; les autres (notées en pointillés) apparaîtront au cours du traçage cyclique.

La technique que nous avons implémentée dans ce but consiste à tenir à jour un tableau de correspondance entre un point sur la frontière de la cellule de base, et les segments de traçage qui aboutissent à ce point. Bien qu'il existe une indexation naturelle des segments ou tronçons du traçage local, ce n'est pas le cas pour les points de la frontière de la cellule de base.

Nous avons mis en place une telle indexation basée sur les éléments suivants :

- indice de la direction considérée dans la formule de quadrature ;
- sens de propagation ;
- indice de l'élément surfacique considéré ;
- indice de l'abscisse locale du point sur l'élément surfacique.

Les deux premiers indices sont couramment utilisés dans la méthode des caractéristiques, et ne posent aucun problème particulier. Il est cependant nécessaire de fournir quelques explications supplémentaires sur le dernier indice, qui permet de repérer un point d'intersection entre le traçage local et un élément surfacique donné. Cette méthode d'indexation repose sur l'assurance que le traçage local généré présente un pas constant entre deux segments parallèles consécutifs. Si nous discrétisons un élément surfaciques en mailles dont la taille correspond au pas de traçage, il est garanti que chaque maille contiendra une et une seule extrémité de segment du traçage local.

Avec les notations de la figure 6.2, nous obtenons donc l'indice suivant pour une extrémité de segment :

$$i = \left\lceil \frac{x}{\Delta_x} \right\rceil,$$

où x est l'abscisse locale du point sur l'élément surfacique, et Δ_x est la projection du pas de traçage sur le segment :

$$\Delta_x = \frac{\Delta_{\vec{\Omega}}}{|\vec{\Omega} \cdot \vec{e}|}$$

Avec ces mêmes notations, le sens de propagation est simplement le signe du produit scalaire $\vec{e} \cdot \vec{\Omega}$.

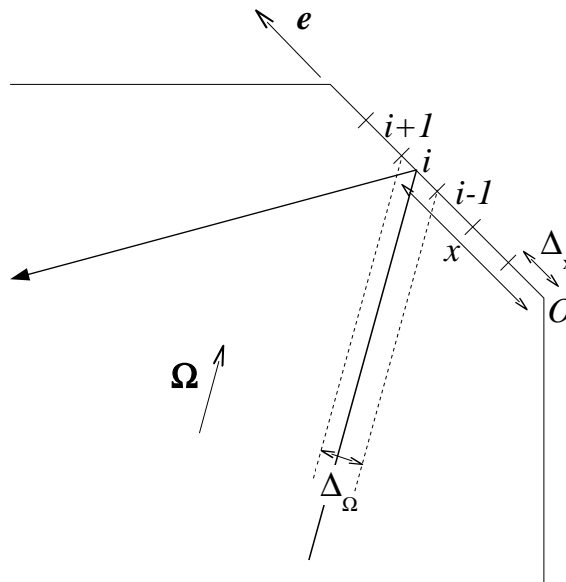


FIG. 6.2: Indexation des extrémités des segments du traçage local sur un élément surfacique : chaque maille de taille Δ_x contient une et une seule extrémité de segment du traçage local.

L'algorithme 8 récapitule l'ensemble du déroulement de la construction du traçage local complet et du macro-traçage. Le traçage local est construit en premier, ce qui permet de calculer la table de correspondance entre segment local et point sur les éléments surfaciques. Dans un deuxième temps, le macro-traçage est déterminé, en utilisant la table de correspondance pour lier un segment global à son équivalent local. Cette table peut ensuite être libérée de la mémoire, puisqu'elle ne servira pas durant le balayage : toutes les informations nécessaires sont stockées directement dans le macro-traçage.

Algorithme 8 Traçage périodique

Traçage local :

créer un domaine de calcul virtuel, sur la base de la géométrie de la cellule ;
associer à ce domaine de calcul des conditions aux limites de réflexion spéculaire ;
pour chaque trajectoire locale cyclique à tracer **faire**
 pour chaque tronçon **faire**
 pour chaque région traversée **faire**
 calculer et stocker la longueur de corde ;
 fin pour
 déterminer les indices des extrémités du tronçon ;
 associer ces indices à l'indice du tronçon dans la table de correspondance ;
 fin pour
 fin pour

Macro-traçage :

considérer le domaine global ;
pour chaque trajectoire globale **faire**
 pour chaque région traversée **faire**
 si il s'agit d'une région conventionnelle **alors**
 calculer et stocker la longueur de corde ;
 sinon
 déterminer les indices des extrémités du segment ;
 retrouver le tronçon local à l'aide de la table de correspondance ;
 stocker uniquement un pointeur vers le tronçon local ;
 fin si
 fin pour
fin pour

6.2 Résultats numériques

Nous détaillons ici les résultats numériques obtenus avec notre implémentation du traçage périodique dans le solveur de transport TDT. Nous nous intéressons principalement au coût de la méthode des caractéristiques avec traçage périodique, par rapport à un traçage “plat” traditionnel.

En particulier, nous étudierons la taille de stockage nécessaire pour le traçage, ainsi que les temps de calculs utilisés par les phases de traçage et de balayage.

Pour une géométrie donnée, nous définissons le gain maximal théorique caractérisant le rapport entre la quantité minimale d’informations nécessaire pour décrire la géométrie (taille des parties non périodiques et d’une seule région périodique) et l’ensemble des informations –partiellement redondantes– contenues dans la description complète de la géométrie sans tenir compte des périodicités. Ce gain maximal théorique peut-être évalué grâce à la formule :

$$\begin{aligned}
 G_{max} &= \frac{\text{taille du traçage plat} - \text{taille minimale du traçage}}{\text{taille du traçage plat}} \\
 &= 1 - \frac{T_{np} + T_{reg}}{T_{np} + N_{reg} T_{reg}} \\
 &= \frac{(N_{reg} - 1) T_{reg}}{T_{np} + N_{reg} T_{reg}},
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

dans laquelle T_{np} et T_{reg} représentent les tailles respectives des parties non-périodiques et d’une région périodique, et N_{reg} est le nombre de régions présentes dans le réseau périodique.

Les paramètres utilisés pour les différents calculs présentés ci-dessous sont les suivants :

| Paramètre | Valeur |
|------------------------------------|-------------------------|
| Caractéristiques de l’ordinateur : | |
| type de processeur | Intel Pentium III (x86) |
| cadence du processeur | 900 MHz |
| mémoire vive | 256 Mb |
| Problème de transport : | |
| type de problème | valeur propre |
| nombre d’itérations | 1 |
| Formule de quadrature angulaire : | |
| nombre d’angles horizontaux | 16 |
| nombre d’angles verticaux | 2 |
| Nombre de groupes d’énergie | 1 |
| Pas de traçage | 0.05 cm |

Les jeux de données géométriques utilisés pour ces calculs ont été générés à l’aide de l’interface utilisateur SILENE [Stankovski, 2007].

6.2.1 Cluster de cellules combustibles

Le premier essai numérique est effectué sur une géométrie excessivement simple, présentée sur la figure 6.3 : il s’agit d’un *cluster* de neuf cellules combustibles simplifiées. Le

tableau 6.1 présente une comparaison des coûts du traçage traditionnel et du traçage périodique. Dans les deux cas, les résultats en termes de flux angulaire, taux de réaction, facteur de multiplication sont strictement identiques, ce qui confirme le fait que les données de traçage effectivement utilisées durant le balayage sont les mêmes.

Pour une géométrie aussi simple, la comparaison ne tourne pas vraiment en faveur du traçage périodique : le gain en espace de stockage est relativement faible (16.67%) à cause de la taille relativement importante du macro-traçage. De plus, le surcroît de complexité dans l'algorithme de balayage ajoute un coût de calcul non négligeable.

En conclusion, le traçage périodique est très peu efficace à des échelles si petites, et ne peut pas présenter d'intérêt significatif pour une cellule de géométrie aussi simple.

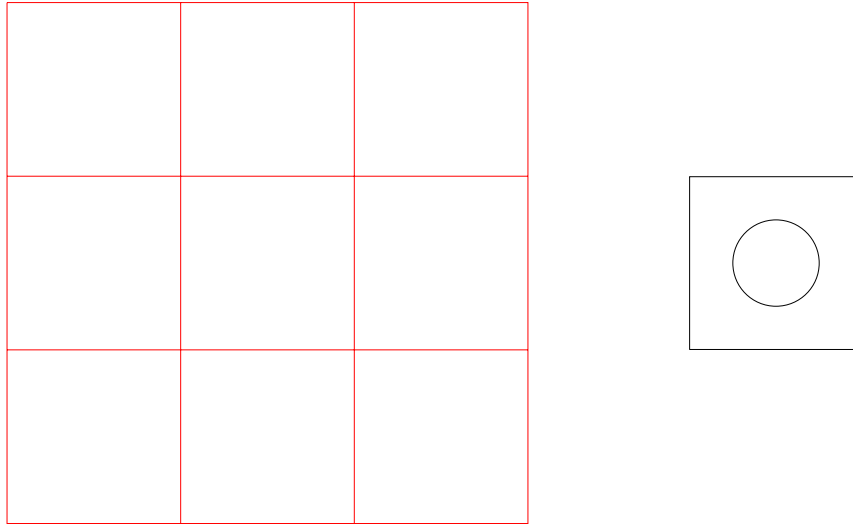


FIG. 6.3: Cluster de 3×3 cellules combustibles simplifiées : géométrie du réseau (à gauche) et détail de la géométrie de la cellule (à droite).

TAB. 6.1: Comparaison entre les deux techniques de traçage, pour le cluster de cellules combustibles présenté sur la figure 6.3.

| | | traditionnel | periodique | écart relatif |
|-------------------|-----|--------------|------------|---------------|
| taille du traçage | (b) | 6192 | 5160 | -16.67% |
| temps de traçage | (s) | 0.18 | 0.26 | 44.44% |
| temps de balayage | (s) | 0.89 | 1.15 | 29.21% |

6.2.2 Cluster d'assemblages

En revanche, les gains deviennent significatifs pour des géométries plus complexes, comme par exemple le cluster de neuf assemblages REP présenté sur la figure 6.4.

Les résultats regroupés dans le tableau 6.2 montrent que la taille de traçage décroît de 82.49%. Étant donné que le réseau contient 9 assemblages identiques, le gain maximal théorique est $G_{max} = 8/9 \simeq 88.89\%$. La différence entre ces deux valeurs s'explique par la nécessité de stocker le macro-traçage, dont la taille est ici de l'ordre du tiers de celle du traçage local sur une cellule.

Bien que ceci n'ait que peu d'impact sur le temps de calcul global, il est intéressant de mentionner que le temps de traçage est lui aussi largement réduit. Cette réduction prend ce-

pendant des proportions inférieures au gain en taille de traçage : les nombreuses opérations liées au calcul du macro-traçage compensent en grande partie la diminution de la quantité de trajectoires à tracer.

De plus, il n’y a aucune perte en ce qui concerne l’efficacité du balayage. Malgré les quelques opérations nécessaires pour reconstruire le traçage global durant le balayage, on observe même un léger gain en termes de temps de calcul à ce niveau. Il s’agit sans doute d’un effet lié à la réduction des besoins de *swap*.

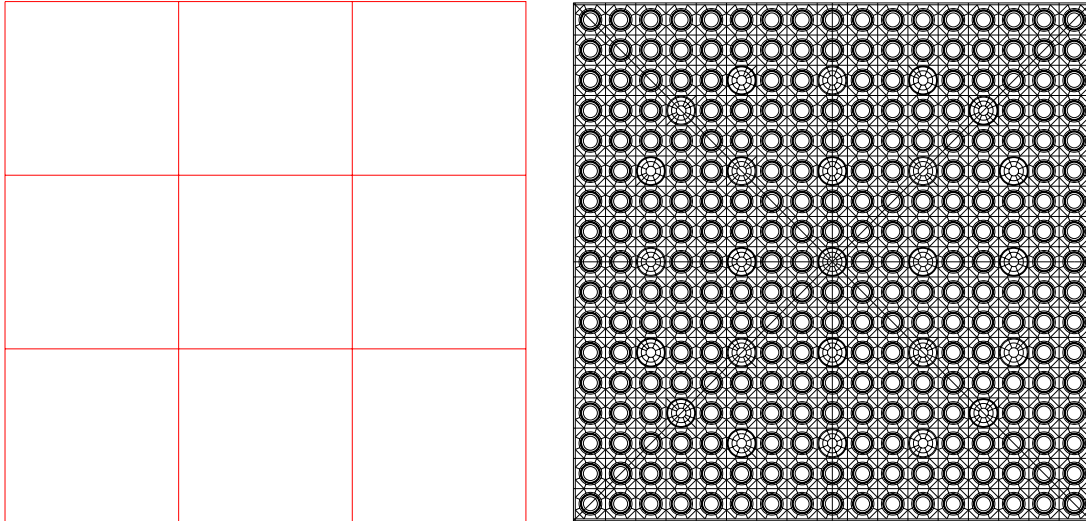


FIG. 6.4: Cluster de 3×3 assemblages REP : géométrie du réseau (à gauche) et détail de la géométrie de l’assemblage (à droite). Chaque assemblage comporte 17×17 cellules discrétisées en “moulin à vent”, ce qui représente environ 6 000 régions de calcul. La géométrie complète comporte donc environ 54 000 régions.

TAB. 6.2: Comparaison entre les deux techniques de traçage, pour le cluster d’assemblages REP présenté sur la figure 6.4.

| | | traditionnel | périodique | écart relatif |
|-------------------|-----|--------------|------------|---------------|
| taille du traçage | (b) | 10 172 688 | 1 781 532 | -82.49% |
| temps de traçage | (s) | 69.57 | 30.4 | -56.30% |
| temps de balayage | (s) | 13.61 | 12.94 | -4.92% |

6.2.3 Domaine non entièrement périodique

Sur un domaine géométrique composé seulement en partie d’un réseau, la partie non périodique doit être tracée et stockée intégralement. Ceci limite le gain maximal théorique en termes de taille de traçage.

Cependant, nous obtenons quand même des gains assez significatifs en termes de stockage, comme par exemple 76.69% pour un calcul sur la géométrie simplifiée de quart de cœur présentée sur la figure 6.5. Ici, le réflecteur n’est pas discrétisé, et la partie non périodique contient donc assez peu de régions. Les résultats donnés dans le tableau 6.3 sont essentiellement similaires à ceux observés pour les clusters d’assemblages. Là encore, on

observe de faibles différences entre le gain obtenu en pratique et le gain maximal théorique $G_{max} \simeq 87.50\%$.

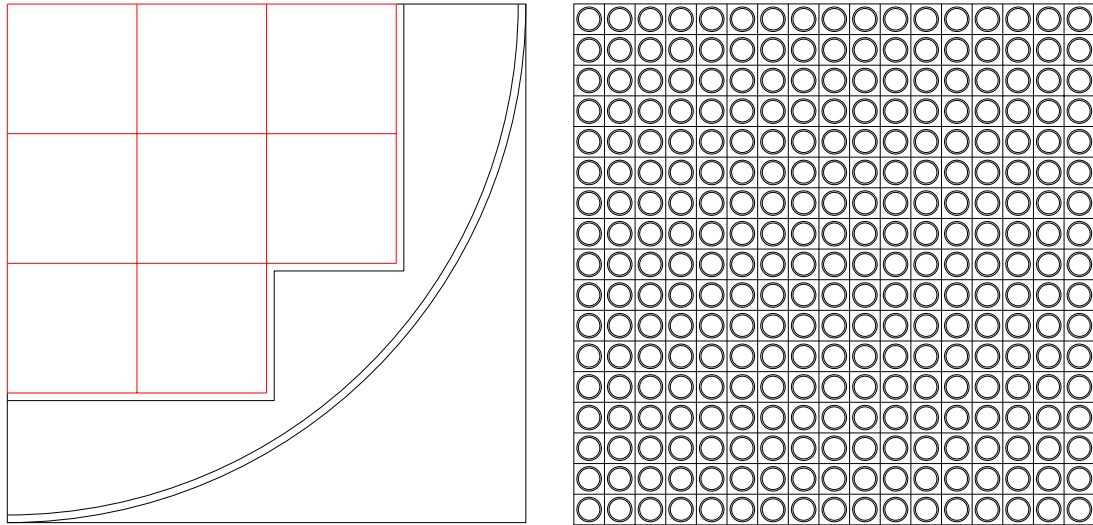


FIG. 6.5: Quart de cœur simplifié constitué d'un réseau de 8 assemblages entourés d'un réflecteur. La géométrie du système complet est présentée à gauche, et détail de l'assemblage à droite. Chaque assemblage est constitué de 17×17 cellules peu discrétisées, ce qui représente environ 850 régions de calcul. La géométrie complète comporte environ 7 000 régions, quasiment intégralement contenues dans les assemblages.

TAB. 6.3: Comparaison entre les deux techniques de traçage, pour le quart de cœur REP simplifié de la figure 6.5.

| | | traditionnel | périodique | écart relatif |
|-------------------|-----|--------------|------------|---------------|
| taille du traçage | (b) | 3 255 288 | 758 832 | -76.69% |
| temps de traçage | (s) | 16.78 | 6.33 | -62.28% |
| temps de balayage | (s) | 773.78 | 762.79 | -1.42% |

Dans un calcul plus réaliste, la discrétisation du réflecteur génère un grand nombre de régions non périodiques. La figure 6.6 présente la modélisation d'un quart de réacteur à eau pressurisée, avec le niveau de discrétisation utilisé pour des calculs de qualité industrielle à l'échelle d'un cœur complet [Zmijarevic *et al.*, 2008].

La géométrie complète comporte environ 79 000 régions, dont 3 000 dans le réflecteur. De plus, notre implémentation ne permet pas encore de tirer parti des symétries d'assemblages (Cf. paragraphe 6.3), et les demi-assemblages apparaissant sur les axes de symétrie du cœur doivent donc être décrits comme des régions non périodiques. Dans ce cas, le gain maximal théorique est $G_{max} \simeq 81.60\%$.

Les résultats obtenus sur cette géométrie sont présentés sur le tableau 6.4. L'utilisation du traçage périodique permet l'obtention de gains de 77.59% en taille de traçage, ce qui est proche du maximum théorique.

Les résultats concernant le temps de traçage sont similaires à ceux des autres calculs présentés ci-dessus : on observe une réduction importante mais de moindre ampleur que le

gain en taille de traçage.

En revanche, en ce qui concerne le temps de balayage, nous obtenons ici des résultats qualitativement différents des précédents. Sur les géométries de taille "normale" (à l'échelle d'un cluster d'assemblages), la réduction des besoins en mémoire entraînait une diminution au recours des zones de *swap*. Ceci permettait d'accélérer le calcul et de compenser l'augmentation de la complexité du balayage. Dans le cas d'un calcul à l'échelle du cœur complet, le gain en taille de traçage n'est plus suffisant pour réduire de manière significative le recours au *swap*. Le temps de calcul est donc ici pénalisé d'environ 10%. Cependant, ceci nous semble un prix raisonnable à payer pour des gains en mémoire aussi substantiels.

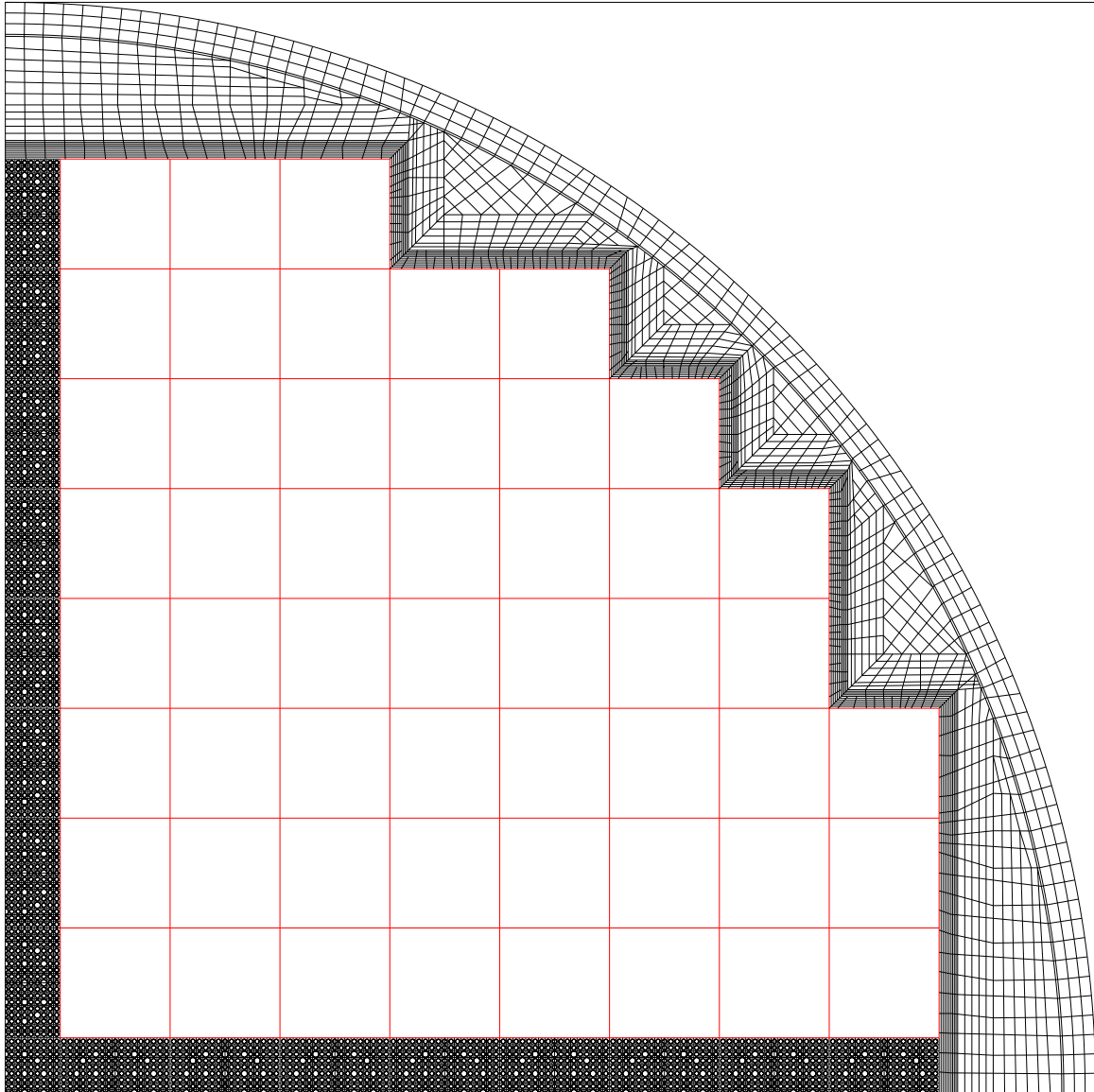


FIG. 6.6: Quart de cœur de réacteur à eau pressurisée. Les parties non périodiques comportent environ 13 000 régions de calcul, dont 3 000 pour le réflecteur et 10 000 pour les demi-assemblages le long des axes de symétrie. Le réseau périodique est composé 52 assemblages dont la géométrie est présentée sur la figure 6.7. Après insertion des assemblages, la géométrie complète comporte environ 79 000 régions.

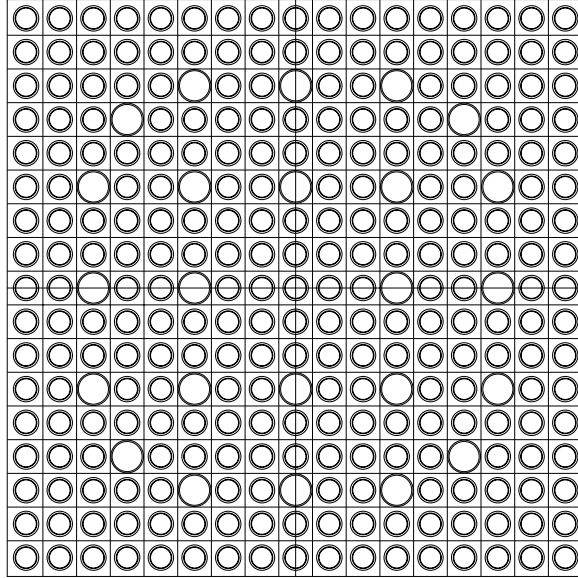


FIG. 6.7: Assemblage de réacteur à eau pressurisée, constitué de 17×17 cellules et comportant environ 1 200 régions de calcul.

TAB. 6.4: Comparaison entre les deux techniques de traçage, pour le quart de cœur EPR présenté sur la figure 6.6.

| | | traditionnel | périodique | écart relatif |
|-------------------|-----|--------------|------------|---------------|
| taille du traçage | (b) | 39 198 114 | 8 783 076 | -77.59% |
| temps de traçage | (s) | 203.28 | 119.19 | -41.37% |
| temps de balayage | (s) | 45.64 | 50.34 | 10.30% |

6.2.4 Conclusions

Il est possible d'évaluer la performance de notre méthode de traçage périodique en utilisant le paramètre d'efficacité :

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{\text{taille du traçage obtenu}}{\text{taille du traçage minimal}} \\ &= \frac{1 - G_{max}}{1 - G},\end{aligned}$$

où G_{max} est le gain maximal théorique en taille de traçage, défini selon la formule (6.1), et G est le gain effectivement constaté avec la méthode de traçage périodique.

Le tableau 6.5 compare les efficacités de la méthode sur les différentes géométries étudiées ci-dessus. Il apparaît clairement que la méthode est d'autant plus efficace que la géométrie des régions périodiques est complexe. Par ailleurs, l'efficacité est aussi plus importante pour des grands nombres de régions périodiques. On arrive ainsi à une efficacité de 82.11% pour le quart de cœur REP complet de la figure 6.6, qui combine un grand nombre d'assemblages avec une complexité assez importante de la géométrie de ceux-ci.

TAB. 6.5: Comparaison des performances du traçage périodique pour les différentes géométries étudiées.

| | gain obtenu G | gain maximal G_{max} | efficacité ρ |
|---------------------|--------------------|---------------------------|----------------------|
| cluster cellules | 16.67% | 88.89% | 13.33% |
| cluster assemblages | 82.49% | 88.89% | 63.46% |
| quart REP simplifié | 76.69% | 87.50% | 53.63% |
| quart EPR | 77.59% | 81.60% | 82.11% |

6.3 Perspectives de développement

Dans l'état actuel de l'implémentation du traçage périodique dans TDT, toutes les fonctionnalités décrites dans le chapitre 5 ne sont pas disponibles. En particulier, il manque encore les développements suivants :

Cellules transformées par symétrie interne :

Lorsque certaines cellules du réseau sont de géométrie identique à celle de la cellule de base, mais simplement transformées par symétrie interne (par exemple un assemblage carré tourné d'un angle $\frac{\pi}{2}$), notre méthode de construction garantit que le traçage local vérifie cette symétrie et permet de traiter les trajectoires passant par cet assemblage. Cependant, notre implémentation de la table de connexion entre segments, telle que décrite au paragraphe 6.1.2, ne permet pas encore de prendre en compte la rotation de la cellule pour déterminer le segment de traçage local à utiliser.

Ce problème pourrait être traité de manière très simple, en tenant à jour une table donnant la correspondance entre un élément surfacique de la cellule de base et son image par les différentes symétries internes. Le traitement de cellules transformées requerrait ainsi seulement une étape supplémentaire pour déterminer l'élément surfacique à utiliser pour entrer correctement dans la table de connexion (Cf. paragraphe 6.1.2).

Le principal obstacle reste cependant le format actuel des jeux de données géométriques, qui ne permet pas de représenter les transformations (autres que les simples translations) appliquées aux cellules individuelles. Bien que facilement réalisable en raison de l'architecture du code, l'introduction de nouvelles transformations demanderait un temps de développement et de test non négligeable.

Cellules "coupées" :

Lorsque la géométrie globale présente une forte symétrie, il est souvent avantageux de n'en considérer qu'une partie (en général un quart ou un huitième) en utilisant des conditions aux limites adéquates. Cependant, lorsque la géométrie contient un réseau périodique, ceci peut conduire à l'apparition de cellules "coupées" le long des axes de symétrie. C'est par exemple le cas du quart de réacteur présenté sur la figure 6.6.

Bien que notre méthode de traçage garantisse que le traçage local vérifie les symétries internes, et donc permet aussi bien de représenter les trajectoires neutroniques sur les cellules coupées que sur les autres, notre implémentation ne permet pas d'en tirer parti. Il s'agit ici d'un problème plus difficile à traiter que le précédent, dans la mesure où c'est toute la numérotation des segments du traçage local qui est à reprendre pour permettre de désigner aussi bien des segments sur une cellule complète que sur une cellule coupée.

Il est intéressant de noter que l'implémentation d'une telle fonctionnalité serait loin d'être inutile : elle permettrait par exemple de passer d'un gain maximal théorique d'environ 80% à plus de 95% dans le cas du quart de cœur évoqué ci-dessus.

Cellules de géométries internes différentes :

Lorsque le réseau est constitué de cellules de forme identique, mais de géométries internes différentes, il est nécessaire de disposer d'autant de traçages locaux que de types de géométries internes. Bien qu'il s'agisse d'une opération très simple, ceci n'est pour l'instant pas pris en compte dans notre implémentation.

Pour prendre en compte différents types de géométrie interne, le seul point délicat dans l'implémentation est le stockage de l'information supplémentaire correspondant au type de traçage local à utiliser en fonction de la géométrie d'une cellule. Pour l'instant, pour chaque traversée de cellule, le macro-traçage stocke deux valeurs :

- l'indice de la cellule traversée ;
- un pointeur vers le segment de traçage local à utiliser lors du balayage.

L'ajout d'une troisième valeur à stocker pour déterminer le type de traçage local à utiliser occasionnerait une perte d'espace de stockage inacceptable. On peut aussi utiliser une table de correspondance entre un numéro de cellule et un type de géométrie. Une autre possibilité consiste à stocker les informations sur le traçage local conjointement avec le pointeur vers le segment local.

Cette dernière possibilité est clairement la moins coûteuse, mais nécessite que l'espace alloué pour un pointeur de segment local soit suffisamment grand pour permettre d'adresser tous les segments de tous les traçages locaux. Il serait donc nécessaire d'effectuer quelques tests pour déterminer dans quelle mesure ceci pourrait être mis en place pour des géométries complexes et contenant de nombreux types de cellules différents.

Nous avons détaillé dans ce chapitre l'implémentation que nous avons faite de la méthode de traçage en géométries périodiques, ainsi que les résultats numériques obtenus.

Bien que notre implémentation présente encore quelques lacunes par rapport aux fonctionnalités décrites au chapitre 5, nous avons été en mesure d'obtenir des résultats très satisfaisants pour les géométries de cœur généralement utilisées dans l'industrie : réseau d'assemblages carrés, entouré ou non d'un réflecteur non périodique.

De manière peu surprenante, la première conclusion à tirer de ces résultats est l'absence d'intérêt du traçage périodique dans le cas où la géométrie d'une cellule est trop simple. En effet, dans ce cas la consommation d'espace de stockage supplémentaire utilisée pour le macro-traçage compense pratiquement le gain occasionné par le traçage local. De plus, la logique de reconstruction des trajectoires globales induit dans ce cas des surcoûts de balayage non négligeables devant le faible coût de balayage d'une cellule simple.

En revanche, il est intéressant de remarquer que les gains deviennent intéressants dès lors que la géométrie de la cellule périodique se complexifie. Dans le cas de réseaux d'assemblages REP, la taille du macro-traçage reste relativement faible devant les gains résultant du stockage d'un seul traçage local et permet l'obtention de gains substantiels en termes de taille de traçage. Le traitement de parties non périodiques dans la géométrie ne pose pas de problème particulier, et les gains obtenus en présence d'un réflecteur sont comparables à ceux d'un cluster entièrement périodique.

En ce qui concerne les temps de calculs, la reconstruction des trajectoires globales reste elle aussi négligeable devant le coût élevé du balayage d'un assemblage. Ceci permet de garder des durées de balayage similaires à celles d'un calcul traditionnel. Dans le cas de calculs de taille moyenne, le léger surcoût du balayage peut même être masqué par un gain de swapping occasionné par la diminution des ressources de mémoire nécessaires.

Un calcul de quart de cœur REP complet permet de valider ces résultats dans des conditions proches de l'utilisation industrielle actuelle et future des codes de transport neutronique. On constate un bon passage à l'échelle de l'algorithme de traçage périodique, qui continue à donner de bons gains en termes d'occupation mémoire du traçage. L'influence du swapping est ici moins visible, et nous pouvons donc quantifier un ralentissement du balayage d'environ 10% par rapport à une méthode traditionnelle.

Conclusions et perspectives

Notre travail de thèse avait pour objectif d'accroître les performances de la méthode des caractéristiques, principalement en agissant sur les problématiques liées au traitement de la géométrie et au traçage. Nous avons proposé deux axes d'amélioration, qui ont tous deux été implémentés et testés numériquement dans le solveur de transport TDT.

Le premier axe de travail concernait la technique d'intégration transverse dans la méthode des caractéristiques. Nous avons détecté plusieurs sources majeures d'approximations dans la formule de quadrature habituellement utilisée. Ces approximations sont notamment dues à la mauvaise prise en compte des discontinuités matérielles, qui occasionne des problèmes de convergence en fonction du pas de traçage. Ces approximations dans l'intégration transverse limitent la précision de la méthode des caractéristiques et nécessitent l'emploi de niveaux de discrétisation très fins, ce qui augmente le coût du calcul.

Nous avons proposé une méthode, dite des "macrobandes", permettant d'améliorer la précision de la technique d'intégration transverse. La méthode des macrobandes repose principalement sur deux piliers. D'une part, les discontinuités matérielles sont prises en compte grâce à un mécanisme de projection locale automatique des discontinuités. Ce mécanisme limite à la fois le nombre de discontinuités projetées –ce qui réduit le coût de calcul– et la dispersion numérique –ce qui améliore la précision. D'autre part, l'équation de transmission est modifiée pour prendre en compte la variation transverse des longueurs de cordes à l'intérieur de chaque région.

Les résultats numériques fournis par cette méthode sont très encourageants. Sur les cas que nous avons testés, la technique des macrobandes permet, pour une précision donnée, de relâcher le niveau de discrétisation transverse (*i.e.* le pas de traçage) d'un facteur cinq environ. Par ailleurs, bien que notre implémentation ne soit pas du tout compétitive devant les optimisations de la méthode traditionnelle dans TDT, une analyse de complexité algorithmique permet de conclure que la méthode des macrobandes pourrait conduire à des gains de l'ordre de 50% du temps de calcul par rapport à la méthode traditionnelle.

Au delà de ces gains en précision, l'un des résultats essentiels est la confirmation du diagnostic de départ sur la précision de l'intégration transverse. Nos résultats ont permis de montrer que la source principale d'erreur était le manque de prise en compte des discontinuités matérielles. En revanche, les variations transverses des longueurs de cordes n'ont que peu d'impact et il est inutile d'améliorer la formule de quadrature à ce niveau là. Ces résultats ont permis de mettre en place un nouveau schéma d'intégration transverse pour la méthode des caractéristiques, encore plus efficace, actuellement en cours de développement au CEA/SERMA par Santandrea *et al.* [2009].

Le deuxième axe d'amélioration visait à réduire la taille de stockage nécessaire pour le traçage, lorsque le système étudié présente des redondances géométriques. Lorsque la géométrie du réacteur comprend un réseau périodique de cellules identiques, nous nous sommes intéressés aux conditions sous lesquelles il était possible de n'effectuer le traçage que sur l'une de ces cellules, et de reconstruire des trajectoires globales à la volée durant le balayage.

Nous avons développé une méthode de traçage périodique, permettant de traiter efficacement ce type de géométries. Nous avons cherché la plus grande généralité, en autorisant le traitement indifférencié de cellules de formes diverses (rectangle, carré ou hexagone), ainsi qu'en traitant les cas où le réseau n'est pas entièrement périodique. Notre méthode est basée sur un traçage à deux niveaux : un traçage local sur une cellule contient toutes les informations nécessaires pour reconstruire les trajectoires globales sur le réseau périodique ; un macro-traçage permet de stocker les informations relatives aux parties non périodiques de la géométrie, ainsi que de précalculer les informations nécessaires au balayage du réseau périodique.

Bien que notre implémentation de la méthode ne soit pas complète, nous avons été en mesure d'obtenir de bons résultats numériques. Nous avons montré que notre technique de traçage devenait très vite compétitive, dès lors que la géométrie des cellules se complexifie. De plus, les gains obtenus en termes de taille de traçage n'engendrent pas de pertes notables en ce qui concerne le temps de calcul. Notre choix d'utiliser un macro-traçage est justifié *a posteriori* par sa taille relativement faible devant celle du traçage local : pour des géométries contenant par exemple neuf cellules de géométries identiques, nous obtenons des gains de 80% en taille de traçage.

L'implémentation de la technique de traçage en géométries périodiques doit encore être complétée, mais elle permettra à terme d'obtenir des gains substantiels simplifiant l'utilisation de la méthode des caractéristiques sur des systèmes complexes comme par exemple le cœur de l'EPR.

Dans ce travail de thèse, nous ne nous sommes intéressés qu'aux aspects liés à la géométrie et au traçage, mais il existe encore de nombreux axes d'amélioration de la méthode des caractéristiques. On peut notamment penser à la parallélisation du code, qui est un domaine actuellement extrêmement porteur à cause de l'architecture massivement parallèle des calculateurs modernes. Étant donné les algorithmes qu'elle emploie, la méthode des caractéristiques se prêterait très bien à une parallélisation.

Pour une parallélisation à gros grains, on peut dans un premier temps résoudre indépendamment les équations S_N en parallèle pour toutes les directions de la formule de quadrature angulaire. Dans un deuxième temps, pour une parallélisation à grains plus fins, il serait possible de distribuer les trajectoires de même direction entre plusieurs processeurs.

Bibliographie

- G. I. BELL, G. E. HANSEN et H. A. SANDMEIER : Multitable treatments of anisotropic scattering in S_N multigroup transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 28:376, 1967.
- M. COSTE-DELCLAUX : *Modélisation du phénomène d'autoprotection dans le code de transport multigroupe APOLLO2*. CEA-R-6114, 2006.
- F. FÉVOTTE, S. SANTANDREA et R. SANCHEZ : Advanced transverse integration for the method of characteristics. In *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications 2007*, Monterey, CA, USA, April 15–19 2007.
- F. FÉVOTTE, S. SANTANDREA et R. SANCHEZ : Tracking on periodic lattices for the method of characteristics. In *Proceedings of PHYSOR 2008*, Interlaken, Switzerland, September 14–19 2008.
- M. J. HALSALL : CACTUS, a characteristics solution to the neutron transport equations in complicated geometries. Rapport technique AEEW-R 1291, Atomic Energy Establishment, Winfrith, Dorchester, Dorset, United Kingdom, 1980.
- M. HERMAN : *ENDF-6 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File*. Cross Section Evaluation Working Group, juin 2005.
- S. G. HONG et N. Z. CHO : CRX : a code for rectangular and hexagonal lattices based on the method of characteristics. *Annals of Nuclear Energy*, 25:547–565, 1998.
- S. KOSAKA et E. SAJI : Transport theory calculation for a heterogeneous multi-assembly problem by characteristics method with direct neutron path linking technique. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 37(12):1015–1023, 2000.
- E. E. LEWIS et W. F. MILLER, Jr : *Computational Methods of Neutron Transport*. American Nuclear Society, 1993.
- M. LIVOLANT et F. JEANPIERRE : *Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires*, 1974.
- R. E. MACFARLANE et D. W. MUIR : *The NJOY Nuclear Data Processing System*. Los Alamos National Laboratory, LA-12740-M, octobre 1994.
- P. REUSS : *Précis de neutronique*. EDP Sciences, 2003.
- P. REUSS et J. BUSSAC : *Traité de neutronique*. Hermann, Paris, 1985.
- R. SANCHEZ, L. MAO et S. SANTANDREA : Treatment of boundary conditions in trajectory-based deterministic transport methods. *Nuclear Science and Engineering*, 140:23–50, 2002.
- R. SANCHEZ et M.J. MCCORMICK : A review of neutron transport approximations. *Nuclear Science and Engineering*, 80(4):481–535, avril 1982.

- R. SANCHEZ, J. MONDOT, Z. STANKOVSKI, A. COSSIC et I. ZMIJAREVIC : APOLLO II : a user-oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 100:352, 1988.
- S. SANTANDREA, J. C. JABOULAY, P. BELLIER, F. FÉVOTTE et H. GOLFIER : Improvements and validation of the linear surface characteristics scheme. *soumis à Annals of Nuclear Energy*, 2009.
- K. S. SMITH et J. D. RHODES, III : CASMO-4 characteristics methods for two-dimensional PWR and BWR core simulations. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 83:294–296, 2000.
- K. S. SMITH et J. D. RHODES, III : Full-core, 2-D, LWR core calculation with CASMO-4E. *In Proceedings of PHYSOR 2002*, October 7–10 2002.
- Z. STANKOVSKI : Implementation of component concept in SILENE 2D/3D pre-post processing GUI. *In Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications 2007*, April 15–19 2007.
- S. STEINBERG : *Group Theory and Physics*. Cambridge University Press, 1994.
- J.C. SUBLET, M. COSTE-DELCLAUX et P. RIBON : *CALENDF-2005 : User Manual*. CEA-R-6131, 2006.
- W-K TUNG : *Group Theory in Physics*. World Scientific Publishing Company, 1985.
- A. YAMAMOTO : Reduction in spatial discretization error in the method of characteristics by using the mobile-chord ray tracing method. *Annals of Nuclear Energy*, 35(5):783–789, mai 2008.
- A. YAMAMOTO, M. TABUSHI, N. SUGIMURA et T. USHIO : Non-equidistant ray tracing for the method of characteristics. *In Proceedings of M&C 2005*, September 12–15 2005.
- I. ZMIJAREVIC : Multidimensional discrete ordinates nodal and characteristics methods for the Apollo2 code. *In Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, September 1999.
- I. ZMIJAREVIC, H. GOLFIER, S. SANTANDREA, Z. STANKOVSKI et C. GUÉNAUT : Use of 2D whole core reactor models for PWR analysis with APOLLO2. *In Proceedings of PHYSOR 2008*, September 14–19 2008.