

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉVELOPPEMENT DE LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES POUR
LE CALCUL DE RÉSEAU

ROMAIN LE TELLIER
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE NUCLÉAIRE)
DÉCEMBRE 2006

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

DÉVELOPPEMENT DE LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES POUR
LE CALCUL DE RÉSEAU

présentée par : LE TELLIER Romain

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. MARLEAU Guy, Ph.D., président

M. KOCLAS Jean, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. HEBERT Alain, D.Ing., membre et codirecteur de recherche

M. ROY Robert, Ph.D., membre

M. RUGGIERI Jean-Michel, Ph.D., membre

À mes grand-parents,

William et Léone Chatelot,

REMERCIEMENTS

J'aimerais remercier l'ensemble des membres de l'Institut de Génie Nucléaire (IGN). Plus particulièrement, je remercie Jean Koclas, pour son accueil au sein de ce groupe de recherche alors qu'il y a quatre ans et demi, j'arrivais ici comme étudiant en échange, Alain Hébert, pour m'avoir proposé ce projet, m'avoir encouragé et aidé à promouvoir les résultats de ce travail, Guy Marleau, pour son indéfectible attention, ses pauses café et ses soupers. Je remercie aussi Elisabeth Varin, chercheuse à l'IGN jusqu'à il y a peu, maintenant à l'EACL, pour son dynamisme, sa sympathie et ses soupers. Par ailleurs, j'aimerais souligner la contribution de Robert Roy et Mohamed Dahmani avec qui j'ai pu collaborer au cours de ce projet.

Je tiens aussi à saluer les étudiants que j'ai pu côtoyer au sein de l'IGN au cours de ces quatre années, en particulier, Paul Dufour, Karthikeyan Ramamoorthy, Richard Chambon maintenant diplômés, Alexi Popov et Joël Le Mer, arrivés plus récemment.

Ce projet s'est accompagné d'un stage au sein du CEA Cadarache en France à l'automne 2005. J'aimerais remercier Alain Santamarina, pour son accueil au LEPH* et son encadrement et les échanges fructueux que j'ai pu avoir avec lui, Jean-Michel Ruggieri, chef du LEPH, pour sa jovialité qui m'a fait très vite me sentir à l'aise au sein de son équipe et son intérêt pour mon travail de doctorat par delà le stage, Tonino Sargeni, Claire Vaglio-Gaudard et Jean-François Vidal avec qui j'ai travaillé directement, pour leur attention et intérêt pour les remarques d'un jeune stagiaire. Je remercie par ailleurs l'ensemble du laboratoire pour son accueil chaleureux.

Pour finir, je remercie mon amie Caroline Paul, ma mère Corinne Pichard et mon beau-père Patrick Pichard pour leur soutien quotidien.

*Département d'Études des Réacteurs - Service de Physique des Réacteurs et du Cycle - Laboratoire d'Études Physiques

RÉSUMÉ

Ce projet s'intéresse à la mise en place de la méthode des caractéristiques dans le cadre du calcul de réseau pour la modélisation neutronique des réacteurs nucléaires. Le calcul de réseau est une séquence de calculs qui fait intervenir la résolution de l'équation de transport des neutrons dans des contextes différents. Pour ces calculs, la méthode des probabilités de collision a longtemps été l'outil de résolution privilégié. À l'heure actuelle, pour le calcul multigroupe de flux, l'usage de la méthode des caractéristiques tend à se populariser de part sa capacité pratique à traiter des configurations avec un grand nombre de régions et un traitement anisotrope de la diffusion. Par contre, pour les autres étapes du calcul de réseau, c'est la méthode des probabilités de collision qui reste seule utilisée. Dans ce projet, par delà les développements logiciels relatifs à la méthode des caractéristiques en tant que telle, l'idée centrale est d'étendre l'utilisation de cette méthode à toutes les étapes du calcul de réseau qui requiert la résolution de l'équation de transport.

Dans ce contexte, la méthode des caractéristiques a été implantée pour des géométries 2D avec un traitement exact ou approché des conditions aux limites. Une grande attention a été apportée aux développements de méthodes d'accélération adaptées aux diverses utilisations de la méthode des caractéristiques. Cette stratégie d'accélération est basée sur deux grandes classes de méthodes, les préconditionnements synthétiques et les méthodes itératives de Krylov, par analogie avec la résolution des grands systèmes linéaires. Un préconditionnement a été choisi ; ce projet a alors consisté à détailler les fondements de cette méthode, à en faire une analyse a priori et a posteriori et à l'améliorer à partir de là. Une méthode de Krylov a été choisie et on s'est attaché à l'implanter de manière efficace avec la méthode des caractéristiques avec le préconditionnement précédent. Par ailleurs, un autre préconditionnement et une autre méthode de Krylov ont été implantées et testées de manière à obtenir un point de comparaison.

À côté de ce développement, certaines études annexes ont été menées de manière à clarifier certains points théoriques et pratiques relatifs à la méthode des caractéristiques. Les points suivants sont d'importance :

- la question de la conservation des particules lorsque la diffusion est anisotrope et les contraintes qu'elle impose sur la procédure d'intégration numérique,
- la question du schéma d'intégration spatiale,
- la question de la stratégie algorithmique d'intégration du flux et la nécessité (ou non) pratique d'introduire un traitement asymptotique.

Une procédure de test des méthodes sur des cas réalistes d'assemblages de réacteurs nucléaires a été menée de manière à valider le travail logiciel réalisé. Trois études ont été menées sur des géométries différentes. Deux de ces études ont combinées la validation de cette méthode avec la validation de modèles d'auto-protection. Il s'agit des assemblages BWR-MOX et CANDU-NG. Le dernier cas a été envisagé sous l'angle de la mise en place d'un schéma de calcul à vocation industrielle pour les assemblages PWR.

ABSTRACT

This project is dedicated to the implementation of the method of characteristics for lattice calculations in the neutronics modeling of nuclear reactors. A lattice calculation is a sequence of models that require the solution of the neutron transport equation at different stages. Within this framework, the collision probability method has been the dedicated tool for a long time. Nowadays, for the multigroup flux calculation, the method of characteristics tends to supplant collision probability approaches thanks to its practical capability of treating configurations with a large number of regions and anisotropic scattering. However, for the other stages of a lattice calculation, the collision probability method remains the only solver used. In this work, beyond the computational development related to the method of characteristics in itself, the main idea is to extend the usage of this method to all the calculation stages that involve the solution of the transport equation.

In this context, the method of characteristics was implemented for 2D geometries with exact and approximated boundary conditions. Special care was taken for the development of acceleration techniques adapted to the different contexts. This acceleration strategy is based on two general classes of methods, synthetic preconditioning techniques and Krylov iterative methods, by analogy with the resolution of large linear systems. An already existing preconditioner was selected ; the work has consisted in detailing the fundamental assumption of this method, performing a performances analysis prior and posterior to its implementation and, starting from there, improving it. A Krylov method was chosen and its implementation with the previous preconditioner in the special context of the characteristic method has been carried out. Besides, for comparison purpose, another preconditioning technique and another Krylov method were implemented.

Apart from these computational developments, some related investigations were carried out in order to clarify some theoretical and practical aspects related to the

method of characteristics. The following points were looked at:

- the issue of the particle conservation when anisotropic scattering is considered and the constraints that it imposes on the numerical integration procedure,
- the issue of the spatial integration scheme,
- the issue of the algorithmic strategy for the flux integration and the necessity (or not) to introduce an asymptotical treatment.

A testing procedure of these methods on realistic configurations of nuclear reactors was used in order to validate the software developments. Three studies were carried out on different geometries. In two cases corresponding to BWR-MOX and CANDU NG geometries, the characteristic method validation was performed along with the validation of different self-shielding models. The last case was oriented towards the definition of a computational scheme for production calculations on PWR assemblies.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES FIGURES	xv
LISTE DES TABLEAUX	xvii
LISTE DES ANNEXES	xx
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Mise en contexte	1
1.2 Définition du travail de recherche	4
1.3 Présentation de l'équation de transport dans le contexte du calcul multigroupe de flux	5
1.3.1 Une équation linéaire de bilan	5
1.3.2 Discrétisation en énergie	8
1.3.3 Les différentes boucles de convergence	9
1.3.4 Traitement de l'anisotropie de la diffusion	10
1.4 Organisation du rapport	11
CHAPITRE 2 LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES	13
2.1 Formalisme de la méthode des caractéristiques	13
2.1.1 La procédure de tracking	14

2.1.2	Intégration sur le tracking	17
2.1.3	Cas d'une géométrie 2D cartésienne	19
2.1.4	L'équation caractéristique	20
2.2	Les conditions aux frontières	23
2.3	Le système à résoudre	25
2.4	Contexte multigroupe	27
2.5	Tenants et aboutissants du développement de MOC	28
CHAPITRE 3 LES MÉTHODES D'ACCÉLÉRATION		31
3.1	Méthodes synthétiques d'accélération	32
3.1.1	Description générale	32
3.1.2	Méthodes synthétiques de diffusion	34
3.1.3	Méthodes synthétiques de transport	38
3.1.4	Contexte multigroupe	40
3.1.5	Conclusion	41
3.2	Méthodes itératives de Krylov	42
3.2.1	Problématique	42
3.2.2	Description générale	43
3.2.3	Application à la résolution de l'équation de transport	45
3.2.4	Conclusion	46
CHAPITRE 4 PRÉCONDITIONNEMENT PAR UNE MÉTHODE DE AL- GEBRAIC COLLAPSING ACCELERATION		47
4.1	Dérivation détaillée de la méthode	47
4.1.1	Schéma d'accélération	47
4.1.2	Notations et premières relations	48
4.1.3	Les équations correctives à l'intérieur du domaine	51
4.1.4	L'hypothèse synthétique	52
4.1.5	Le système correctif	55

4.1.6	Traitement des conditions aux frontières	55
4.1.7	Amélioration de l'hypothèse synthétique	58
4.2	Analyse spectrale	59
4.2.1	Analyse de Fourier	61
4.2.2	Analyse spectrale directe	63
4.3	Méthodologie de résolution du système correctif	66
4.4	Illustration des propriétés de l'hypothèse de ACA	67
4.5	Combinaison de SCR et ACA	73
4.5.1	Préconditionnement SCR	73
4.5.2	Schéma à trois niveaux	76
4.6	Extension aux itérations multigroupes	78
4.7	Extension à un environnement parallèle à mémoire partagée	83
CHAPITRE 5	GMRES DANS LE CONTEXTE DE LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES	85
5.1	Implantation avec la méthode des caractéristiques	85
5.2	Préconditionnement	87
5.3	Résultats numériques préliminaires	89
5.3.1	Assemblage fortement hétérogène	89
5.3.2	Calcul d'auto-protection par une méthode de sous-groupes	92
CHAPITRE 6	CADRE DE DÉVELOPPEMENT ET MÉTHODOLOGIE DE TEST	94
6.1	Développement logiciel : le code DRAGON	94
6.2	Les benchmarks utilisés pour la validation	96
6.2.1	Benchmarks type BWR	97
6.2.2	Benchmark CANDU NG	100
6.2.3	Benchmark type PWR	101
6.3	Les tracking	103

6.4	Le processus de validation	104
6.4.1	Les librairies de sections efficaces microscopiques	105
6.4.2	Les méthodes d'auto-protection	106
6.4.3	Notations	108
CHAPITRE 7 BENCHMARKS BWR		110
7.1	Remarques préliminaires	110
7.2	Le cas BASALA-H	112
7.2.1	Notations et configurations	112
7.2.2	Convergence spatiale	114
7.2.3	Convergence vis à vis du nombre d'angles azimuthaux	115
7.2.4	Convergence vis à vis de l'ordre d'expansion de la diffusion	116
7.2.5	Comparaison des modèles d'auto-protection	117
7.3	Le cas BASALA-C	121
7.4	Le cas BASALA-V	122
7.5	Temps de calcul et efficacité des méthodes d'accélération	124
7.5.1	Dans le cadre de l'auto-protection par une méthode des sous-groupes	124
7.5.2	Dans le cadre du calcul multigroupe de flux	126
CHAPITRE 8 BENCHMARK CANDU NG		129
8.1	Modélisation de la cellule	130
8.2	Résultats pour une cellule	133
8.3	Résultats pour un assemblage de 2×2 cellules	139
8.4	Temps de calcul et efficacité des méthodes d'accélération	141
CHAPITRE 9 BENCHMARK PWR		145
9.1	Notations et configurations	146
9.2	Schéma à un niveau	149

9.2.1	Étude paramétrique	150
9.2.2	Comparaison avec TRIPOLI4	153
9.3	Schéma à deux niveaux	154
9.3.1	Effet des regroupements pour le calcul de flux du premier niveau	154
9.3.2	Effet de l'équivalence SPH	155
9.3.3	Comparaison avec TRIPOLI4	156
9.4	Temps de calcul et efficacité des méthodes d'accélération	158
CONCLUSION		160
REFERENCES		165
ANNEXES		179

LISTE DES FIGURES

FIG. 2.1	Exemple d'une trajectoire cyclique dans un domaine 2D rectangulaire avec des conditions de réflexion	15
FIG. 2.2	Formalisme d'intégration de MOC	17
FIG. 2.3	Géométrie 2D cartésienne	20
FIG. 4.1	Dépliage d'une ligne cyclique pour ACA	53
FIG. 4.2	Rayon spectral pour l'analyse de Fourier homogène avec $c = 0.5, 0.9, 0.99, 1.0$	62
FIG. 4.3	Rayon spectral maximum par rapport à τ pour l'analyse de Fourier homogène	63
FIG. 4.4	Rayon spectral pour l'analyse spectrale directe homogène pour $N = 2$ avec $c = 0.5, 0.9, 0.99, 1.0$	64
FIG. 4.5	Rayon spectral pour l'analyse spectrale directe homogène pour $N = 50$ avec $c = 0.5, 0.9, 0.99, 1.0$	65
FIG. 4.6	Figure de mérite lorsque la densité du tracking varie	70
FIG. 4.7	Figure de mérite lorsque le nombre d'angles azimuthaux varie	71
FIG. 4.8	Figure de mérite lorsque le nombre d'angles polaires varie	72
FIG. 5.1	Stratégie de relaxation pour GMRES	89
FIG. 5.2	Description de l'assemblage fortement hétérogène	90
FIG. 5.3	Histogramme de convergence pour l'assemblage fortement hétérogène	91
FIG. 6.1	Agencement d'un des sous-assemblages centraux de BASALA	98
FIG. 6.2	Géométries des assemblages BASALA	99
FIG. 6.3	Grappe de type Canflex	100
FIG. 6.4	Assemblage de type PWR	102
FIG. 6.5	Découpage des crayons de combustible	108
FIG. 7.1	Les différentes sectorisations des cellules	112

FIG. 7.2	Les différentes discrétisations du caloporteur	113
FIG. 8.1	Cellule CANDU NG discrétisée	132
FIG. 8.2	Assemblage de 2×2 cellules CANDU NG	132
FIG. 8.3	Taux de capture dans le macro-groupe 3 pour une cellule CANDU NG	136
FIG. 9.1	Les mélanges dans l'assemblage PWR	146
FIG. 9.2	Différents regroupements pour l'assemblage PWR	147
FIG. 9.3	Différentes discrétisations de la géométrie PWR	148
FIG. II.1	$ \delta_{ij} $ pour une quadrature par minimisation de E_2 à $N_p = 2$ angles	199
FIG. II.2	$ \delta_{ij} $ pour une quadrature par minimisation de E_3 à $N_p = 2$ angles	200
FIG. II.3	Comparaison des diverses quadratures pour $N_p = 2$	205
FIG. II.4	Comparaison des diverses quadratures pour $N_p = 3$	206
FIG. III.1	Source et solution exacte pour le flux dans le cas analytique 1D	218
FIG. III.2	Représentation de la source par région pour les différents schémas ($N = 18$)	219
FIG. III.3	Erreurs relatives sur les flux aux interfaces des régions	220
FIG. III.4	Erreurs relatives sur les flux moyens par région	221
FIG. III.5	Convergence du flux moyen dans la région K pour le schéma SLC	222
FIG. VIII.1	Mécanisme de décomposition ILU	268
FIG. VIII.2	Matrice \mathbb{D} avant et après renumérotation	273
FIG. VIII.3	Décomposition LU de la matrice \mathbb{D} avant et après renumérotation	273
FIG. IX.1	Géométrie du benchmark de Stepanek (maillage 16×16)	275
FIG. IX.2	Géométrie du benchmark à valeur propre	276

LISTE DES TABLEAUX

TAB. 3.1	Comparaison des méthodes synthétiques	36
TAB. 4.1	Nombre d'itérations pour les différents paramètres de tracking	68
TAB. 4.2	Figure de mérite lorsque l'ordre d'anisotropie L varie	73
TAB. 4.3	Comparaison des différentes méthodes lorsque l'ordre d'anisotropie L varie	78
TAB. 4.4	Comparaison de différentes approches multigroupes pour ACA	82
TAB. 5.1	Analyse de convergence pour le cas test de Rowlands	93
TAB. 6.1	Propriétés des assemblages BASALA	97
TAB. 6.2	Macro-groupes d'énergie pour la condensation	109
TAB. 7.1	Effet de la sectorisation	114
TAB. 7.2	Effet de la discrétisation du caloporteur	115
TAB. 7.3	Effet du nombre d'angles azimuthaux	115
TAB. 7.4	Effet de l'ordre d'expansion P_L du terme de diffusion	117
TAB. 7.5	Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour BASALA-H	118
TAB. 7.6	Taux de capture dans le macro-groupe 2	119
TAB. 7.7	Taux de capture dans le macro-groupe 3	120
TAB. 7.8	Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour BASALA-C	122
TAB. 7.9	Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour BASALA-V	124
TAB. 7.10	Auto-protection USS 2 sur l'assemblage BASALA-H	125
TAB. 7.11	Résultats en termes du coût de calcul sur le benchmark BASALA-H	127
TAB. 8.1	Comparaison des k_{eff} pour une cellule CANDU NG	134
TAB. 8.2	Comparaison DRAGON - MCNP5 pour les taux de capture dans le macro-groupe 3 (cellule pleine avec Dysprosium dans le crayon central)	137

TAB. 8.3	Comparaison DRAGON - MCNP5 pour les taux de capture dans le macro-groupe 3 (cellule vide avec Dysprosium dans le crayon central)	138
TAB. 8.4	Comparaison des k_{eff} pour un assemblage 2×2 de cellules CANDU NG	140
TAB. 8.5	Auto-protection USS 2 sur une cellule CANDU NG	142
TAB. 8.6	Auto-protection USS 1 sur une cellule CANDU NG	143
TAB. 8.7	Auto-protection USS 2 sur un assemblage de 2 × 2 cellules CANDU NG	144
TAB. 9.1	Macro-groupes d'énergie pour la condensation	149
TAB. 9.2	Effet de la discrétisation spatiale et des paramètres de tracking	150
TAB. 9.3	Utilisation d'un tracking non-cyclique	151
TAB. 9.4	Effet de l'ordre d'expansion P_L du terme de diffusion	152
TAB. 9.5	Effet des regroupements des mélanges résonnants	153
TAB. 9.6	Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour le schéma un niveau	154
TAB. 9.7	Effet des regroupements pour le calcul de flux	155
TAB. 9.8	Effet de l'équivalence SPH	156
TAB. 9.9	Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour le schéma deux niveaux	156
TAB. 9.10	Écart relatif sur le taux de fission dans le groupe 4	157
TAB. 9.11	Accélération et temps CPU pour le benchmark PWR	158
TAB. II.1	Résumé des différentes quadratures polaires	203
TAB. II.2	Les différentes quadratures comparées	204
TAB. II.3	Résultats pour la première configuration du benchmark 2D .	207
TAB. II.4	Résultats pour la deuxième configuration du benchmark 2D	208
TAB. III.1	Erreurs relatives (%) sur les flux scalaires et le taux de fuite pour le benchmark de Stepanek	224
TAB. III.2	Analyse de la convergence pour le problème à valeur propre	226

TAB. III.3	Nombre d'itérations et temps de calcul pour le problème à valeur propre	227
TAB. III.4	Analyse de convergence pour l'assemblage BASALA-H . . .	229
TAB. IV.1	Nombre de modes par parité de l en géométries 2D et 3D .	232
TAB. IV.2	Diagramme des modes interconnectés ($L \leq 2$) pour une géométrie 2D	233
TAB. IX.1	Sections efficaces macroscopiques P_2 pour le benchmark de Stepanek (en cm^{-1})	274
TAB. IX.2	Sections efficaces macroscopiques P_1 pour le benchmark à valeur propre (en cm^{-1})	276

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	CALCUL D'AUTO-PROTECTION DES RÉSONANCES .	179
I.1	L'équation de transport pour l'auto-protection	180
I.2	Traitement de l'opérateur de collision avec l'isotope résonnant . .	183
I.3	L'approche par sous-groupes : les tables de probabilités	183
I.4	Les tables de probabilités	187
I.5	Résolution des équations de sous-groupes	189
ANNEXE II	QUADRATURE ET ANISOTROPIE	191
II.1	La conservation des particules	192
II.1.1	Quadrature azimuthale	194
II.1.2	Quadrature polaire	196
II.2	Une application : quadrature polaire optimisée pour MOC en 2D	197
II.2.1	Première approche : quadrature de Gauss optimisée (G-O)	200
II.2.2	Seconde approche : quadrature optimisée par minimisation (OP_L)	201
II.2.2.1	Minimisation avec contraintes P_L	202
II.2.3	Comparaison des quadratures	203
II.2.3.1	Comparaison par rapport à E_2	204
II.2.3.2	Comparaison sur un benchmark 2D	206
II.3	Les quadratures 3D	210
ANNEXE III	SCHÉMAS D'INTÉGRATION SPATIALE LE LONG D'UNE TRAJECTOIRE	211
III.1	Présentation des schémas DD et LC	213
III.1.1	Schéma DD	213
III.1.2	Schémas linéaires	214

III.2	Comparaison des schémas	218
III.2.1	Cas analytique 1D à plaques	218
III.2.2	Benchmarks mono-énergétiques en géométrie 2D structurée	223
III.2.2.1	Problème à source	223
III.2.2.2	Problème à valeur propre	225
III.2.3	Assemblage BWR-MOX en géométrie 2D non-structurée	227
ANNEXE IV	STRATÉGIES D'INTÉGRATION DU FLUX	230
IV.1	Première approche	230
IV.2	Seconde approche	233
IV.3	Le calcul des coefficients d'intégration	236
ANNEXE V	DÉVELOPPEMENTS DE TAYLOR	238
V.1	Coefficients du schéma SC	238
V.2	Coefficients de l'accélération ACA	238
V.3	Coefficients du schéma LC	239
ANNEXE VI	LES MÉTHODES DE KRYLOV	240
VI.1	Les méthodes de Ritz-Galerkin et de résidu minimum	240
VI.1.1	Une base orthonormale de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$	240
VI.1.2	Les méthodes de Ritz-Galerkin	243
VI.1.3	Les méthodes de résidu minimum	245
VI.2	Les méthodes de Petrov-Galerkin	249
VI.3	Les méthodes hybrides	253
ANNEXE VII	ANALYSE SPECTRALE POUR ACA ET SCR	256
VII.1	Analyse de Fourier	256
VII.1.1	Itérations libres	256
VII.1.2	Itérations préconditionnées par ACA	258
VII.1.3	Itérations préconditionnées par SCR	260

VII.2	Analyse spectrale directe	260
VII.2.1	Itérations libres	260
VII.2.2	Itérations préconditionnées par ACA	262
VII.2.3	Itérations préconditionnées par SCR	263
ANNEXE VIII	ALGÈBRE DES MATRICES CREUSES POUR ACA	265
VIII.1	Définition et stockage	265
VIII.2	Renumérotation et préconditionnement	267
ANNEXE IX	BENCHMARKS 2D MONO-ÉNERGÉTIQUES	274
IX.1	1 ^{er} benchmark : problème à source	274
IX.2	2 ^{ème} benchmark : problème à valeur propre	275

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

Dans le cadre de la simulation numérique d'un réacteur nucléaire, d'un point de vue de la neutronique, un calcul direct sur la géométrie complète et détaillée du réacteur reste très cher et inabordable pour les besoins pratiques de l'industrie nucléaire. Par conséquent, une méthodologie de calcul à deux niveaux est utilisée.

La première étape est le *calcul de réseau*, détaillé en espace et en énergie, qui se fait sur une «partie représentative» * du réacteur : une cellule, un assemblage de combustible, plusieurs assemblages. Ce calcul consiste à obtenir le *flux neutronique* et les différents taux de réactions sur le domaine (discrétisé) spatial et énergétique. Évidemment, ce calcul se fait sans la connaissance des conditions que rencontre l'assemblage considéré dans le cœur du réacteur ; des conditions aux frontières de réflexion ou translation sont alors appliquées de manière à simuler un milieu infini. Pour corriger cette procédure, un modèle de fuites est bien souvent ajouté au calcul de réseau, on parle alors d'un *calcul de réseau en mode fondamentale*. Ce calcul est répété plusieurs fois en couplage avec l'évolution des différentes concentrations isotopiques à une puissance donnée, caractéristique de la puissance dégagée par cet assemblage dans le réacteur considéré. La variable *burnup* qui consiste en l'énergie totale extraite du combustible par unité de masse au temps t considéré, est généralement utilisée pour caractériser l'assemblage en évolution.

*Dans le reste du texte, dépendamment du contexte, on utilisera les termes de cellule ou assemblage pour désigner cette partie représentative du réacteur utilisée pour le calcul de réseau.

La seconde étape est le calcul de réacteur entier. Le calcul de réseau en ce sens représente l'étape intermédiaire qui permet l'obtention des propriétés nucléaires requises par un calcul neutronique de réacteur entier. Ces sections efficaces macroscopiques moyennes en énergie (*condensation*) et en espace (*homogénéisation*) sont obtenues par pondération par le flux obtenu par le calcul de réseau. Elles sont tabulées en fonction des paramètres locaux et/ou globaux du réacteur tels que le burnup, les températures des différents composants, l'enrichissement du combustible, la concentration en poison neutronique (e.g. le bore dissous dans l'eau).

Le calcul de réseau comporte une succession de modèles pour l'obtention de ces propriétés nucléaires : [Hébert, 1997]

1. Auto-protection des résonances

Les isotopes lourds, de par la structure nucléaire de leur noyau, présentent pour certaines énergies très localisées du neutron incident de très fortes probabilités d'interaction. Une étape préliminaire au calcul du flux neutronique est alors nécessaire lorsque celui-ci est réalisé dans le formalisme *multigroupe* usuel à un nombre de groupes faible (entre 50 et 300) pour le traitement de la variable énergétique. Dans ce formalisme, la dépendance énergétique des diverses quantités est représentée par des fonctions constantes par morceaux. Cette étape supplémentaire dans le calcul de réseau est reliée au phénomène d'*auto-protection* des résonances : dans une zone d'énergie correspondant à une résonance, le flux neutronique est largement atténué. Par conséquent, un calcul avec une valeur moyenne de la section efficace dans cette zone (pondérée par un flux qui ne présente pas cette dépression) conduit à une large surestimation du taux de réaction associé.

Le calcul d'auto-protection est une étape de condensation qui consiste à calculer des estimés des taux de réaction moyens et des flux moyens pour chaque isotope résonnant et pour chaque groupe d'énergie qui présente des résonances

de manière à obtenir des sections efficaces dites auto-protégées pour le calcul de flux multigroupe. Ces valeurs moyennes sont obtenues soit par interpolation directe (en fonction du paramètre de *dilution* calculé par le modèle d'auto-protection) dans des tables [Hébert & Marleau, 1991, Hébert, 2004] provenant du traitement des sections efficaces continues en énergie par un logiciel tel que NJOY99 [MacFarlane & Muir, 2000], soit par une intégration de Lebesgue, en utilisant des *tables de probabilités* [Hébert, 2005]. Les sections efficaces moyennes ainsi obtenues sont ensuite multipliées par des facteurs d'équivalence qui permettent de prendre en compte les effets non-linéaires de condensation.

2. Calcul multigroupe de flux et de fuites

Dans ce cadre, l'équation multigroupe de transport des neutrons est résolue en ajoutant un terme supplémentaire modélisant les fuites de neutrons ainsi que les effets de «streaming» isotrope et anisotrope normalement non représentés dans un calcul sur un domaine fermé [Hébert, 2001].

3. Homogénéisation et condensation des taux de réaction (équivalence)

Les flux intégrés et les taux de réaction obtenus dans le calcul multigroupe du flux sont condensés sur un nombre restreint de groupes et homogénéisés sur une géométrie simplifiée. Une pondération par les flux intégrés est réalisée pour obtenir les sections efficaces correspondant à cette géométrie et à cette discrétisation en énergie. Les sections efficaces ainsi pondérées ne permettent pas de conserver les taux de réaction (sauf dans le cas d'une géométrie homogène). Une étape d'*équivalence* peut alors être ajoutée. Par exemple, la procédure de *superhomogénéisation* (SPH) [Hébert, 1993] corrige par des facteurs multiplicatifs les sections efficaces de manière à préserver les taux de réaction.

Les étapes d'auto-protection, de calcul de flux nécessitent la résolution de l'équation

de transport des neutrons dans des conditions bien distinctes. Par ailleurs, dans le cas d'un calcul SPH où la configuration homogénéisée/condensée est utilisée ensuite dans un calcul en théorie du transport, la résolution de cette équation (avec l'opérateur considéré pour le calcul subséquent) est aussi nécessaire ; on parle d'équivalence transport-transport.

Dans le cadre des méthodes intégrales, l'utilisation de la *méthode des caractéristiques* (MOC) est maintenant commune pour le calcul multigroupe du flux ; par contre, pour l'auto-protection des résonances, la *méthode des probabilités de collision* (CP) est seule employée. La méthode des caractéristiques est une approche alternative de résolution de l'équation de transport permettant la modélisation de plus grands domaines de calcul et la prise en compte plus aisée de l'anisotropie de diffusion. Par conséquent, son introduction dans toutes les étapes du calcul de réseau est un développement souhaitable dans un logiciel avancé de transport neutronique.

1.2 Définition du travail de recherche

Dans ce cadre, l'objectif de ce doctorat est le développement de cette méthode pour toutes les étapes du calcul de réseau qui réclament la résolution de l'équation de transport. Il s'agira donc de rendre la méthode des caractéristiques interopérable avec la chaîne complète de calcul. Dans ce contexte, elle sera utilisable non seulement lors de l'étape principale de calcul du flux multigroupe, mais également par les modèles d'auto-protection. De plus, son introduction pour l'équivalence SPH permettra d'envisager une équivalence transport-MOC pour le cas où MOC est utilisé comme opérateur pour traiter la configuration homogénéisée/condensée.

Le cadre de développement logiciel est le code DRAGON [Marleau et al., 2006b]. La version de développement utilisée dans ce projet est disponible depuis sep-

tembre 2006 dans la distribution Version4 [Hébert, 2006b, Marleau et al., 2006a] des codes neutroniques du Groupe d'Analyse Nucléaire (GAN) de l'Institut de Génie Nucléaire (IGN) à l'École Polytechnique de Montréal.

1.3 Présentation de l'équation de transport dans le contexte du calcul multigroupe de flux

Avant de passer en revue les travaux antérieurs accomplis par différents scientifiques et les méthodologies envisagées pour ce doctorat, il convient de faire une brève présentation de l'équation de transport. Pour la clarté, on se limite à ce niveau à une présentation classique du calcul principal du flux multigroupe. Cette présentation va nous permettre d'arriver à une forme de l'équation commune au calcul du flux multigroupe, aux modèles d'auto-protection et à la procédure d'équivalence SPH. Ce sera la base pour la présentation à proprement dite du travail de recherche. Le contexte de l'auto-protection est détaillé à l'Annexe I. L'équivalence SPH transport-MOC bien que disponible à l'issue de ce projet n'a pas été validée; on renvoie le lecteur à [Hébert, 1993, Hébert & Mathonnière, 1993] pour une présentation du formalisme SPH.

1.3.1 Une équation linéaire de bilan

L'équation de transport, qui décrit sous forme de bilan la population neutronique au sein d'un domaine ($\vec{r} \in \mathcal{D}$, $\hat{\Omega} \in (4\pi)$, $E \in \mathcal{E}$), a la forme générale suivante à l'état d'équilibre statique [Davison, 1957]

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E), \quad (1.1)$$

où

- \vec{r} est la variable d'espace, $\hat{\Omega} = \left(\sqrt{1 - \mu^2} \cos \psi, \sqrt{1 - \mu^2} \sin \psi, \mu \right)$ est la variable angulaire et E est la variable d'énergie ;
- $\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)$ représente la valeur du *flux neutronique* pour l'élément d'hypervolume $d^3r d^2\Omega dE$ autour de $\{\vec{r}, \hat{\Omega}, E\}$. Remarquons que ce flux n'est pas un flux au sens mathématique (tel un flux de chaleur) mais simplement un outil défini à partir de la *densité neutronique* $n(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)$ par

$$\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = v(E)n(\vec{r}, \hat{\Omega}, E),$$

où $v(E)$ est la vitesse d'un neutron à l'énergie E .

- $\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)$ est le terme de fuite des neutrons de l'élément de volume d^3r autour de \vec{r} ;
- $\Sigma_t(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)$ est le terme qui compatibilise les neutrons qui quittent l'élément d'hypervolume suite à n'importe quel type d'interaction ;
- $Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)$ est l'ensemble des sources de neutrons (diffusion, fission, source externe), sous sa forme générale, on a

$$\begin{aligned} Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) &= \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}', E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') \\ &+ \chi(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') \\ &+ S_{ext}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Les milieux qui composent le domaine spatial sont considérés comme étant isotropes ; en particulier, il en découle que la réaction de diffusion n'est fonction que de $\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}'$, le cosinus de l'angle entre les directions incidente et émergente du neutron.

L'équation de transport représente donc un équilibre entre les neutrons qui disparaissent de l'élément d'hypervolume $d^3r d^2\Omega dE$ autour de $\{\vec{r}, \hat{\Omega}, E\}$ (termes de gauche) et les neutrons qui apparaissent dans ce même élément d'hypervolume (termes de droite). Dans cette équation, toutes les valeurs macroscopiques sont supposées connues :

- Σ_t , la section efficace totale ;
- Σ_s , la section efficace différentielle de diffusion (transfert entre les différentes énergies) ;
- Σ_f , la section efficace de fission ;
- ν , le nombre de neutrons secondaires issus de la fission ;
- χ , le spectre des neutrons ($\chi(E)dE$ est le nombre moyen de neutrons qui apparaissent suite à une fission à une énergie E à dE près).

Le détail des conditions aux limites nécessaires à la fermeture du système à résoudre sera présenté dans le cadre spécifique de la méthode des caractéristiques. En effet, le type de conditions est lié au formalisme d'intégration. Pour le moment, on se contentera d'une expression générale du flux entrant dans le domaine à travers sa frontière ($\vec{r} \in \partial\mathcal{D}$, $\hat{\Omega}|_{\hat{\Omega} \cdot \vec{N}^{\text{out}} < 0}$) sous la forme

$$\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \int_{\partial\mathcal{D}} d^2r' \int_{\hat{\Omega}' \cdot \vec{N}'^{\text{out}} > 0} d^2\hat{\Omega}' (\hat{\Omega}' \cdot \vec{N}'^{\text{out}}) \beta(\vec{r}', \hat{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, \hat{\Omega}) \phi(\vec{r}', \hat{\Omega}', E), \quad (1.3)$$

où \vec{N}^{out} (resp. \vec{N}'^{out}) est la normale sortante à la frontière en \vec{r} (resp. \vec{r}'). Le noyau $\beta(\vec{r}', \hat{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, \hat{\Omega})$ représente la contribution du flux sortant du domaine en $(\vec{r}', \hat{\Omega}')$ au flux entrant en $(\vec{r}, \hat{\Omega})$.

En l'absence de source externe, l'Eq. (1.1) n'a a priori pas de solution dans un milieu quelconque (l'équilibre tel quel n'est pas garanti). Deux types de calcul principal peuvent alors être réalisés :

- calcul de k_{eff} où le nombre de neutrons secondaires est modifié ($\nu \rightarrow \frac{\nu}{k_{\text{eff}}}$) afin d'obtenir une solution. Il s'agit d'un calcul de valeur propre fondamentale, $\frac{1}{k_{\text{eff}}}$ est la valeur propre dominante et le flux neutronique est le vecteur propre associé.
- calcul avec un modèle de fuites des neutrons où l'on fait intervenir un Laplacien critique (ou imposé).

Par ailleurs, on peut aussi effectuer un calcul à source où une source externe est présente.

1.3.2 Discrétisation en énergie

Dans les approches déterministes de résolution de l'équation de transport, on discrétise la variable d'énergie par une décomposition en groupes d'énergie. Le spectre d'énergie est divisé en G groupes $]E_{g+1}, E_g[$ avec $g \in [1, G]$ de telle sorte que les groupes de plus haute énergie («rapides») sont en premiers, $E_1 > E_2 > \dots > E_{G+1}$. L'équation de transport sous sa forme multigroupe s'écrit alors [Lewis & Miller, 1993]

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = Q^g(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (1.4)$$

avec

$$\begin{aligned} Q^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) &= \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \phi^{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') \\ &+ \frac{\chi^g(\vec{r})}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \int_{4\pi} d^2\Omega' \phi^{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') \\ &+ S_{ext}^g(\vec{r}, \hat{\Omega}). \end{aligned} \quad (1.5)$$

On passe bien sûr ici sur la manière dont sont définies les sections efficaces de groupe, c'est l'objet des codes de traitement des évaluations des données nucléaires et des modules de traitement des bibliothèques de sections efficaces et de calcul d'auto-protection des résonances d'un code de calcul de réseau.

1.3.3 Les différentes boucles de convergence

Le but n'est pas ici de rentrer en détail dans la manière dont la précédente équation peut être abordée numériquement, nous nous contenterons de préciser que l'on retrouve classiquement trois niveaux d'itérations [Lewis & Miller, 1993]

1. Itérations externes

Ces itérations concernent la source de fission. Il s'agit de converger sur le k_{eff} ou sur les fuites suivant le type de calcul. Classiquement, la méthode des puissances avec accélération variationnelle est utilisée pour mener à bien cette convergence.

2. Itérations multigroupes

Il s'agit d'itérations sur la propagation des neutrons entre les différents groupes d'énergie via le terme de diffusion dans la source. Suivant la méthode de résolution de l'équation de transport utilisée, un schéma de type Gauss-Seidel (quand les groupes sont traités les uns à la suite des autres) ou Jacobi (quand tous les groupes sont traités en même temps) avec une accélération par rebalancement sur les groupes d'énergie est communément utilisé.

3. Itérations internes

On considère ici la convergence spatiale en supposant les contributions des autres groupes à la source de diffusion connues.

C'est sur cette dernière boucle de convergence que nous allons porter notre attention car elle est commune à toutes les étapes du calcul de réseau et est une spécificité de la méthode des caractéristiques en comparaison de la méthode des probabilités de collision.

1.3.4 Traitement de l'anisotropie de la diffusion

En omettant l'indice de groupe, l'équation que résout la boucle interne peut être écrite sous la forme d'une équation mono-énergétique sans fission et avec source externe

$$\begin{aligned}
 \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) &= Q(\vec{r}, \hat{\Omega}), \\
 Q(\vec{r}, \hat{\Omega}) &= Q_s(\vec{r}, \hat{\Omega}) + S(\vec{r}, \hat{\Omega}), \\
 Q_s(\vec{r}, \hat{\Omega}) &= \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}'). \quad (1.6)
 \end{aligned}$$

A l'aide d'une expansion (tronquée à l'ordre L) en polynômes de Legendre des sections efficaces de diffusion, on peut écrire la source comme une expansion en harmoniques sphériques réelles

$$Q(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) (\Sigma_s^l(\vec{r}) \Phi_l^m(\vec{r}) + S_l^m(\vec{r})), \quad (1.7)$$

avec les différents moments du flux et de la source définis par

$$\Phi_l^m(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (1.8)$$

$$S_l^m(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) S(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (1.9)$$

grâce à la propriété d'orthogonalité des harmoniques sphériques

$$\int_{4\pi} d^2\Omega \mathcal{R}_{l'}^{m'}(\hat{\Omega}) \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (1.10)$$

Ces harmoniques sphériques réelles sont définies en termes des fonctions associées

de Legendre par

$$\mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) = \sqrt{(2 - \delta_{m,0}) \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}} P_l^{|m|}(\mu) \mathcal{T}_m(\psi), \quad (1.11)$$

$$\mathcal{T}_m(\psi) = \begin{cases} \cos(m\psi) & m \geq 0 \\ \sin(|m|\psi) & m < 0 \end{cases}. \quad (1.12)$$

La définition de Ferrer des fonctions associées de Legendre est utilisée

$$P_l^m(\mu) = (1 - \mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu), \quad m \geq 0. \quad (1.13)$$

Les polynômes de Legendre $P_l(\mu)$ sont calculés par récurrence à l'aide de

$$P_0(\mu) = 1, \quad P_1(\mu) = \mu \quad \text{et} \quad P_{l+1}(\mu) = \frac{1}{l+1} ((2l+1)\mu P_l(\mu) - lP_{l-1}(\mu)). \quad (1.14)$$

C'est cette forme de l'équation de transport qui va être notre point de départ dans la présentation des différentes méthodologies envisagées pour ce travail de recherche.

1.4 Organisation du rapport

Dans ce rapport, de manière à faciliter la lecture, on a pris le parti d'alléger le corps du texte en renvoyant en annexes plusieurs discussions importantes mais qui ne sont pas nécessaires en première lecture pour suivre le cheminement du projet. En conséquence, le rapport est structuré comme suit. Suite à la présentation contextuelle du présent chapitre, le Chapitre 2 présente la méthode des caractéristiques en tant que telle en insistant sur la nécessité d'accélérer la convergence de cette méthode. Ce chapitre s'accompagne des Annexes II, III et IV qui traitent de points plus spécifiques de MOC étudiés au cours de ce projet. Dans

le Chapitre 3, on fait la revue bibliographique des méthodes d'accélération en justifiant a priori les choix faits dans ce travail. On distingue deux classes de méthodes : les préconditionnements synthétiques et les méthodes de Krylov. La méthode synthétique retenue est présentée en détail au Chapitre 4 accompagné des Annexes VII et VIII. La méthode de Krylov choisie est, quant à elle, traitée au Chapitre 5 en conjonction avec l'Annexe VI. Ensuite, au Chapitre 6, on présente la méthodologie et le cadre de mise en place des algorithmes précédemment décrits. Les trois cas sélectionnés pour la procédure de test des méthodes sont traités aux Chapitres 7, 8 et 9. Finalement, la conclusion est présentée accompagnée de recommandations pour la continuation de ce travail.

CHAPITRE 2

LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

Le développement de la méthode des caractéristiques remonte à la fin des années 50 [Vladimirov, 1959] mais son utilisation était alors limitée à des géométries très simples. C'est dans les années 70 que des traitements de géométries bidimensionnelles assez compliquées ont débuté [Askew, 1972] et le code CACTUS [Halsall, 1980] est considéré comme le premier code industriel intégrant cette technique.

A l'heure actuelle, les codes utilisant la méthode des caractéristiques sont nombreux et le développement de cette approche est international. De nombreux codes de calcul de cellule en ont fait un de leurs outils majeurs. Les codes ou modules MCCG [Suslov, 1993], CHAR [Goldberg et al., 1995], MOCC [Roy, 1998], CRX [Hong & Cho, 1998], CASMO [Smith, 2000], TDT [Sanchez & Chetaine, 2000] sont des formulations de la méthode des caractéristiques pour des géométries bidimensionnelles tandis que MCI [Wu & Roy, 2003b] permet le traitement de géométries 3D.

La formulation retenue fera l'objet des prochains paragraphes. Ensuite, on discutera des différents aspects de cette technique.

2.1 Formalisme de la méthode des caractéristiques

Pour cette présentation de la méthode des caractéristiques avec anisotropie de collision, on adoptera les notations utilisées dans [Roy, 1999].

2.1.1 La procédure de tracking

On considère le domaine \mathcal{D} que l'on décompose en N régions homogènes entourées d'une frontière découpée en M surfaces. Une procédure de type *ray-tracing* ou *tracking* permet de générer un ensemble de lignes d'intégration (ou caractéristiques) Υ dans ce domaine. L'intersection d'une ligne droite avec le domaine \mathcal{D} est appelée une trajectoire. Chaque trajectoire $\vec{T} = (\hat{\Omega}, \vec{p})$ est définie par son orientation $\hat{\Omega}$ et un point de départ \vec{p} . Les directions sont générées par une quadrature numérique de l'angle solide et pour chaque direction, le point \vec{p} parcourt un plan $\pi_{\hat{\Omega}}$ orthogonal à cette direction $\hat{\Omega}$. La question des contraintes associées aux quadratures pour la conservation des particules dans le cas de la diffusion anisotrope est discutée à l'Annexe II et a fait l'objet de l'article [Le Tellier & Hébert, 2006a].

On considère ici deux types de tracking qui correspondent à deux types de conditions aux frontières. Une caractéristique *non-cyclique* \vec{T} consiste en une seule trajectoire $\vec{T} = (\hat{\Omega}, \vec{p})$ tandis qu'une caractéristique *cyclique* \vec{T} est un ensemble de trajectoires $(\vec{T}_j)_j$.

Un tracking non-cyclique requiert une approximation des conditions aux frontières par le biais de conditions dites d'albedo. Elles consistent en une représentation approchée de la distribution spatiale et angulaire des particules qui entrent dans le domaine par sa frontière. Par exemple, des conditions de réflexion de la forme

$$\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \phi(\vec{r}, \hat{\Omega} - (\hat{\Omega} \cdot \vec{N}^{\text{out}})\vec{N}^{\text{out}}), \quad \vec{r} \in \partial\mathcal{D}, \quad \hat{\Omega}|_{\hat{\Omega} \cdot \vec{N}^{\text{out}} < 0}, \quad (2.1)$$

peuvent être approchées par des conditions dites «blanches». Elles consistent en une discrétisation de la frontière $\partial\mathcal{D}$ en une partition $\cup_{\alpha} \partial\mathcal{D}_{\alpha}$ et considèrent que les particules qui quittent le domaine à travers $\partial\mathcal{D}_{\alpha}$ (de surface S_{α}) sont réémises uniformément et isotropiquement dans le domaine à travers $\partial\mathcal{D}_{\alpha}$. Dans la forme générale des conditions aux frontières de l'Eq. (1.3), elles se traduisent par un

noyau de la forme $\beta(\vec{r}', \hat{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{\alpha} \frac{1}{\pi S_{\alpha}} \chi_{\alpha}(\vec{r}) \chi_{\alpha}(\vec{r}')$ où χ_{α} est la fonction caractéristique de la frontière $\partial\mathcal{D}_{\alpha}$.

Une ligne cyclique, quant à elle, respecte les conditions aux frontières : à partir d'une trajectoire initiale \mathcal{T}_1 entrant dans le domaine, la ligne est construite à l'aide des transformations géométriques (e.g. symétrie) qui définissent les conditions aux frontières (e.g. réflexion). Une ligne cyclique est entièrement définie par sa trajectoire initiale $\mathcal{T}_1 = (\hat{\Omega}, \vec{p})$ et les conditions aux limites du domaine. Par ailleurs, \mathcal{T}_1 est choisie de manière à obtenir une ligne cyclique (périodique, par opposition à une ligne ergodique) ; les conditions de périodicité dépendent de la forme du domaine et des conditions aux frontières. On comprend aisément que ce genre de tracking ne peut être utilisé pour un domaine de forme quelconque.

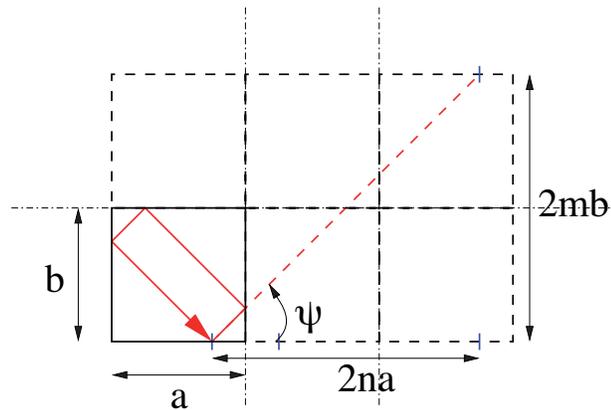


FIG. 2.1 Exemple d'une trajectoire cyclique dans un domaine 2D rectangulaire avec des conditions de réflexion

À la Fig. 2.1, la construction d'une ligne cyclique dans un domaine plan rectangulaire $a \times b$, avec des conditions de réflexion sur toutes ses faces est présentée. On en déduit la condition de périodicité en fonction de l'angle définissant la trajectoire

initiale

$$\tan(\psi) = \frac{mb}{na}. \quad (2.2)$$

Ainsi, une infinité d'angles sont convenables et comme l'ensemble des rationnels $\frac{m}{n}$ est dense dans l'ensemble des réels on peut approcher n'importe quel angle par un angle satisfaisant l'Eq. (2.2) à une précision désirée.

Le détail des conditions aux frontières traitées dans cette implémentation de la méthode des caractéristiques est donné au § 2.2. Une revue complète de la question des conditions aux frontières et du tracé des lignes d'intégration dans le cadre des méthodes de transport basées sur un formalisme de tracking est donnée dans [Sanchez et al., 2002].

Cette procédure est commune à la méthode de probabilités de collision, à la méthode des caractéristiques et aux méthodes de type Monte-Carlo.

Chaque ligne d'intégration \vec{T} est parcourue dans les deux sens, ainsi, Υ est l'union de Υ^+ et $\Upsilon^- = \{-\vec{T} \text{ où } \vec{T} \in \Upsilon^+\}$. En pratique, seul Υ^+ est stocké.

Pour une ligne d'intégration donnée $\vec{T} = (\hat{\Omega}, \vec{p})$, les données nécessaires à l'intégration numérique sont les longueurs des segments $L_k(\vec{T})$ et les indices $N_k(\vec{T})$ des régions traversées, c'est à dire $(N_k, L_k)_{k \in [1, K]}$ où K est le nombre de régions traversées par \vec{T} . Les points d'intersection entre cette ligne et les frontières des différentes régions rencontrées ainsi que les flux angulaires en ces points sont donnés par :

$$\begin{aligned} \vec{r}_{k+1} &= \vec{r}_k + L_k \hat{\Omega}, \\ \phi_k(\vec{T}) &= \phi(\vec{r}_k, \hat{\Omega}), \quad \text{avec } k \in [1, K]. \end{aligned}$$

Avec ce jeu de notations, \vec{r}_1 et \vec{r}_{K+1} sont respectivement le point par lequel cette ligne d'intégration entre et sort du domaine. Une ligne cyclique vérifie $\vec{r}_1 = \vec{r}_{K+1}$.

2.1.2 Intégration sur le tracking

La méthode des caractéristiques est une méthode de transport intégrale qui s'attache au calcul des moments moyens du flux dans les N régions du domaine. L'intégration de ces quantités passe par le changement d'intégrale suivant

$$F_j = \int_{V_j} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega f(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j,N_k} \int_{s_{k-1}}^{s_k} ds f(t, \vec{T}), \quad (2.3)$$

illustré à la Fig. 2.2. Le formalisme de tracking du paragraphe précédent prend alors tout son sens.

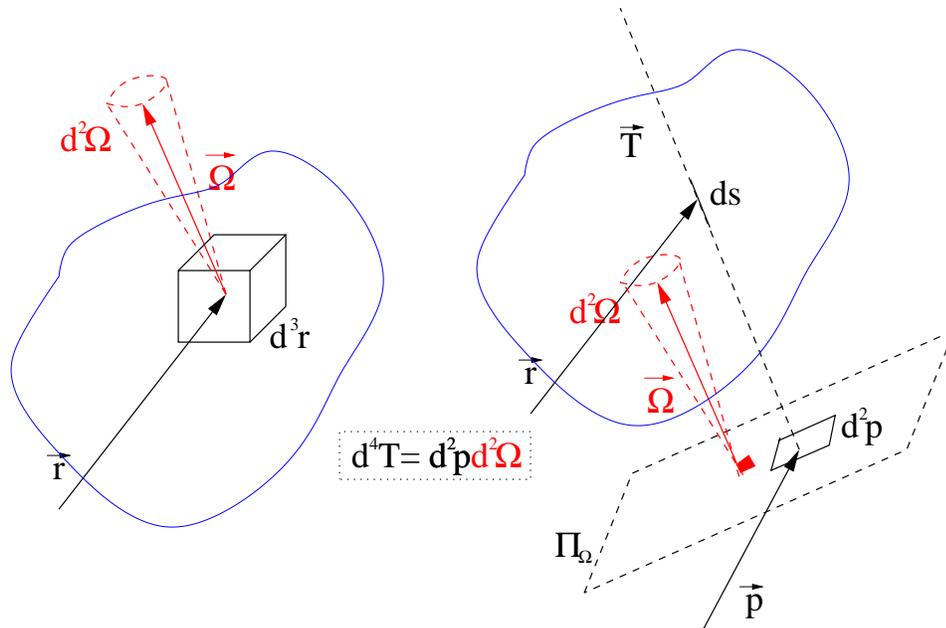


FIG. 2.2 Formalisme d'intégration de MOC

Pour des questions de renormalisation au cours de l'intégration numérique, les volumes et surfaces approchés doivent être calculés numériquement par ce formalisme. Dans le cas d'une quantité qui ne dépend pas de la direction comme le volume, on

introduit numériquement une dépendance à l'angle

$$V_j = \int_{V_j} d^3r \stackrel{\text{MOC}}{=} \tilde{V}_j(\hat{\Omega}) = \int_{\pi_{\hat{\Omega}}} d^2p \sum_{k=1}^K \delta_{j,N_k} L_k(\vec{T}). \quad (2.4)$$

Les volumes numériques sont utilisés pour renormaliser la longueur des segments de chaque ligne d'intégration $\vec{T} = (\hat{\Omega}, \vec{p})$ par

$$L_k(\hat{\Omega}, \vec{p}) \leftarrow L_k(\hat{\Omega}, \vec{p}) \frac{V_j}{\tilde{V}_j(\hat{\Omega})}.$$

Les surfaces numériques quant à elles se calculent par

$$\pi S_\alpha = \int_{\partial \mathcal{D}_\alpha} d^2r_b \int_{\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}} > 0} d^2\Omega (\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}}) \stackrel{\text{MOC}}{=} \pi \tilde{S}_\alpha = \int_{\Upsilon} d^4T \chi_\alpha(\vec{r}_{K+1}). \quad (2.5)$$

et sont utilisées lorsque l'on applique des conditions aux frontières de type albedo. $\vec{N}_\alpha^{\text{out}}$ est la normale sortante à $\partial \mathcal{D}_\alpha$ au point \vec{r}_b . Cette évaluation numérique des surfaces et volumes est faite de manière à assurer la conservation des particules.

Dans la méthode des caractéristiques, les différents moments moyens du flux pour chaque région j sont calculés par une intégration réalisée sur Υ selon

$$\begin{aligned} V_j \Phi_{l(j)}^m &= \int_{V_j} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) \\ &\stackrel{\text{MOC}}{=} \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j,N_k} L_k(\vec{T}) \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \bar{\phi}_k(\vec{T}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

où V_j est le volume de la région j et le flux angulaire moyen sur le segment $L_k(\vec{T})$ est défini par

$$L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) = \int_0^{L_k} ds \phi(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}). \quad (2.7)$$

De la même manière, le courant sortant du domaine pour chaque frontière $\partial \mathcal{D}_\alpha$

peut être exprimé sous la forme

$$\begin{aligned}
J_\alpha^{\text{out}} &= \int_{\partial\mathcal{D}_\alpha} d^2r_b \int_{\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}} > 0} d^2\Omega (\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}}) \phi(\vec{r}_b, \hat{\Omega}) \\
&\stackrel{\text{MOC}}{=} \int_{\Upsilon} d^4T \chi_\alpha(\vec{r}_{K+1}) \phi_{K+1}(\vec{T}).
\end{aligned} \tag{2.8}$$

2.1.3 Cas d'une géométrie 2D cartésienne

On considère ici le cas particulier d'une géométrie infinie et invariante selon l'axe z illustrée à la Fig. 2.3. Ce cas est d'intérêt car il est le plus fréquent dans la modélisation d'assemblages en mode fondamental. On a

$$d^4T = d^2p d^2\Omega = dr (\sin \theta dz) (\sin \theta d\psi) d\theta, \tag{2.9}$$

et en définissant $\mu = \cos \theta$, on obtient

$$d^4T = -d^2 T_{xy} \sqrt{1 - \mu^2} d\mu dz, \tag{2.10}$$

où $d^2T_{xy} = dr d\psi$.

On voit apparaître un découplage entre (ψ, r) et (μ) . La procédure de tracking se décompose alors en deux parties, un tracking dans le plan $x - y$ et une quadrature de l'angle polaire $(\mu_k, w_k^\mu)_{k \in [1, N_p]}$. Le tracking plan $\Upsilon_{xy} = \{\vec{T}_{xy}\}$ requiert une quadrature de l'angle azimuthal $(\psi_k, w_k^\psi)_{k \in [1, N_a]}$ et une stratégie pour l'intégration spatiale transverse à $(\hat{\Omega}_{xy}(\psi_k))_{k \in [1, N_a]}$. Les longueurs des segments du tracking sont alors calculés par

$$L_k(\vec{T}) = \frac{L_k(\vec{T}_{xy})}{\sqrt{1 - \mu^2}}, \tag{2.11}$$

et l'intégration des moments du flux s'écrit

$$V_j \Phi_{l(j)}^m = \int_{\Upsilon_{xy}} d^2 T_{xy} \sum_{k=1}^K \delta_{j, N_k} L_k(\vec{T}_{xy}) \int_0^1 2d\mu \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \bar{\phi}_k(\vec{T}), \quad (2.12)$$

tandis que les courant sortant s'expriment comme

$$J_\alpha^{\text{out}} = \int_{\Upsilon_{xy}} d^2 T_{xy} \chi_\alpha(\vec{r}_{K+1}) \int_0^1 2d\mu \sqrt{1 - \mu^2} \phi_{K+1}(\vec{T}). \quad (2.13)$$

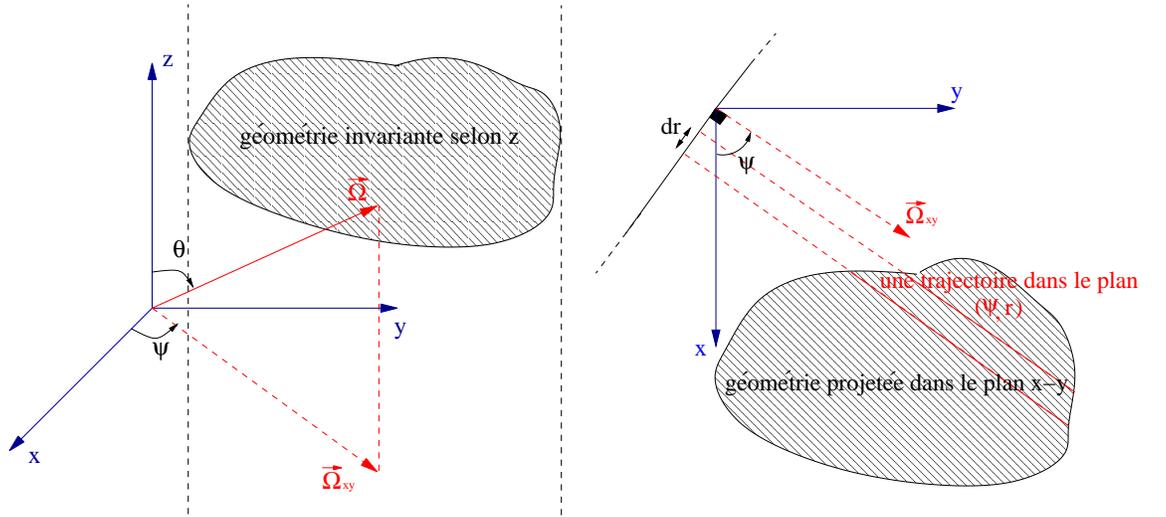


FIG. 2.3 Géométrie 2D cartésienne

2.1.4 L'équation caractéristique

Les flux sortant et moyens pour chaque segment de ligne d'intégration sont calculés en résolvant l'équation de transport dans sa forme caractéristique ($\hat{\Omega} \cdot \nabla \rightarrow \frac{d}{ds}$). On a alors à résoudre séquentiellement pour $k \in [1, K]$

$$\frac{d\phi}{ds}(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) + \Sigma_{tN_k} \phi(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) = q_k(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}), \quad \text{où } s \in [0, L_k], \quad (2.14)$$

Remarquons que la source peut présenter des discontinuités aux limites des divers segments à cause des discontinuités des propriétés nucléaires; par conséquent, de manière générale, $q_k(\vec{r}_k, \hat{\Omega}) \neq q_{k-1}(\vec{r}_k, \hat{\Omega})$.

Par intégration de l'Eq. (2.14), on obtient l'équation bilan

$$\phi_{k+1}(\vec{T}) - \phi_k(\vec{T}) + \sum_{\ell \in N_k} L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) = L_k \bar{q}_k(\vec{T}), \quad (2.15)$$

$$\text{où } L_k \bar{q}_k(\vec{T}) = \int_0^{L_k} ds q(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}).$$

La résolution de l'Eq. (2.14) requiert une hypothèse sur la dépendance spatiale du terme de source afin d'obtenir un schéma d'intégration.

Dans ce cadre, un schéma d'intégration est dit

conservatif ssi.

$$\forall l \in [0, L], \forall m \in [-l, l], \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j, N_k} L_k(\vec{T}) \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \bar{q}_k(\vec{T}) = V_j Q_{l(j)}^m, \quad (2.16)$$

où $Q_{l(j)}^m = \left(\sum_{s_j}^l \Phi_{l(j)}^m + S_{l(j)}^m \right)$ sont les moments de la source.

Dans la mesure où les intégrales sont exactes, une condition suffisante pour la conservation est que

$$\forall \vec{T} \in \Upsilon, \bar{q}_k(\vec{T}) = Q_{N_k}(\hat{\Omega}), \quad (2.17)$$

où $Q_j(\hat{\Omega})$ est la source moyenne dans la région j définie par

$$Q_j(\hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) Q_{l(j)}^m, \quad (2.18)$$

en fonction des moments du flux définis par l'Eq. (2.6). La question du choix des quadratures qui assurent la conservation est abordée à l'Annexe II.

positif ssi.

les sources $q_k(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega})$ et les flux $\phi_k(\vec{T})$, $\bar{\phi}_k(\vec{T})$ sont tous positifs.

L'approximation classique, dans le formalisme des caractéristiques, considère le terme de source constant à l'intérieur de chaque région («flat-source approximation») i.e. $\forall s \in [0, L_k]$, $q_k(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) = Q_{N_k}(\hat{\Omega})$. Ce schéma est dénommé «Step Characteristic» (SC). L'utilisation de schémas d'ordre plus élevé tels que ceux couramment utilisés avec les méthodes aux ordonnées discrètes (S_N) est problématique en termes de stockage car toute information supplémentaire requise (moments spatiaux de la source par exemple) génère un volume de données à stocker proportionnel, a priori, à la taille du tracking. Cette question a fait l'objet de l'article [Le Tellier & Hébert, 2006d] qui est repris à l'Annexe III. Dans cette présentation de la méthode des caractéristiques, on se limite au schéma SC qui, de toute manière, est de loin le plus employé.

Par cette hypothèse de source plate, l'Eq. (2.14) peut être intégrée analytiquement. Si on introduit la notation de chemin optique $\tau_k = \Sigma_{tN_k} L_k$, on obtient

$$\phi_{k+1}(\vec{T}) = \phi_k(\vec{T})A_k^{\text{SC}} + Q_{N_k}(\hat{\Omega})B_k^{\text{SC}}, \quad (2.19)$$

$$L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) = \phi_k(\vec{T})B_k^{\text{SC}} + Q_{N_k}(\hat{\Omega})C_k^{\text{SC}}, \quad (2.20)$$

où

$$A_k^{\text{SC}} = e^{-\tau_k}, \quad (2.21)$$

$$B_k^{\text{SC}} = \frac{1 - e^{-\tau_k}}{\Sigma_{tN_k}}, \quad (2.22)$$

$$C_k^{\text{SC}} = \frac{L_k}{\Sigma_{tN_k}} \left(1 - \frac{1 - e^{-\tau_k}}{\tau_k} \right), \quad (2.23)$$

sont des fonctions continues sur $]0, +\infty[$ qui peuvent être prolongées par continuité sur $[0, +\infty[$. Les développements de Taylor de ces différentes fonctions sont donnés

à l'Annexe V lorsque $\tau \rightarrow 0$.

Ainsi, l'intégration que présentent les Eqs. (2.6) et (2.8) peut être réalisée à partir du flux angulaire entrant par la frontière du domaine pour toutes les lignes d'intégration. La connaissance de ce flux dépend des conditions aux frontières et du type de tracking.

À l'Annexe IV, on discute plus en détail du choix d'une stratégie d'intégration efficace des Eqs. (2.6) et (2.8) en lien avec la question du traitement asymptotique pour de faibles parcours optiques.

2.2 Les conditions aux frontières

Dans cette implantation de la méthode des caractéristiques, on considère à la fois des tracking non-cycliques en 2D en 3D et des tracking cycliques en 2D pour un domaine rectangulaire. On notera \mathcal{F}_α la transformation géométrique d'une direction $(\vec{r}_b \in \partial\mathcal{D}_\alpha, \hat{\Omega})$ associée à une surface α . La transformée de α par \mathcal{F}_α est notée $\bar{\alpha}$ et β_α est le coefficient d'albedo associé.

On considère alors deux types de conditions aux frontières en fonction du type de tracking :

1. des conditions spéculaires pour un ligne cyclique, $\forall \vec{r}_b \in \partial\mathcal{D}_\alpha, \forall \hat{\Omega} \mid_{(\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}}) < 0}$,

$$\phi(\mathcal{F}_\alpha(\vec{r}_b, \hat{\Omega})) = \beta_\alpha \phi(\vec{r}_b, \hat{\Omega}). \quad (2.24)$$

Notons que pour une réflexion, $\mathcal{F}_\alpha(\vec{r}_b, \hat{\Omega}) = (\vec{r}_b, \hat{\Omega} - 2(\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}})\vec{N}_\alpha^{\text{out}})$ et pour une translation \mathcal{T} , $\mathcal{F}_\alpha(\vec{r}_b, \hat{\Omega}) = (\mathcal{T}(\vec{r}_b), \hat{\Omega})$.

2. des conditions isotropes pour une ligne non-cyclique, $\forall \vec{r}_b \in \partial \mathcal{D}_\alpha, \forall \hat{\Omega} |_{(\hat{\Omega} \cdot \vec{N}_\alpha^{\text{out}}) < 0}$,

$$\phi(\mathcal{F}_\alpha(\vec{r}_b, \hat{\Omega})) \approx \Phi_{\bar{\alpha}}^{\text{in}} = \beta_\alpha \Phi_\alpha^{\text{out}} = \beta_\alpha \frac{1}{\pi \tilde{S}_\alpha} J_\alpha^{\text{out}}. \quad (2.25)$$

Dans le cas de conditions blanches précédemment évoquées, $\bar{\alpha} = \alpha$.

Dans le cas où l'on considère une source de diffusion anisotrope, les conditions spéculaires requiert la prise en compte des changements de direction pour une ligne d'intégration composées de plusieurs trajectoires. Dans le cas d'un domaine rectangulaire 2D totalement réfléchi, cela est simple car les harmoniques sphériques ne sont affectées que par des changements de signe [Roy, 1991]; la connaissance de la direction de la trajectoire entrante dans le domaine pour chacune des lignes est suffisante. Dans le cas général, on doit connaître la direction de chacune des trajectoires qui forment une ligne d'intégration.

Le type de conditions aux limites a une incidence directe sur le processus itératif de résolution de l'Eq. (1.6). En effet, comme on l'a déjà mentionné, l'intégration séquentielle de l'Eq. (2.14) le long de chaque trajectoire requiert une condition initiale i.e. le flux entrant dans le domaine le long de la trajectoire considérée, $\phi_1(\vec{T})$. On distingue alors trois cas :

1. dans le cas de conditions de vide ($\beta_\alpha = 0$), le flux entrant est connu, égal à zéro ;
2. dans le cas d'un tracking cyclique, comme $\phi_1(\vec{T}) = \phi_{K+1}(\vec{T})$, on peut obtenir, par propagation le long de \vec{T} , une expression pour $\phi_1(\vec{T})$. Par exemple, dans le cas d'un domaine complètement réfléchi, on obtient

$$\phi_1(\vec{T}) = \phi_{K+1}(\vec{T}) = \phi_1(\vec{T}) A_1^K + \sum_{h=1}^K Q_{N_h}(\hat{\Omega}_h) B_h A_{h+1}^K, \quad (2.26)$$

$$\text{où } A_j^k = \begin{cases} \prod_{h=j}^k A_h & \text{si } k \geq j \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} ;$$

3. dans le cas général de conditions isotropes avec un tracking cyclique, on est obligé d'avoir recours à des itérations sur ces flux entrant. Classiquement, les itérations s'écrivent

$$\phi(\mathcal{F}_\alpha(\vec{r}_b, \hat{\Omega}))^{(n+1)} = \beta_\alpha \frac{1}{\pi \hat{S}_\alpha} J_\alpha^{\text{out}(n)}. \quad (2.27)$$

2.3 Le système à résoudre

La méthode des caractéristiques est équivalente à la méthode des probabilités de collision pour la résolution de l'équation de transport comme il est montré dans [Wu & Roy, 2003a]. En pratique, les différences entre ces deux méthodes viennent de la normalisation des probabilités de collision et du traitement de l'angle polaire pour un tracking 2D non-cyclique.

Par conséquent, l'intégration du flux telle qu'expliquée dans les paragraphes précédents peut être résumée sous la formulation matricielle suivante

$$\vec{\Phi} = \mathbb{L} \left(\vec{S} + \sum_s \vec{\Phi} \right), \quad (2.28)$$

où

- $\vec{\Phi} = \begin{bmatrix} \left(\Phi_{l(i)}^m \right)_{m,l,i} \\ \left(J_\alpha^{\text{out}} \right)_\alpha \end{bmatrix}$, vecteur de taille $(N_L + M)$ contenant les différents moments du flux des N différentes régions ($N_L = (L+1)^2 \times N$ pour une géométrie générale 3D) et les courants sortant des M différentes surfaces,
- $\vec{S} = \begin{bmatrix} \left(S_{l(i)}^m \right)_{m,l,i} \\ \mathbb{O}_{M \times 1} \end{bmatrix}$, vecteur de taille $N_L + M$ contenant les moments des sources

des différentes régions,

- \mathbb{L} , matrice de taille $(N_L + M) \times (N_L + M)$,
- $\sum_s = \begin{bmatrix} \text{diag}(\Sigma_{si}^l) & \mathbb{O}_{N_L \times M} \\ \mathbb{O}_{M \times N_L} & \mathbb{I}_M \end{bmatrix}$.

Dans le cas d'un tracking cyclique ou de conditions de vide aux frontières, les termes de courant peuvent être éliminés du système précédent qui se réduit à un système à N_L inconnues.

Le système à résoudre s'écrit donc

$$\mathbb{H}\vec{\Phi} = \mathbb{L}\vec{S}, \quad (2.29)$$

où $\mathbb{H} = \mathbb{I}_{N_L+M} - \mathbb{L}\sum_s$.

Si l'on introduit un indice d'itération n , les itérations de type Richardson communément employées pour résoudre ce système s'écrivent [Lewis & Miller, 1993]

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{L} \left(\vec{S} + \sum_s \vec{\Phi}^{(n)} \right), \quad (2.30)$$

ou encore

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{L}\vec{S} + (\mathbb{I}_{N_L+M} - \mathbb{H})\vec{\Phi}^{(n)}. \quad (2.31)$$

où $\vec{\Phi}^{(n+1)}$ est le résultat d'une itération avec $\vec{\Phi}^{(n)}$ en entrée. Cet algorithme a pour entrées \vec{S} et $\vec{\Phi}^{(n)}$ et donne en sortie $\vec{\Phi}^{(n+1)}$. C'est sous cette forme d'itérations libres que la méthode des caractéristiques est formulée traditionnellement.

On peut exprimer ce système linéaire sous une forme pratique en faisant apparaître le résidu à la $n^{\text{ième}}$ itération par

$$\mathbb{L}\vec{S} - \mathbb{H}\vec{\Phi}^{(n)} = \vec{\Phi}^{(n+1)} - \vec{\Phi}^{(n)}. \quad (2.32)$$

2.4 Contexte multigroupe

Dans le contexte multigroupe, cette boucle d'itérations est imbriquée dans un solveur multigroupe. Ainsi, dans ce contexte, les moments de la source du groupe g s'écrivent

$$S_{l(i)}^{m(g)} = F_{l(i)}^{m(g)} + \sum_{g' \neq g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \Phi_{l(i)}^{m(g')}, \quad (2.33)$$

où $F_{l(i)}^{m(g)}$ est un terme cumulatif de fission et de source externe. Sous forme vectorielle, on peut écrire

$$\vec{S}^g = \vec{F}^g + \sum_{g' \neq g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \vec{\Phi}^{g'}, \quad (2.34)$$

où les quantités sont définies de la même manière que précédemment par

- $\vec{F} = \begin{bmatrix} \left(F_{l(i)}^m \right)_{m,l,i} \\ \mathbb{O}_{M \times 1} \end{bmatrix},$
- $\sum_s^{g \leftarrow g'} = \begin{bmatrix} \text{diag} \left(\sum_{si}^{lg \leftarrow g'} \right) & \mathbb{O}_{N_L \times M} \\ \mathbb{O}_{M \times N_L} & \mathbb{O}_{M \times M} \end{bmatrix}.$

Ainsi, le système multigroupe consiste en G systèmes couplés de la forme

$$\mathbb{H}^g \vec{\Phi}^g = \mathbb{L}^g \left(\vec{F}^g + \sum_{g' \neq g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \vec{\Phi}^{g'} \right). \quad (2.35)$$

Lorsque l'intégration pour chaque groupe est faite séquentiellement comme dans la méthode des probabilités de collision, on a un schéma de Gauss-Seidel i.e.

$$\mathbb{H}^g \vec{\Phi}^{g(m+1)} = \mathbb{L}^g \left(\vec{F}^g + \sum_{g' < g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \vec{\Phi}^{g'(m+1)} + \sum_{g' > g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \vec{\Phi}^{g'(m)} \right), \quad (2.36)$$

tandis qu'une approche vectorielle conduit au schéma de Jacobi suivant

$$\mathbb{H}^g \vec{\Phi}^{g(m+1)} = \mathbb{L}^g \left(\vec{F}^g + \sum_{g' < g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \vec{\Phi}^{g'(m)} + \sum_{g' > g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \vec{\Phi}^{g'(m)} \right). \quad (2.37)$$

Bien qu'un schéma de Jacobi converge moins vite qu'un schéma de Gauss-Seidel, dans le cas de la méthode des caractéristiques, si le tracking est stocké dans un fichier résidant sur le disque dur, il peut être très pénalisant de devoir lire le fichier pour chaque groupe et une approche vectorielle est préférable.

Dans ce contexte, les itérations internes et thermiques peuvent être avantageusement combinées dans un schéma de Jacobi à un niveau sous la forme

$$\vec{\Phi}^{g(m+1)} = \mathbb{L}^g \left(\vec{F}^g + \sum_{g'=1}^G \sum_s^{g-g'} \vec{\Phi}^{g'(m)} \right). \quad (2.38)$$

Cette approche, introduite dans le solveur MCI [Wu & Roy, 2003b], a été testée et a été retenue pour ce projet. Même à peu de groupes (e.g. 20), séparer itérations internes et itérations multigroupes n'est pas avantageux.

Dans les contextes de l'auto-protection des résonances ou du calcul SPH, les itérations internes ne sont pas combinées avec un niveau supérieur d'itérations.

2.5 Tenants et aboutissants du développement de MOC

Dans ce paragraphe, nous allons insister sur les différences entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision car ces deux techniques sont directement en concurrence dans le cadre du calcul de réseau.

D'abord, un point important qui explique le développement important que connaît MOC alors que les calculs se font avec des géométries de plus en plus détaillées, concerne le stockage requis. En effet, comme le formalisme introduit précédemment le montre, d'un point de vue du calcul de flux, le stockage est en $O(N_L + M)$ i.e. des flux et des courants par régions. Ceci est à comparer avec CP qui, quant à elle, nécessite un stockage en $O(N_L^2)$ i.e. les matrices denses qui contiennent les

probabilités de collision. Évidemment, c'est un avantage important de la méthode des caractéristiques que de pouvoir traiter de larges domaines géométriques là où la méthode des probabilités de collision doit être restreinte à un nombre de régions faible (e.g. 2000).

Ensuite, comme souligné dans les paragraphes précédents, le traitement de l'anisotropie de collision est facile à intégrer avec la méthode des caractéristiques ce qui n'est pas le cas avec un formalisme de probabilités de collision où cela alourdit encore le stockage [Roy, 1991]. Ainsi, en pratique, la méthode des probabilités de collision a recours à une *correction de transport* des sections efficaces pour tenir compte approximativement du premier terme anisotrope de collision. Malheureusement, cette façon de traiter l'anisotropie se révèle inappropriée dans certains assemblages (tels que ceux de type BWR).

Évidemment, comme les deux méthodes sont très proches l'une de l'autre, ces avantages sont accompagnés de lourds inconvénients concernant la vitesse de convergence et donc la rapidité d'exécution. D'abord, de manière générale, dans un calcul, tant que les propriétés géométriques et nucléaires restent inchangées, CP ne requiert qu'une intégration sur Υ i.e. une seule lecture du tracking afin de construire les matrices de probabilités de collision. Pour MOC, chaque itération interne (au sens de la boucle d'itérations décrite précédemment) nécessite la lecture de toutes les lignes d'intégration. Comme on l'a déjà mentionné plus tôt, pour des tracking de faible taille, on peut penser à un stockage en mémoire vive des lignes d'intégration et par conséquent à un coût limité d'accès à ces données ; par contre, dès que la taille augmente, ces informations doivent résider dans un fichier et pour éviter de relire le fichier de tracking pour chaque groupe, la méthode des caractéristiques doit alors calculer le flux de manière vectorielle. Ainsi, pour le calcul multigroupe de flux, alors que CP repose sur un schéma Gauss-Seidel, MOC doit se contenter dans le cas général d'un schéma de Jacobi (qui combine les itérations internes comme

montré au § 2.4). Dans les autres contextes, MOC présente une boucle d'itérations supplémentaire par rapport à CP.

Bref, comme on l'aura compris, le développement de la méthode des caractéristiques passe avant tout par le développement de techniques d'accélération efficaces dans les différents contextes de résolution de l'Eq. (1.6). Par conséquent, les chapitres suivants vont s'intéresser à présenter les différentes classes de techniques envisagées à cette fin dans ce projet.

CHAPITRE 3

LES MÉTHODES D'ACCÉLÉRATION

Pour remédier aux désavantages intrinsèques de la méthode des caractéristiques en termes de temps de calcul, de nombreuses méthodes d'accélération ont été développées. On va ici en donner un aperçu et justifier a priori, les orientations de développement prises dans cette thèse. On se limite ici au calcul séquentiel, le lecteur est renvoyé à [Dahmani & Roy, 2005] pour la question de la parallélisation de MOC. Dans ce cadre, les manières d'accélérer la méthode des caractéristiques peuvent être classées en deux catégories.

La première, largement explorée dans le contexte des méthodes aux ordonnées discrètes [Adams & Larsen, 2002] regroupe les schémas d'itérations multi-niveaux. Chaque itération de Richardson est alors suivie d'une ou plusieurs étapes correctives pour lesquelles l'opérateur de transport fait l'objet d'hypothèses simplificatrices pour aboutir à un système dégénéré. Cette catégorie regroupe aussi bien des accélérations linéaires que non-linéaires. Parmi les méthodes linéaires, les méthodes *synthétiques* sont les plus répandues et feront l'objet du paragraphe suivant. Parmi les méthodes non-linéaires, de nombreuses méthodes sont formulées comme une correction multiplicative et procède par rebalancement spatial des flux sur un maillage plus grossier ; il s'agit de raffinements du principe de «coarse-mesh rebalance» [Park & Cho, 2004]. Ce type d'accélération n'a pas été retenue dans ce projet pour deux raisons : d'une part, elles souffrent de graves problèmes de stabilité, d'autre part, leur nature non-linéaire empêche de les combiner avec la deuxième catégorie de méthodes d'accélération.

La deuxième catégorie d'accélération regroupe les méthodes itératives pouvant ve-

nir remplacer avantageusement le schéma de type Richardson des itérations internes et sera abordée dans un deuxième temps.

3.1 Méthodes synthétiques d'accélération

Nous allons parler d'une grande famille de méthodes d'accélération que nous dénommerons de manière générique par méthodes synthétiques d'accélération.

3.1.1 Description générale

Ces méthodes se ramènent toutes d'un point de vue du formalisme d'algèbre linéaire à un préconditionnement à gauche du système initial donné à l'Eq. (2.28) i.e.

$$\mathbb{P}\mathbb{H}\vec{\Phi} = \mathbb{P}\mathbb{L}\vec{S}, \quad (3.1)$$

où \mathbb{P} est la matrice de préconditionnement. Dans ces conditions, les itérations de type Richardson prennent la forme préconditionnée suivante

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{P}\mathbb{L}\vec{S} + (\mathbb{I}_{N_L+M} - \mathbb{P}\mathbb{H})\vec{\Phi}^{(n)}. \quad (3.2)$$

En pratique, ces méthodes se présentent sous la forme d'une itération libre

$$\vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} = \mathbb{L}\left(\vec{S} + \sum_s \vec{\Phi}^{(n)}\right), \quad (3.3)$$

$$\text{ou encore } \vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} = \mathbb{L}\vec{S} - \mathbb{H}\vec{\Phi}^{(n)} + \vec{\Phi}^{(n)}, \quad (3.4)$$

suivie d'une correction additive sur les flux et courants. Cette correction est basée sur la résolution de la forme correctrice du système de transport, obtenue par sous-

traction de l'Eq. (2.30) écrite pour le flux $\vec{\Phi}^{(n+1)}$ convergé

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{L}\vec{S} + (\mathbb{I}_{N_L+M} - \mathbb{H})\vec{\Phi}^{(n+1)}, \quad (3.5)$$

et de l'Eq. (3.4). En notant $\Delta\vec{\Phi}^{(n+1)} = \vec{\Phi}^{(n+1)} - \vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})}$, on obtient

$$\Delta\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{L} \sum_s \left(\Delta\vec{\Phi}^{(n+1)} + \vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} - \vec{\Phi}^{(n)} \right), \quad (3.6)$$

soit la forme correctrice du système de l'Eq. (2.28)

$$\mathbb{H}\Delta\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{L} \sum_s \left(\vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} - \vec{\Phi}^{(n)} \right). \quad (3.7)$$

Cette équation est aussi difficile à résoudre que le système initial de l'Eq. (2.28). Par conséquent, le système correctif d'accélération est dérivé à partir de l'opérateur de transport dégénéré par une approximation. C'est sur ce type d'approximations que les méthodes diffèrent et le prochain paragraphe va passer en revue les plus intéressantes.

Dans ces conditions, la correction et le système correctif peuvent être écrits de manière générale sous la forme

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} + \mathbb{I}_{\text{int}}\vec{\Psi}^{(n+1)}, \quad (3.8)$$

$$\mathbb{D}\vec{\Psi}^{(n+1)} = \mathbb{E} \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s \left(\vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} - \vec{\Phi}^{(n)} \right). \quad (3.9)$$

où \mathbb{I}_{int} est une matrice d'interpolation de dimensions $(N_L + M) \times \tilde{N}$ avec \tilde{N} la taille du vecteur correctif $\vec{\Psi}^{(n+1)}$. En effet, le système correctif n'est pas forcément formulé dans les mêmes termes que le système de transport. Par exemple, tous les ordres d'anisotropie ne sont pas corrigés, très souvent seul le fondamental (flux scalaires et courants) est affecté. \mathbb{D} et \mathbb{E} sont alors des matrices de taille $\tilde{N} \times \tilde{N}$ et la matrice \mathbb{I}_{proj} est une matrice de projection de dimensions $\tilde{N} \times (N_L + M)$.

Dans ces conditions, la matrice de préconditionnement s'écrit

$$\mathbb{P} = \mathbb{I}_{N_L+M} + \mathbb{I}_{\text{int}} \mathbb{D}^{-1} \mathbb{E} \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s . \quad (3.10)$$

3.1.2 Méthodes synthétiques de diffusion

C'est cette première classe de méthodes qui est la plus répandue. L'opérateur de transport est directement modifié au niveau de l'équation de transport donnée à l'Eq. (2.14) par une hypothèse sur le comportement angulaire du flux. Historiquement, l'approximation P_1 ou de diffusion a été la première à être employée d'où le nom de cette classe de méthodes, «Diffusion Synthetic Acceleration» (DSA). Par ailleurs, la procédure d'intégration est inchangée. En pratique, les matrices du système correctif de l'Eq. (3.9) contiennent peu d'éléments non nuls et sont calculées une fois pour toute avant d'entrer dans la résolution de l'équation de transport.

Si on se limite à la méthode des caractéristiques, les développements les plus intéressants sont :

- La méthode dite «Asymptotic Synthetic Acceleration» (ASA) a été introduite dans [Sanchez & Chetaine, 1999, Sanchez & Chetaine, 2000]. Cette méthode ne corrige directement que les flux scalaires (et corrige non linéairement les autres moments du flux de manière à préserver la forme du flux angulaire par normalisation). L'hypothèse pour la construction du système correctif consiste à considérer que le flux entrant dans chaque région du domaine est uniforme et isotrope sur chaque surface qui délimite cette région. C'est l'analogue de la méthode J^\pm avec des conditions isotropes dans le cadre de la méthode des probabilités de collision [Marleau, 2001]. Ainsi, le système correctif à résoudre n'est pas formulé en termes de flux mais de courants aux interfaces. L'ordre de ce système pour

une géométrie 2D est $\tilde{N} \approx 5N$. La matrice \mathbb{D} n'est pas symétrique mais est à diagonale dominante.

- La méthode DP_I développée par Santandrea et Sanchez est une généralisation de ASA avec une expansion de type DP_I à chaque interface [Santandrea & Sanchez, 2002a]. Les moments du flux jusqu'à l'ordre I subissent une correction. ASA peut alors être vue comme la méthode DP_0 . En pratique seule la méthode DP_1 a été implémentée. Les premiers résultats avec la méthode DP_1 se sont montrés généralement moins bons que ceux de ASA à cause du coût de résolution du système correctif. En effet, en 2D, l'ordre du système DP_1 est le triple de celui de ASA soit $\approx 15N$. Par la suite, en améliorant la méthode de résolution du système correctif [Santandrea & Sanchez, 2005], DP_1 a permis d'obtenir de meilleurs résultats que ASA. Finalement, par analogie avec les méthodes aux courants d'interface, ces accélérations ont été reformulées dans une approche par macro-domaines [Santandrea, 2005]. Ainsi, une macro-géométrie est définie et l'hypothèse simplificatrice d'expansion DP_I pour les courants n'est faite qu'aux interfaces des macro-régions de cette géométrie. Si le coût de construction et de stockage des matrices de correction augmente, par contre, l'opérateur se rapproche de celui de transport et le coût de résolution du système correctif diminue (son ordre est désormais proportionnel aux nombres d'interfaces dans la macro-géométrie). Cette version dite "intégrale" de l'accélération DP_1 dénommée IDP_1 a donné un gain supplémentaire de l'ordre de 15 %.
- la méthode dite «Algebraic Collapsing Acceleration» (ACA) a été proposée dans [Suslov, 1993, Suslov, 2001]. Cette méthode est couramment présentée comme une extension des travaux de Khalil dans le cadre des méthodes à ordonnées discrètes [Khalil, 1988] mais en réalité, si elle emprunte les notations et les apparences dans sa dérivation, pour une géométrie générale, l'approximation est de nature différente. Ici, l'approximation de diffusion n'est pas utilisée mais, comme le travail présenté dans le chapitre suivant le montre, on a affaire à une hypothèse

simplificatrice vis à vis de l'opérateur de sommation sur le tracking analogue à la condensation par groupe pour la variable énergétique. Dans l'implémentation de Suslov, un schéma diamant est utilisé pour construire le système correctif [Suslov, 2001, Suslov, 2003]. Le système résultant est formulé en termes des flux scalaires et courants sortant à travers les surfaces de $\partial\mathcal{D}$, dépendamment des conditions aux limites ; il est d'ordre $N + M$ dans le cas général. Comme pour ASA, ACA ne corrige directement que les flux scalaires.

Si l'on ajoute à ces méthodes, la méthode de «Self-Collision Rebalancing» (SCR) détaillée au Chapitre 4, on illustre bien la problématique générale du choix d'un préconditionnement pour un système linéaire : où est le juste milieu entre la réduction du rayon spectral et les ressources pour la construction, le stockage et la résolution du système correctif ? Lorsque l'on se déplace de gauche à droite dans le Tableau 3.1, le rayon spectral de la matrice itérative diminue mais dans le même temps, la demande en ressources pour le système correctif augmente.

méthode	SCR	ACA	DP ₀	DP ₁
ordre des moments du flux accélérés	0	0	0	1
taille du système à inverser (en 2D)	0 ($\mathbb{D} = \mathbb{I}$)	$N + M$	$\approx 5N$	$\approx 15N$

TAB. 3.1 Comparaison des méthodes synthétiques

Dans ce contexte, notre intérêt s'est porté sur ACA qui présente de bons résultats et des possibilités de développement importantes. Aucune comparaison directe entre les méthodes DP_N et ACA n'est disponible mais les résultats de Suslov sur le benchmark C5G7 MOX [Lewis et al., 2001] et les résultats de Santandrea sur le benchmark Atrium [AEN-NEA, 2003] donne des facteurs d'accélération, en terme de

réduction du nombre d'itérations qui sont semblables, de l'ordre de 15. Comme le coût de **ACA** est a priori moindre que celui de DP_1 , le champ des applications pratiques pour lesquelles elle offre de bonnes performances est a priori plus vaste. Dans le cadre du code **DRAGON** et des réacteurs de type **CANDU**, un aspect important est le calcul 3D pour les sections efficaces incrémentales des contrôleurs. En 3D, bien évidemment, le nombre d'interfaces à l'intérieur du domaine augmente et les méthodes DP_I sont directement désavantagées. Par ailleurs, les résultats reportés par Suslov ont été obtenus avec une implémentation non-optimale de **ACA** où la résolution du système correctif est faite par une méthode directe de décomposition LU. Ce choix a priori a été conforté par la suite par une comparaison par analyse spectrale reproduite au Chapitre 4 entre **ACA** et DP_0 .

D'un point de vue de l'interopérabilité de ces méthodes au sein d'un code de calcul, **ACA** présente un avantage par rapport aux méthodes DP_I : en effet, ces dernières, contrairement à **ACA**, sont basées sur des données d'interfaces (pour construire la connectivité interfaces-régions pour la numérotation des inconnues du système d'accélération) qui ne font pas partie intégrante des données utilisées par MOC (le tracking) mais proviennent de l'étape d'analyse de la géométrie. Ainsi, si **ACA** peut utiliser n'importe quelle méthodologie de tracking pourvu que le format d'écriture des données soit conservé, par contre, les méthodes DP_I requièrent l'accès aux données d'analyse de la géométrie. Dépendamment de la méthodologie de tracking, un accès aisé à ces données d'interfaces n'est pas garanti. Cette atout de **ACA** est ce qui a nous a permis de «connecter» le solveur MOC de ce projet à un tracking externe moyennant un module simple de conversion du tracking (c.f. § 6.3).

Par ailleurs, la méthode **SCR**, étant donnée sa simplicité et son faible coût, a été implantée. Ceci permet de donner un point de comparaison avec les travaux du solveur MCI sur la méthode des caractéristiques en géométrie 3D. La présentation de cette méthode est différée au Chapitre 4.

Pour finir sur ces méthodes synthétiques de diffusion, on notera que des travaux ont montré les difficultés importantes que rencontrent ce genre de techniques pour des assemblages fortement hétérogènes et diffusifs [Warsa et al., 2003b].

3.1.3 Méthodes synthétiques de transport

Une deuxième grande classe de méthodes synthétiques d'accélération a fait l'objet de recherches dans le cadre de la méthode des caractéristiques. Ces méthodes dénommées «Transport Synthetic Acceleration» (TSA) ont été développées plus tardivement que les méthodes DSA, principalement par Zika et Adams à Texas A&M University. Leur formulation est isotrope et reposent sur deux modifications de l'opérateur de transport : [Zika & Adams, 2000a, Zika & Adams, 2000b]

- D'abord, la section efficace de diffusion est artificiellement réduite par l'introduction d'un facteur β et l'équation à résoudre pour le terme correctif sur un segment k d'une trajectoire \vec{T} prend la forme

$$\begin{aligned} \frac{d\psi^{(n+1)}}{ds} (\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) + (\Sigma_{tN_k} - \beta\Sigma_{sN_k})\psi^{(n+1)}(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) \\ = \frac{1}{4\pi} \left((1 - \beta)\Sigma_{sN_k} \Psi_{N_k}^{(n+1)} + \Sigma_{sN_k} (\Phi_{N_k}^{(n+\frac{1}{2})} - \Phi_{N_k}^{(n)}) \right) \quad \text{où } s \in [0, L_k]. \end{aligned}$$

Cette modification de l'équation de transport pourrait être appliquée dans n'importe laquelle des méthodes précédentes. Les résultats présentés par Zika & Adams sont très souvent peu affectés par la valeur de β et dans tous les cas, aucune procédure pour trouver une valeur optimum n'a été développée.

- Ensuite, l'intégration numérique pour le terme correctif ne se fait pas sur le tracking original mais sur un tracking plus grossier : une quadrature angulaire d'un ordre plus faible et un espacement plus grand des trajectoires permettent de l'obtenir. Aux frontières du domaine, des conditions de type réflexion compliquent grandement la tâche. Pour la correction des flux entrant dans le domaine, des

opérateurs de restriction et de prolongement doivent être définis pour passer de l’opérateur de transport à l’opérateur simplifié et inversement.

Un point intéressant de ce travail est qu’en imposant certaines contraintes dans la définition du tracking pour l’opérateur simplifié, on peut trouver un produit scalaire pour lequel la matrice \mathbb{D} est symétrique, définie positive. Ceci fiabilise beaucoup la résolution du système correctif de l’Eq. (3.9). Il est à noter que malheureusement, appliquée aux méthodes DSA, ce genre de symétrisation augmente le stockage et par la-même le coup de résolution.

Par ailleurs, la nécessité de générer un deuxième tracking et de définir des opérateurs de restriction et de prolongement compliquent grandement la méthode. De plus, et c’est là un point crucial, chaque résolution du système correctif nécessite l’intégration sur le tracking plus grossier, ainsi, la résolution de ce système correctif est plus longue que celle d’un système de type DSA. C’est une distinction que l’on peut rapprocher de celle entre la méthode des probabilités de collision et la méthode des caractéristiques et qui consiste à stocker ou non les matrices du système correctif. Ainsi, les résultats publiés avec cette méthode sont moins bons que ceux des méthodes type DSA. Nous avons donc préféré privilégier la méthode ACA dont le stockage pour les matrices du système correctif reste raisonnable, de l’ordre de $\approx 5(N + M)$.

Pour finir, comme pour les méthodes DSA, des analyses ont montré l’inefficacité de ce type de méthodes dans des milieux fortement hétérogènes et diffusifs. Pire, Chang et Adams, par une étude de Fourier de TSA, ont montré que la méthode pouvait devenir fortement divergente même dans des configurations modérément hétérogènes [Chang & Adams, 2003].

3.1.4 Contexte multigroupe

Dans le contexte du calcul principal de flux, ces méthodes de préconditionnement du système d'itérations internes peuvent être étendues de manière générale à l'accélération du système multigroupe. Par exemple, une méthode telle que **SCR** a été formulée directement comme une accélération du système multigroupe.

Si l'on considère le groupe g , le système correctif de l'Eq. (3.9) s'écrit

$$\mathbb{D}^g \vec{\Psi}^{g(n+1)} = \mathbb{E}^g \mathbb{I}_{\text{proj}}^g \sum_s^g \vec{R}^{(g)}, \quad (3.11)$$

avec $\vec{R}^{(g)} = \left(\vec{\Phi}^{g(n+\frac{1}{2})} - \vec{\Phi}^{g(n)} \right)$.

Si l'on considère maintenant le système de l'Eq. (2.38) qui combinent itérations internes et multigroupes, de la même manière qu'au § 3.1.1, on peut dériver pour chaque groupe g une forme corrective de ce système analogue à l'Eq. (3.7)

$$\mathbb{H}^g \Delta \vec{\Phi}^{g(m+1)} = \mathbb{L}^g \left(\sum_{g' \neq g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \left(\Delta \vec{\Phi}^{g'(m+1)} + \vec{R}^{g'} \right) + \sum_s^g \vec{R}^g \right). \quad (3.12)$$

Notons que si l'on considère des itérations de Jacobi (avec des itérations internes séparées), le système est le même avec le terme $\sum_s^g \vec{R}^g$ en moins.

En termes du système synthétique, on obtient

$$\mathbb{D}^g \vec{\Psi}^{g(m+1)} = \mathbb{E}^g \mathbb{I}_{\text{proj}}^g \left(\sum_{g' \neq g} \sum_s^{g \leftarrow g'} \left(\mathbb{I}_{\text{int}}^{g'} \vec{\Psi}^{g'(m+1)} + \vec{R}^{g'} \right) + \sum_s^g \vec{R}^g \right), \quad (3.13)$$

soit G système couplés.

Ce préconditionnement peut aussi être étendu aux itérations de puissance de la boucle externe dans le contexte multigroupe, c'est l'implantation de **ACA** proposée

dans [Suslov, 2001]. Pour les méthodes DP_I , cette approche a été testée ; en comparaison du préconditionnement multigroupe proposé, elle ne s'est montrée avantageuse qu'avec la méthode IDP_1 (et non avec DP_1). En effet, avec ce préconditionnement des itérations de puissance, la part du temps de calcul passée à la résolution du système correctif devient importante et un gain n'est envisageable que pour un opérateur synthétique assez proche de l'opérateur de transport initial. Comme l'analyse spectrale du Chapitre 4 le montre, *ACA* est plus proche des méthodes DP_0 ou DP_1 que de la méthode IDP_1 et par conséquent, cette approche de préconditionnement des itérations externes n'a pas été favorisée.

Finalement, ce type d'accélération peut être utilisée en tant que solveur de transport dégradé pour l'initialisation des flux et courants. Cette option a été testée avec *ACA* au Chapitre 9.

3.1.5 Conclusion

Les méthodes synthétiques d'accélération font l'objet d'un large développement et nous nous y intéresserons donc dans ce projet. Parmi elles, le choix se portera sur la première catégorie et plus particulièrement sur la méthode *ACA*. Pour l'amélioration et l'optimisation de *ACA*, on conservera comme idées développées dans les autres méthodes :

- La mise en place d'une procédure optimisée de résolution du système correctif.
- Le recours à l'analyse spectrale pour tester la méthode et la comparer à d'autres.

On notera les problèmes rencontrés par toutes les méthodes synthétiques dans des configurations fortement hétérogènes qui nous obligent à ne pas nous satisfaire uniquement d'une telle technique. En effet, si dans le calcul principal de flux, les hétérogénéités restent modérées (en comparaison des hétérogénéités utilisées dans [Warsa et al., 2003b]), par contre, pour une méthode de sous-groupe pour l'auto-

protection, les points de la quadrature (i.e. les tables de probabilités) pour les sections efficaces résonnantes peuvent avoir des ordres de grandeurs très différents qui s'approchent des hétérogénéités problématiques pour les méthodes type DSA. C'est tout naturellement alors que nous nous tournerons vers les méthodes itératives dites de Krylov qui permettent de s'affranchir de ce genre de difficultés tout en tirant partie du préconditionnement de type DSA [Warsa et al., 2003a].

3.2 Méthodes itératives de Krylov

Dans cette section, nous allons évoquer une classe de méthodes qui peuvent avantageusement remplacer les itérations de type Richardson pour la résolution de la boucle interne. Ces méthodes ont été développées dans le cadre général de la résolution des grands systèmes linéaires [Saad, 1996, Meurant, 1999]. Leur application se limite ici aux contextes d'auto-protection et de calcul SPH. Leur extension au calcul multigroupe (pour remplacer les itérations de type Jacobi) s'est montrée décevante comme des études subséquentes au travail préliminaire [Dahmani et al., 2005] l'ont montré; cette extension n'est donc pas reproduite et discutée ici.

3.2.1 Problématique

Si l'on reprend le processus itératif avec préconditionnement présenté précédemment, on a :

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{P}\mathbb{L}\vec{S} + (\mathbb{I}_{N_L+M} - \mathbb{P}\mathbb{H})\vec{\Phi}^{(n)}, \quad (3.14)$$

que l'on peut réécrire en termes du résidu à la $n^{\text{ième}}$ itération

$$\vec{r}_{(n)} = \mathbb{P}(\mathbb{L}\vec{S} - \mathbb{H}\vec{\Phi}^{(n)}) = \vec{\Phi}^{(n+1)} - \vec{\Phi}^{(n)}. \quad (3.15)$$

À partir de là, on peut écrire, en notant, $\mathbb{A} = \mathbb{P}\mathbb{H}$, $\mathbb{I} = \mathbb{I}_{N_L+M}$ et $\vec{b} = \mathbb{P}\mathbb{L}\vec{S}$

$$\vec{r}_{(n)} = (\mathbb{I} - \mathbb{A})\vec{r}_{(n-1)}, \quad (3.16)$$

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \vec{\Phi}^{(o)} + \sum_{m=1}^n \vec{r}_{(m)}. \quad (3.17)$$

Par conséquent, on a un certain polynôme d'ordre n , $\mathcal{P}_n(\mathbb{A})$ (en l'occurrence, $(\mathbb{I} - \mathbb{A})^n$) tel que le schéma itératif se réduit à

$$\vec{r}_{(n)} = \mathcal{P}_n(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}, \quad (3.18)$$

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \vec{\Phi}^{(o)} + \sum_{m=1}^n \mathcal{P}_m(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}. \quad (3.19)$$

Si l'on introduit les espaces de Krylov générés par un vecteur et une matrice

$$\mathcal{K}_{n+1}(\vec{v}, \mathbb{A}) = \text{span}(\vec{v}, \mathbb{A}\vec{v}, \dots, \mathbb{A}^n\vec{v}),$$

on voit bien que de manière générale,

$$\begin{cases} \vec{r}_{(n)} & \in \mathcal{K}_{n+1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}), \\ \vec{\Phi}^{(n+1)} & = \vec{\Phi}^{(o)} + \text{un élément de } \mathcal{K}_{n+1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}). \end{cases}$$

La question qui se pose alors est de savoir si l'on peut trouver un «meilleur» estimé $\vec{\Phi}^{(n)}$ par le choix de l'élément de \mathcal{K}_n (ou, formulé de manière équivalente, des polynômes $\mathcal{P}_m(\mathbb{A})$) qu'avec les itérations de Richardson. En ce sens, les *méthodes de Krylov* proposent une solution avantageuse.

3.2.2 Description générale

Ces méthodes reposent sur le processus suivant :

1. Projection sur l'espace de Krylov $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$

$$\vec{\Phi}^{(m)} = \vec{\Phi}^{(o)} + \vec{\Phi}_{\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})};$$

2. Orthogonalisation du résidu final $\vec{r}_{(m)}$ par rapport à un autre espace \mathcal{L}_m

$$\vec{r}_{(m)} = (\vec{b} - \mathbb{A}\vec{\Phi}^{(m)}) \perp \mathcal{L}_m.$$

Les différentes méthodes se distinguent alors par le choix de l'espace \mathcal{L}_m et du processus d'orthogonalisation. À la base, on peut distinguer trois approches [Van Der Vorst & Sleijpen, 1998] en termes de l'espace \mathcal{L}_m :

1. l'approche dite de *Ritz-Galerkin* avec $\mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$,
2. l'approche dite de *résidu minimum* avec $\mathcal{L}_m = \mathbb{A}\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ ce qui est équivalent à minimiser $\|\vec{r}_{(m)}\|_2$ sur $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$,
3. l'approche dite de *Petrov-Galerkin* avec \mathcal{L}_m un autre espace de dimension m ,

qui ont recours à deux types de procédure d'orthogonalisation :

1. le processus d'orthogonalisation de Arnoldi :

Il s'agit d'une version modifiée du processus de Gram Schmidt pour la construction d'une base orthogonale de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$.

2. le processus de bi-orthogonalisation de Lanczos :

Il s'agit d'un processus de construction de bases bi-orthogonales pour les espaces $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ et \mathcal{L}_m .

Ces catégories et méthodes sont approfondies à l'Annexe VI auquel le lecteur est renvoyé.

Autour de chaque méthode, de nombreuses variations ont souvent été développées et le catalogue de ces méthodes ne cesse de s'allonger. Pourtant, comme Meurant le mentionne explicitement dans son livre, des analyses ont montré qu'il n'était pas envisageable de trouver une méthode optimale dans tous les contextes.

3.2.3 Application à la résolution de l'équation de transport

Dans le cadre de la méthode des caractéristiques, les limitations sont importantes ; on n'a pas un accès direct à la matrice du système linéaire d'une part et d'autre part, cette matrice n'est pas symétrique. La technique envisagée par Santandrea et Sanchez de symétriser l'opérateur et d'employer une méthode de Krylov pour un système symétrique leur a permis d'obtenir d'assez bons résultats (un peu moins bons qu'avec ASA en général) [Santandrea & Sanchez, 2002a]. Pourtant la contrainte de symétrie empêche d'utiliser n'importe quel type de préconditionnement et donc d'améliorer la méthode.

C'est pour le développement des méthodes S_N que les méthodes de Krylov ont reçu le plus d'attention [Patton, 1996, Warsa et al., 2003a, Warsa et al., 2004]. Dans ces approches, c'est une implantation «directe» d'un solveur de Krylov qui a été retenue, c'est à dire sans modification a priori de l'opérateur de transport. Ainsi, ces approches utilisent une méthode de type DSA comme préconditionnement. Elles ont le grand avantage de stabiliser les préconditionnements type DSA dans les cas fortement hétérogènes.

Dans ce projet, on a opté pour une méthode qui est bien connue pour donner de bons résultats en général (et en particulier dans certaines études sus-mentionnées avec les méthodes S_N de résolution de l'équation de transport) et qui s'adapte au contexte de la méthode des caractéristiques. Il s'agit de la méthode dite «Generalized Minimal RESidual » (**GMRES**) qui a été introduite au milieu des années 80 dans [Saad & Schultz, 1986].

3.2.4 Conclusion

On a vu l'intérêt a priori d'une méthode de Krylov telle que **GMRES** utilisée avec la méthode des caractéristiques. Comme cette méthode est compatible avec **ACA** qui n'est rien d'autre qu'un préconditionnement à gauche, on rejoint le travail fait dans le cadre des méthodes à ordonnées discrètes et qui a donné des résultats intéressants.

CHAPITRE 4

PRÉCONDITIONNEMENT PAR UNE MÉTHODE DE ALGEBRAIC COLLAPSING ACCELERATION

4.1 Dérivation détaillée de la méthode

Dans ce chapitre, on présente en détail la méthode *ACA* telle que développée comme préconditionnement de la méthode des caractéristiques dans ce projet. Cette étude a fait l'objet de l'article [Le Tellier & Hébert, 2006c] et est apparue nécessaire car la dérivation initiale de Suslov est incomplète. Par ailleurs, cette dérivation a permis de proposer une amélioration de la méthode.

4.1.1 Schéma d'accélération

Comme on l'a déjà dit, à la fin d'une itération libre, *ACA* corrige de manière additive les flux scalaires et les courants (dans le cas non-cyclique) pour chaque région par

$$\Phi_{0(j)}^{0(n+1)} = \Phi_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})} + \Psi_j^{(n+1)}. \quad (4.1)$$

Les moments angulaires plus élevés du flux restent inchangés ou bien peuvent être modifiés de manière à conserver la forme du flux par

$$\Phi_{l(j)}^{m(n+1)} = \Phi_{l(j)}^{m(n+\frac{1}{2})} \times \frac{\Phi_{0(j)}^{0(n+1)}}{\Phi_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})}}. \quad (4.2)$$

Notons que cette dernière correction détruit la linéarité de l'accélération. Comme son efficacité est très limitée, elle n'a pas été retenue.

Le point de départ pour la dérivation du terme correctif est la forme corrective de l'équation de transport de l'Eq. (3.7) écrite pour une diffusion isotrope le long d'une trajectoire quelconque \vec{T}

$$\frac{d\psi^{(n+1)}}{ds}(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) + \Sigma_{tN_k} \psi^{(n+1)}(\vec{r}_k + s\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) = R_{N_k}^{(n+1)} + \Sigma_{sN_k} \Psi_{N_k}^{(n+1)}, \quad (4.3)$$

ce qui, intégré sur le segment k , donne

$$\psi_{k+1}^{(n+1)}(\vec{T}) - \psi_k^{(n+1)}(\vec{T}) + \tau_k(\vec{T}) \bar{\psi}_k^{(n+1)}(\vec{T}) = L_k(\vec{T}) \Sigma_{sN_k} (R_{N_k}^{(n+1)} + \Psi_{N_k}^{(n+1)}), \quad (4.4)$$

où

- $\Sigma_{sN_k} = \Sigma_{sN_k}^0$ est la section efficace de diffusion isotrope ;
- $R_{N_k}^{(n+1)} = (\Phi_{0(N_k)}^{0(n+\frac{1}{2})} - \Phi_{0(N_k)}^{0(n)})$ est le résidu fondamental de l'itération libre.

Notons que pour alléger la dérivation de ce chapitre où la diffusion est considérée comme isotrope, on a considéré un angle solide normalisé pour ne pas faire apparaître le facteur $\frac{1}{4\pi}$ pour le terme de source isotrope dans les équations.

4.1.2 Notations et premières relations

On se concentre ici sur la simplification de l'Eq. (4.3) le long d'une trajectoire. Pour la clarté, on omettra l'indice d'itération et la dépendance à \vec{T} ; on spécifiera simplement le sens $\pm\hat{\Omega}$ du parcours le long de cette trajectoire par un indice \pm . On utilisera la coordonnée locale $s_{k-1} = \sum_{j=1}^{k-1} L_j$ pour repérer la position \vec{r}_k sur la ligne.

On introduit la notation suivante pour les parties symétrique et antisymétrique de

n'importe qu'elle fonction de la position le long de \vec{T}

$$\begin{aligned} f^S(s) &= \frac{1}{2} (f^+(s) + f^-(s)), \\ f^A(s) &= \frac{1}{2} (f^+(s) - f^-(s)). \end{aligned}$$

Le traitement de l'Eq. (4.3) dépend du type de schéma d'intégration choisi. Si l'on utilise le schéma SC déjà utilisé pour l'intégration de l'Eq. (2.14) dans le cadre de la méthode des caractéristiques, on obtient en termes des flux entrant et sortant,

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_k^+ &= \left(\frac{1}{1 - A_k^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau_k} \right) \psi^+(s_k) - \left(\frac{1}{1 - A_k^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau_k} - 1 \right) \psi^+(s_{k-1}), \\ \bar{\psi}_k^- &= \left(\frac{1}{1 - A_k^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau_k} \right) \psi^-(s_{k-1}) - \left(\frac{1}{1 - A_k^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau_k} - 1 \right) \psi^-(s_k), \end{aligned}$$

que l'on peut réécrire comme

$$\bar{\psi}_k^+ = \frac{1 + \alpha_k}{2} \psi^+(s_k) + \frac{1 - \alpha_k}{2} \psi^+(s_{k-1}), \quad (4.5)$$

$$\bar{\psi}_k^- = \frac{1 - \alpha_k}{2} \psi^-(s_k) + \frac{1 + \alpha_k}{2} \psi^-(s_{k-1}), \quad (4.6)$$

$$\alpha_k = 2 \left(\frac{1}{1 - A_k^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau_k} \right) - 1. \quad (4.7)$$

α_k est une fonction continue sur $]0, +\infty[$ qui peut être prolongée par continuité sur $[0, +\infty[$. En pratique, on utilise des expansions en séries de Taylor pour ce coefficient en bas d'un certain seuil. L'Annexe V présente les développements de tous les coefficients qui vont apparaître dans ce chapitre. Dans le cas d'un schéma type «Weighted Diamond Differencing», l'expression reste la même avec un paramètre constant $\alpha_k = \alpha_0$. Originellement, la méthode de Suslov était utilisée avec ce schéma d'intégration mais pour assurer la consistance du schéma d'accélération et la robustesse de ACA, le schéma SC a été favorisé dans ce projet.

Avec les notations précédentes, les parties symétrique et antisymétrique de la moyenne du flux angulaire sur le segment k s'exprime par

$$\bar{\psi}_k^S = \frac{1}{2} (\psi^S(s_k) + \psi^S(s_{k-1}) + \alpha_k (\psi^A(s_k) - \psi^A(s_{k-1}))), \quad (4.8)$$

$$\bar{\psi}_k^A = \frac{1}{2} (\psi^A(s_k) + \psi^A(s_{k-1}) + \alpha_k (\psi^S(s_k) - \psi^S(s_{k-1}))). \quad (4.9)$$

En écrivant l'Eq. (4.4) pour les directions $\pm\hat{\Omega}$ et en prenant la somme et la différence, on peut écrire

$$\psi^A(s_k) - \psi^A(s_{k-1}) + \tau_k \bar{\psi}_k^S = L_k \Sigma_{s_{N_k}} (R_{N_k} + \Psi_{N_k}) \stackrel{\text{def}}{=} L_k S_k, \quad (4.10)$$

$$\psi^S(s_k) - \psi^S(s_{k-1}) + \tau_k \bar{\psi}_k^A = 0. \quad (4.11)$$

L'Eq. (4.11) peut être réécrite comme

$$\psi^A(s_k) - \psi^A(s_{k-1}) = \frac{2}{\tau_k - \alpha_k (2 + \tau_k \alpha_k)} ((2 + \tau_k \alpha_k) (\psi^S(s_k) - \bar{\psi}_k^S) + \tau_k \psi^A(s_k)). \quad (4.12)$$

En combinant cette relation avec l'Eq. (4.10), on obtient finalement

$$\psi^S(s_k) = -\frac{1}{d_k} \psi^A(s_k) + (1 - \tilde{b}_k) \bar{\psi}_k^S + b_k S_k, \quad (4.13)$$

et de la même manière,

$$\psi^S(s_{k-1}) = \frac{1}{d_k} \psi^A(s_{k-1}) + (1 - \tilde{b}_k) \bar{\psi}_k^S + b_k S_k, \quad (4.14)$$

où

$$\begin{aligned}\frac{1}{d_k} &= \frac{\tau_k}{2 + \tau_k \alpha_k}, \\ b_k &= \frac{L_k}{2} \left(\frac{1}{d_k} - \alpha_k \right), \\ \tilde{b}_k &= \sum_{t \in N_k} b_k.\end{aligned}$$

4.1.3 Les équations correctives à l'intérieur du domaine

On considère un segment k de cette trajectoire \vec{T} qui traverse une région à l'intérieur du domaine i.e. $j = k - 1$ et $l = k + 1$ sont des régions dans le domaine.

En écrivant l'Eq. (4.14) pour la région l , on obtient

$$\psi^S(s_k) = \frac{1}{d_l} \psi^A(s_k) + (1 - \tilde{b}_l) \bar{\psi}_l^S + b_l S_l,$$

qui peut être combinée avec l'Eq. (4.13) pour obtenir

$$\frac{1}{d_{kl}} \psi^A(s_k) = \left((1 - \tilde{b}_k) \bar{\psi}_k^S - (1 - \tilde{b}_l) \bar{\psi}_l^S \right) + (b_k S_k - b_l S_l), \quad (4.15)$$

où $\frac{1}{d_{kl}} = \frac{1}{d_k} + \frac{1}{d_l}$.

De la même manière, si on combine l'Eq. (4.14) et l'Eq. (4.13) écrite pour la région j , on a

$$\frac{1}{d_{jk}} \psi^A(s_{k-1}) = \left((1 - \tilde{b}_j) \bar{\psi}_j^S - (1 - \tilde{b}_k) \bar{\psi}_k^S \right) + (b_j S_j - b_k S_k). \quad (4.16)$$

En substituant les Eqs. (4.15) et (4.16) dans l'Eq. (4.10), on obtient

$$\begin{aligned} & -\frac{1-\tilde{b}_j}{d_{kl}}\bar{\psi}_j^S + \left((1-\tilde{b}_k)\left(\frac{1}{d_{kl}} + \frac{1}{d_{jk}}\right) + \frac{\tau_k}{d_{jk}d_{kl}} \right) \bar{\psi}_k^S - \frac{1-\tilde{b}_l}{d_{jk}}\bar{\psi}_l^S \\ & = \frac{b_j}{d_{kl}}S_j + \left(-b_k\left(\frac{1}{d_{kl}} + \frac{1}{d_{jk}}\right) + \frac{L_k}{d_{jk}d_{kl}} \right) S_k + \frac{b_l}{d_{jk}}S_l, \end{aligned} \quad (4.17)$$

qui connecte des régions voisines le long de cette ligne d'intégration. A ce niveau, aucune approximation n'a été introduite par rapport à la méthode des caractéristiques, on a simplement manipulé les équations le long de \vec{T} .

4.1.4 L'hypothèse synthétique

La présentation de Suslov de la méthode ACA est limitée à un tracking non-cyclique avec des conditions aux limites blanches ou de vide. Dans ce chapitre, on présente la méthode ACA avec un tracking cyclique et non-cyclique avec les conditions aux frontières correspondantes présentées au § 2.2. Cependant, afin de présenter clairement l'hypothèse ACA, on considère d'abord une ligne cyclique \vec{T} dans un domaine fermé. Avant l'utilisation dans ACA des données relatives à cette ligne, elle est «dépliée» tel qu'illustré à la Fig. 4.1. On reprend ici l'exemple de la Fig. 2.1 avec un domaine rectangulaire composé de deux régions avec des conditions aux limites de réflexion spéculaire. Comme pour ACA, on considère la diffusion isotrope, ce «dépliage» n'introduit aucune approximation et simplifie l'intégration.

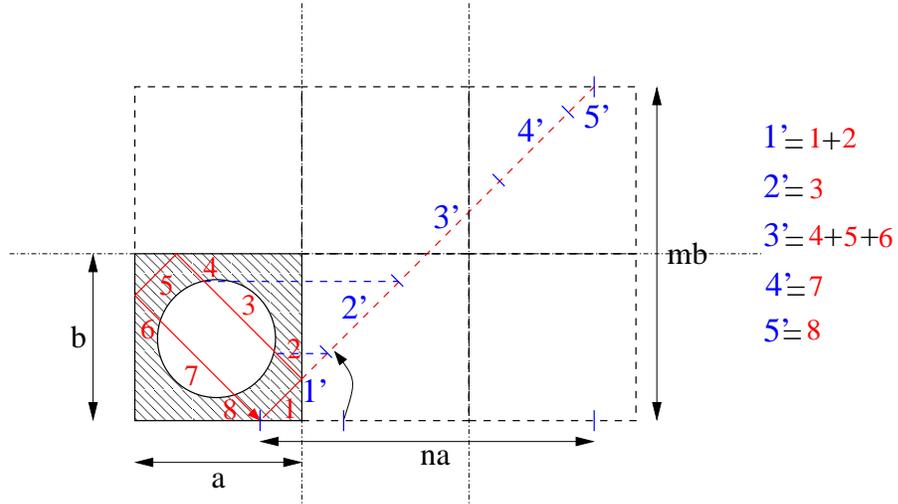


FIG. 4.1 Dépliage d'une ligne cyclique pour ACA

Comme on a affaire à une ligne cyclique dans un domaine fermé ($s_K = s_1$), les indices 0 et $K + 1$ font référence aux régions K et 1 respectivement. En écrivant l'Eq. (4.17) qui connecte les segments $(k - 1, k, k + 1)$ pour $k \in [1, K]$, on obtient un ensemble de K équations sous la forme

$$\mathbb{A}(\vec{T})\vec{\psi}(\vec{T}) = \mathbb{B}(\vec{T})\vec{S}, \quad (4.18)$$

où

- $\mathbb{A}(\vec{T})$ et $\mathbb{B}(\vec{T})$ sont des matrices tridiagonales de dimensions $K \times K$,
- $\vec{\psi}(\vec{T}) = (\bar{\psi}_k^S)_{k \in [1, K]}$ et $\vec{S} = (S_k)_{k \in [1, K]}$.

Résoudre ce système linéaire revient à intégrer les flux angulaires moyens selon l'Eq. (2.20) dans les deux sens de cette ligne d'intégration.

Ce système peut être réécrit comme

$$\mathbb{A}(\vec{T})\vec{\psi}(\vec{T}) - \mathbb{E}(\vec{T})\tilde{\Sigma}_s\vec{\Psi} = \mathbb{E}(\vec{T})\mathbb{I}_{\text{proj}}\sum_s\vec{R}, \quad (4.19)$$

où

- $\tilde{\Sigma}_s = \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s \mathbb{I}_{\text{int}}$, où \mathbb{I}_{int} et \mathbb{I}_{proj} assurent simplement dans le cas de ACA le passage d'une formulation à diffusion isotrope (pour le système correctif) à une formulation avec une diffusion anisotrope à un ordre quelconque (pour la méthode des caractéristiques),
- $\mathbb{E}(\vec{T})$ est une matrice de dimensions $K \times N$ qui correspond simplement à un passage de l'indice local k à l'indice de région $i = N_k$ pour la matrice $\mathbb{B}(\vec{T})$ i.e. $\forall j \in [1, N]$, la $j^{\text{ème}}$ colonne de $\mathbb{E}(\vec{T})$ est $\mathbb{B}(\vec{T})[\delta_{j,N_1}, \dots, \delta_{j,N_K}]^T$.

Si l'on somme sur le tracking Υ^+ , en appliquant pour $i \in [1, N]$, l'opérateur de sommation défini implicitement à l'Eq. (2.6), $\mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} = \frac{1}{V_i} \int_{\Upsilon^+} d^4T [L_{N_1} \delta_{i,N_1}, \dots, L_{N_K} \delta_{i,N_K}]$, on obtient

$$\left(\mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} \left(\mathbb{A}(\vec{T}) \vec{\psi}(\vec{T}) \right) \right)_{i \in [1, N]} - \mathbb{E} \tilde{\Sigma}_s \vec{\Psi} = \mathbb{E} \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s \vec{R}, \quad (4.20)$$

où $\forall i \in [1, N]$, la $i^{\text{ème}}$ ligne de \mathbb{E} est $\left(\mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} \left(\mathbb{E}(\vec{T}) \right) \right)$.

C'est à ce niveau que l'hypothèse synthétique est introduite; elle procède de la même manière que la condensation énergétique avec un flux plat pour la variable énergie, c'est à dire que l'on considère que

$$\left(\mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} \left(\mathbb{A}(\vec{T}) \vec{\psi}(\vec{T}) \right) \right)_{i \in [1, N]} \stackrel{\text{ACA}}{=} \mathbb{A} \vec{\Psi}, \quad (4.21)$$

en utilisant le fait que $\mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} \left(\vec{\psi}(\vec{T}) \right) = \Psi_i$ tel qu'exprimé à l'Eq. (2.6) et en écrivant, comme pour la matrice \mathbb{E} ,

$$\mathbb{A} = \left(\mathbb{A}_{ij} = \mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} \left(\mathbb{A}(\vec{T}) [\delta_{j,N_1}, \dots, \delta_{j,N_K}]^T \right) \right)_{i, j \in [1, N]}.$$

En d'autres termes, chaque ligne est découplée du reste du tracking; la contribution de chaque segment du tracking dans la région i au flux scalaire correctif Ψ_i est considérée comme constante i.e. $\bar{\psi}_k^S \stackrel{\text{ACA}}{=} \Psi_{N_k}$. On voit bien qu'à la limite d'un tracking qui ne contient qu'une seule ligne d'intégration, le système devient équivalent au

système originel. Par ailleurs, on voit que dans le cas d'une géométrie 1D à plaques, cette hypothèse se réduit à une hypothèse de symétrie angulaire sous la forme $\frac{1}{2} \left(\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \psi(\vec{r}, -\hat{\Omega}) \right) \stackrel{\text{ACA}}{=} \Psi(\vec{r})$.

4.1.5 Le système correctif

En utilisant le résultat de l'approximation synthétique, l'Eq. (4.17) peut être écrite sous la forme

$$\begin{aligned} & -\frac{a_j}{d_{kl}} \Psi_{N_j} + \left(a_k \left(\frac{1}{d_{kl}} + \frac{1}{d_{jk}} \right) + (\Sigma_{tN_k} - \Sigma_{sN_k}) \frac{L_k}{d_{jk} d_{kl}} \right) \Psi_{N_k} - \frac{a_l}{d_{jk}} \Psi_{N_l} \\ & = \frac{b_j}{d_{kl}} \Sigma_{sN_j} R_{N_j} + \left(-b_k \left(\frac{1}{d_{kl}} + \frac{1}{d_{jk}} \right) + \frac{L_k}{d_{jk} d_{kl}} \right) \Sigma_{sN_k} R_{N_k} + \frac{b_l}{d_{jk}} \Sigma_{sN_l} R_{N_l}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

où $a_k = 1 - (\Sigma_{tN_k} - \Sigma_{sN_k}) b_k$.

Dans le cas d'un tracking cyclique avec des conditions de réflexion spéculaire, le système correctif de l'Eq. (4.20) peut directement être dérivé de l'Eq. (4.22) en appliquant $\mathcal{S}_i^{\text{r}+}$. Il est finalement écrit sous la forme

$$\mathbb{D} \vec{\Psi} = \mathbb{E} \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s \vec{R}, \quad (4.23)$$

où $\mathbb{D} = \mathbb{A} - \mathbb{E} \tilde{\Sigma}_s$.

4.1.6 Traitement des conditions aux frontières

Dans le cas particulier de conditions spéculaires avec un tracking cyclique, les conditions aux frontières ne requiert pas de traitement particulier mais dans le cas général d'une ligne non cyclique, l'Eq. (4.22) n'est valide que pour $k \in [2, K-1]$ et on peut dériver quatre équations supplémentaires (deux pour la frontière d'entrée et deux

pour la frontière de sortie) pour fermer le système correctif formulé cette fois en termes des flux scalaires moyens par région et des flux sortant par les différentes surfaces de la frontière. Notons que cette dérivation diffère de l'approche de Suslov et conduit à des équations différentes dans le cas de conditions blanches. Il semble que la dérivation de Suslov soit incorrecte dans ce cas.

On considère la dernière région K de cette ligne d'intégration; elle se trouve à la frontière du domaine et le point de sortie s_K dans la direction $+\hat{\Omega}$ est sur la frontière $\partial\mathcal{D}_\alpha$. Naturellement, le résultat est dérivé de la même manière pour le premier segment de la ligne. On continue de noter $j = K - 1$.

L'Eq. (4.16) est toujours valide et en la substituant dans l'Eq. (4.10), on obtient

$$\begin{aligned} & -a_j\Psi_{N_j} + (a_K + (\Sigma_{tN_K} - \Sigma_{sN_K})\frac{L_K}{d_{jK}})\Psi_{N_K} \\ & = b_j\Sigma_{sN_j}R_{N_j} + (-b_K + \frac{L_K}{d_{jK}})\Sigma_{sN_K}R_{N_K} - \frac{1}{d_{jK}}\psi^A(s_K). \end{aligned} \quad (4.24)$$

De plus, l'Eq. (4.13) donne

$$\psi^S(s_K) = -\frac{1}{d_K}\psi^A(s_K) + a_K\Psi_{N_K} + b_K\Sigma_{sN_K}R_{N_K}. \quad (4.25)$$

Ces deux équations sont celles que l'on cherche pour clore le système correctif mais il faut pour cela exprimer $\psi^S(s_K)$ et $\psi^A(s_K)$.

La correction à la frontière est écrite comme $\Phi_\alpha^{\text{in}(n+1)} = \Phi_\alpha^{\text{in}(n+\frac{1}{2})} + \Psi_\alpha^{\text{out}}$ de manière à satisfaire dans les termes du système correctif les conditions aux frontières isotropes

$$\Phi_\alpha^{\text{in}(n+1)} = \beta_{\bar{\alpha}}\Phi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}(n+1)}. \quad (4.26)$$

En utilisant une hypothèse synthétique pour l'intégration du courant sortant de l'Eq. (2.8) similaire à celle pour l'intégration du flux, on peut écrire $\psi^+(s_K) \stackrel{\text{ACA}}{=} \Psi_\alpha^{\text{out}}$. De plus en considérant des conditions isotropes pour le système correctif, on a $\psi^-(s_K) \stackrel{\text{ACA}}{=} \Psi_\alpha^{\text{in}}$.

À ce niveau, les relations entre $\psi^S(s_K) = \Psi_\alpha^S$, $\psi^A(s_K) = \Psi_\alpha^A$, le terme correctif Ψ_α^{out} et le résidu $R_{\bar{\alpha}}$ dépendent uniquement du type de conditions aux frontières. En utilisant les conditions aux frontières appliquées à l'itération n

$$\Phi_\alpha^{\text{in}(n+\frac{1}{2})} = \beta_{\bar{\alpha}} \Phi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}(n)}, \quad (4.27)$$

et la définition du résidu $R_{\bar{\alpha}} = (\Phi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}(n+\frac{1}{2})} - \Phi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}(n)})$, l'Eq. (4.26) peut être écrite sous la forme

$$\Psi_\alpha^{\text{in}} = \beta_{\bar{\alpha}} (R_{\bar{\alpha}} + \Psi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}}). \quad (4.28)$$

Par conséquent, on obtient

$$\Psi_\alpha^S = \frac{1}{2} (\Psi_\alpha^{\text{out}} + \beta_{\bar{\alpha}} (R_{\bar{\alpha}} + \Psi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}})), \quad (4.29)$$

$$\Psi_\alpha^A = \frac{1}{2} (\Psi_\alpha^{\text{out}} - \beta_{\bar{\alpha}} (R_{\bar{\alpha}} + \Psi_{\bar{\alpha}}^{\text{out}})). \quad (4.30)$$

Pour des conditions blanches, ces relations deviennent

$$\Psi_\alpha^S = \frac{1}{2} R_\alpha + \Psi_\alpha^{\text{out}}, \quad (4.31)$$

$$\Psi_\alpha^A = -\frac{1}{2} R_\alpha, \quad (4.32)$$

qui peuvent être remplacées dans les Eqs. (4.24) et (4.25).

Dans le cas particulier de conditions de vide, on a

$$\Psi_\alpha^S = \Psi_\alpha^A = \frac{1}{2}\Psi_\alpha^{\text{out}}. \quad (4.33)$$

Comme $\Phi_\alpha^{\text{in}(n+1)}$ est connu (égal à 0), Ψ_α^{in} n'est plus une inconnue du système correctif; on a besoin uniquement d'une relation à cette frontière pour fermer le système. En utilisant les Eqs. (4.33) et (4.25), Ψ_α^A peut être exprimé sous la forme

$$\Psi_\alpha^A = \frac{d_K}{d_K + 1} (a_K \Psi_{N_K} + b_K \Sigma_{sN_K} R_{N_K}), \quad (4.34)$$

et remplacé dans l'Eq. (4.24).

4.1.7 Amélioration de l'hypothèse synthétique

Si l'on revient au § 4.1.4 où l'on a défini l'hypothèse **ACA**, on peut dériver un autre système correctif en remplaçant l'opérateur $\mathcal{S}_i^{\Upsilon^+}$ par $\mathcal{S}_i^{T^+}$ où T^+ est un tracking construit à partir de Υ^+ par regroupements en utilisant une procédure dite «Tracking Merging Technique» (**TMT**) décrite dans [Wu & Roy, 2003a]. Il s'agit de regrouper les lignes d'intégration qui traversent les mêmes régions dans le même ordre (l'ensemble de ces lignes est appelé une *micro-bande*) afin de créer par pondération une ligne équivalente. Cette procédure est en $O(\delta L_k^2)$ sur $\bar{\phi}_k$ vis à vis de la variation de L_k dans la région N_k entre toutes les lignes d'une même micro-bande.

Cette approche n'est pas une dégradation inconsistante de la méthode **ACA** mais une accélération qui décompose l'hypothèse **ACA** en deux niveaux. En effet, on a

maintenant deux hypothèses successives

$$\Psi_i = \mathcal{S}_i^{\Upsilon^+} \left(\vec{\psi}(\vec{T}) \right) \stackrel{\text{TMT}}{=} \mathcal{S}_i^{T^+} \left(\vec{\psi}(\vec{T}) \right), \quad (4.35)$$

$$\left(\mathcal{S}_i^{T^+} \left(\mathbb{A}(\vec{T}) \vec{\psi}(\vec{T}) \right) \right)_{i \in [1, N]} \stackrel{\text{ACA}}{=} \mathbb{A} \vec{\Psi}. \quad (4.36)$$

L'idée est d'introduire une hypothèse assez raisonnable (Eq. (4.35)) de manière à améliorer la validité de l'hypothèse de départ ; en effet, comme T^+ contient moins de lignes d'intégration que Υ^+ , l'hypothèse de l'Eq. (4.36) est moins grossière que celle de la méthode **ACA** originelle présentée à l'Eq. (4.21).

Cette variante de **ACA** est dénommée «Two-step **ACA** » dans le reste du document. Bien évidemment, les performances des deux approches ne devraient pas être trop différentes mais la méthode présentée dans ce paragraphe a l'avantage inconditionnel de réduire largement le temps de construction des matrices \mathbb{D} et \mathbb{E} du système correctif.

4.2 Analyse spectrale

Comme on l'a déjà mentionné au Chapitre 3, l'analyse spectrale est un outil très utile pour faire une première évaluation des performances d'une méthode d'accélération linéaire et faire des comparaisons entre diverses méthodes. Ainsi, **ACA** et **Two-step ACA** ont été comparées avec les méthodes **SCR** et **ASA** déjà mentionnées. Cette étude a d'abord été présentée dans [Le Tellier & Hébert, 2005] puis reprise dans [Le Tellier & Hébert, 2006c] avec l'ajout de **Two-step ACA**.

Dans le contexte des méthodes synthétiques, cette analyse spectrale est couramment faite sous la forme d'une analyse de Fourier avec l'hypothèse d'un milieu infini comme dans [Zika & Larsen, 1999, Sanchez & Chetaine, 2000]. Par conséquent,

nous avons utilisé cette approche et dérivé le spectre de Fourier de **ACA** et **Two-step ACA** pour un milieu infini en géométrie 1D à plaques. Pourtant, cette approche est insuffisante car elle ne prend pas en compte l'impact des conditions aux limites sur le processus itératif. Dans [Sanchez, 2004] basé sur une analyse spectrale directe, Sanchez a montré que les modes antisymétriques liés aux conditions aux limites peuvent dominer le rayon spectral pour des régions de faibles dimensions optiques. Si l'on considère un tracking cyclique dans un domaine fermé de N régions, on reproduit par périodicité un milieu infini et les flux entrant dans le domaine peuvent être éliminés du système itératif. Pourtant, même dans ce cas, comme l'a montré Sanchez, on a seulement inclusion du spectre d'une telle configuration dans le spectre de Fourier et les deux deviennent égaux uniquement lorsque $N \rightarrow \infty$. Par conséquent, lorsque l'on compare les résultats obtenus par une analyse de Fourier avec ceux d'un code de calcul sur un domaine fermé, les résultats peuvent différer de manière significative comme dans [Chang & Adams, 2003]. Afin d'évaluer l'effet des conditions aux frontières sur le spectre du système préconditionné par **ACA**, on a aussi utilisé l'approche par analyse spectrale directe pour une géométrie finie 1D composée de N plaques avec des conditions aux frontières de translation spéculaire.

On se concentre ici sur le cas d'une géométrie homogène. L'analyse de Fourier pour un milieu périodique composé de deux matériaux différents a été faite mais n'a pas apporté de conclusions supplémentaires.

Pour la clarté de la présentation, la dérivation des spectres par analyse de Fourier et directe est renvoyée à l'Annexe VII. Dans ce paragraphe, on se contente d'en analyser les résultats. Les résultats pour **ASA** sont reproduits à partir de [Sanchez & Chetaine, 2000] et [Sanchez, 2004] tandis que les résultats pour **ACA** et **SCR** ont été obtenus dans le cadre de ce travail. Pour **ACA**, l'analyse de Fourier s'apparente à celle présentée dans [Khalil, 1988].

Dans le cas particulier d'une géométrie 1D à plaques, il est intéressant de remarquer que Two-step **ACA** se réduit à une seule approximation ; comme la procédure **TMT** regroupe toutes les lignes en une seule, l'Eq. (4.36) n'introduit plus d'approximation. Le nombre d'angles de la quadrature de type Gauss-Legendre est fixé à 10 dans $[0, \pi/2]$. Dans ce cas, l'influence de ce paramètre est faible à l'exception intéressante d'un angle unique. En effet, dans ce cas, **ASA** et **ACA** deviennent identiques à l'opérateur de transport et par conséquent, assurent la convergence en une seule itération.

4.2.1 Analyse de Fourier

La Fig. 4.2 présente le comportement du rayon spectral des quatres techniques d'accélération pour diverses valeurs du ratio de diffusion $c = \Sigma_s/\Sigma_t$,

$$c \in \{0.5, 0.9, 0.99, 1.0\},$$

lorsque l'épaisseur optique des plaques de la géométrie augmente. Pour un milieu infini, on rappelle que l'analyse de Fourier donne un rayon spectral pour les itérations libres égal à c .

On voit que **SCR** est bien moins efficace que les autres techniques et n'accélère même plus du tout dans le pire des cas pour $c = 1.0$. **ASA** donne les meilleurs résultats en moyenne mais à mesure que c s'approche de 1.0, **ACA** devient plus proche de **ASA** et dans le pire des cas pour $c = 1.0$, elle est meilleure pour certaines valeurs de τ . Two-step **ACA** donne des résultats intermédiaires entre **ASA** et **ACA**.

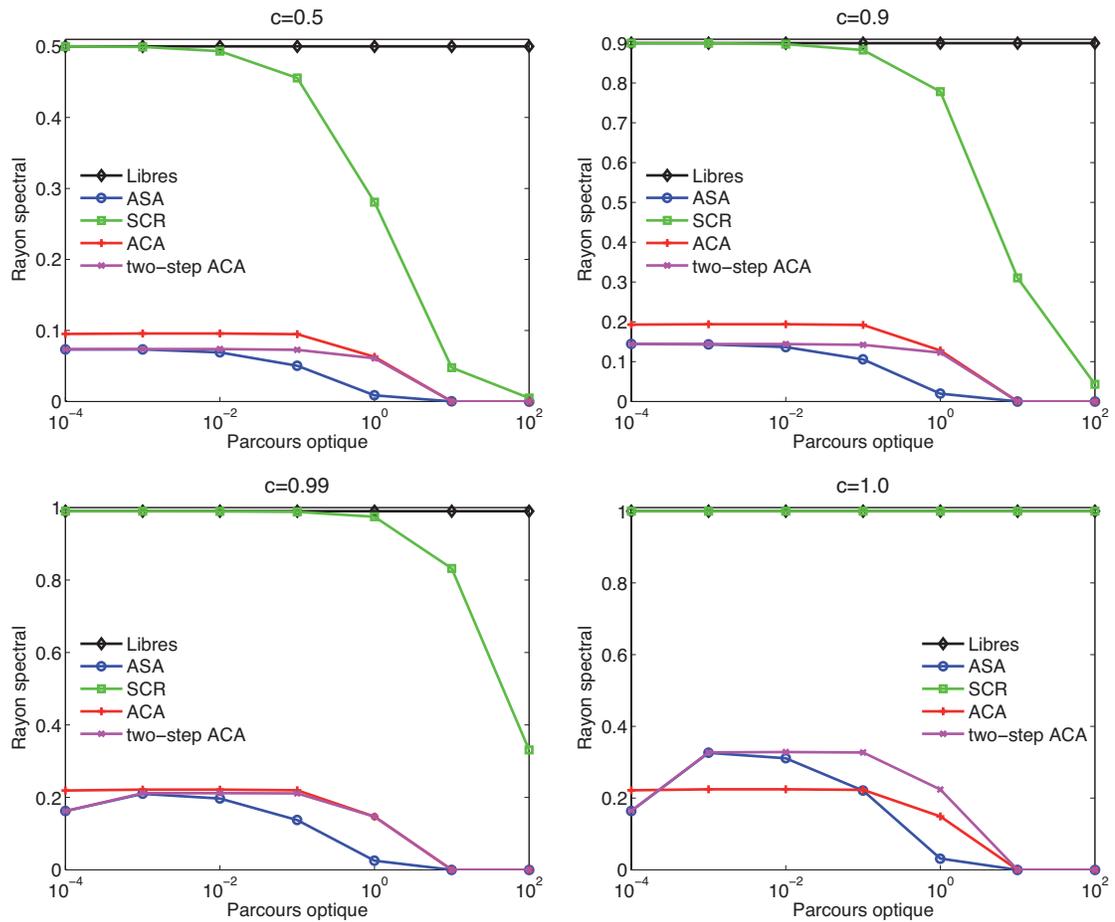


FIG. 4.2 Rayon spectral pour l'analyse de Fourier homogène avec $c = 0.5, 0.9, 0.99, 1.0$

À la Fig. 4.3, on a résumé les résultats de cette analyse de Fourier pour le cas d'un milieu infini en présentant les variations du rayon spectral maximum vis à vis de l'épaisseur optique lorsque le ratio de diffusion augmente. On voit que Two-step ACA donne quasiment les mêmes résultats que ASA et que, excepté pour c vraiment proche de 1.0, ces résultats sont légèrement meilleurs que la version original de ACA. SCR et les itérations libres sont confondues avec la droite $\rho = c$ dans ce cas.

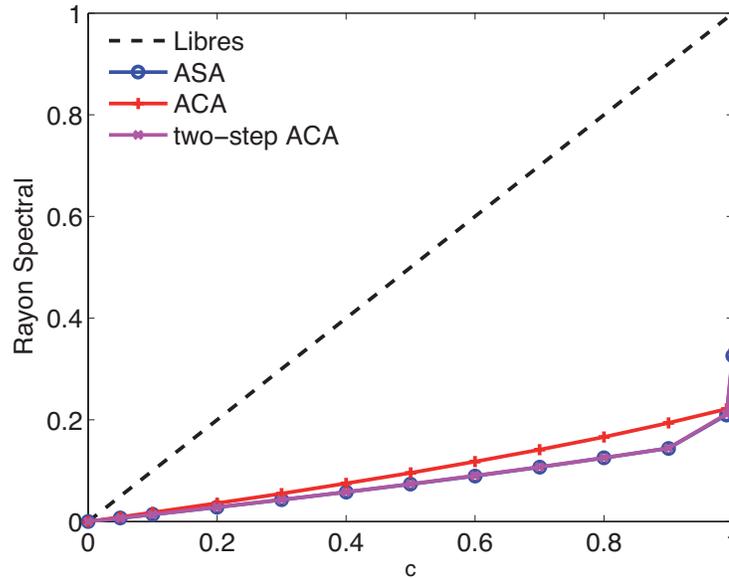


FIG. 4.3 Rayon spectral maximum par rapport à τ pour l'analyse de Fourier homogène

4.2.2 Analyse spectrale directe

Les Figs. 4.4 et 4.5 présentent le rayon spectral des diverses méthodes pour différentes valeurs de c lorsque l'on augmente τ pour $N = 2$ et $N = 50$ respectivement. On voit que pour un faible parcours optique, indépendamment de c , le rayon spectral pour toutes les méthodes est proche de 1.0 à cause des modes anti-symétriques issus des conditions aux frontières. Lorsque τ augmente, le spectre des différents opérateurs se rapprochent des spectres obtenus par analyse de Fourier. Évidemment, ceci est d'autant plus marqué que le nombre de régions est élevé. Pour ce qui est de la comparaison entre les méthodes, les tendances observées par l'analyse de Fourier sont retrouvées ici.

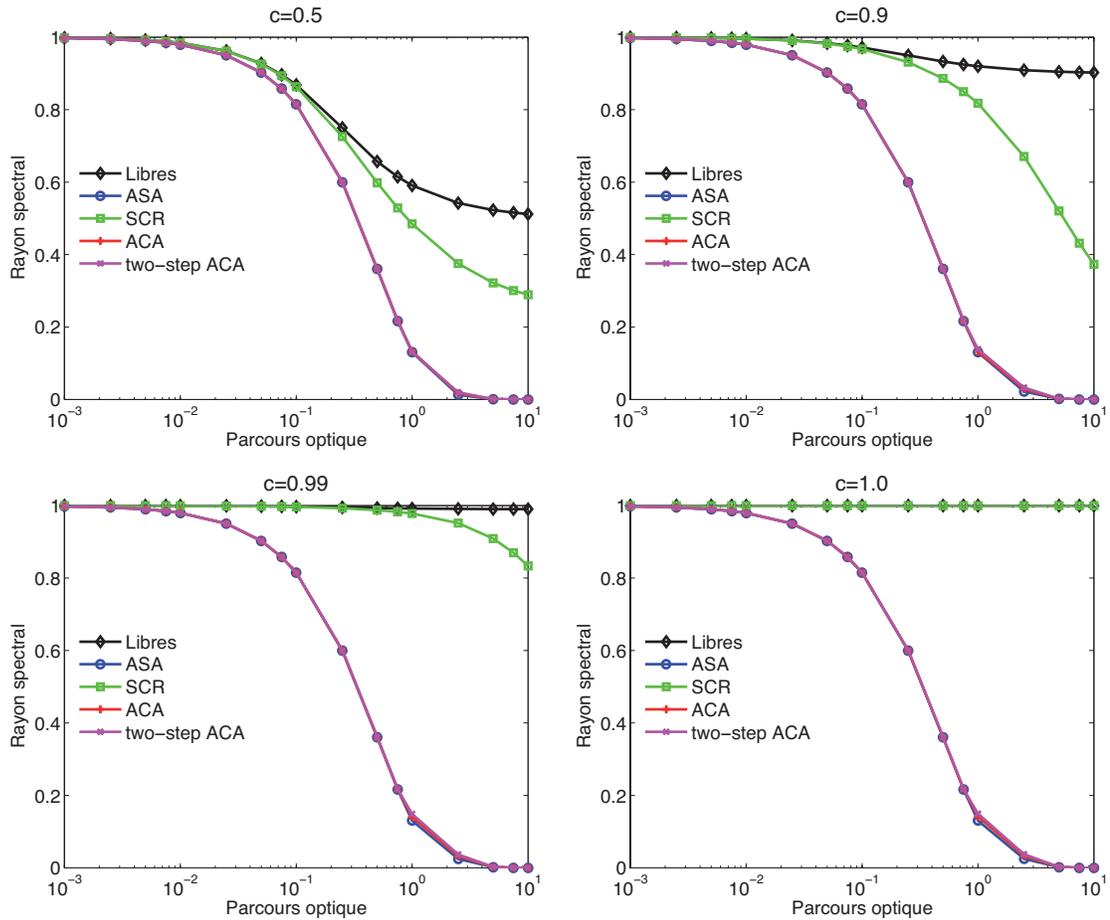


FIG. 4.4 Rayon spectral pour l'analyse spectrale directe homogène pour $N = 2$ avec $c = 0.5, 0.9, 0.99, 1.0$

Dans le cas de deux régions, les spectres de ASA, ACA et Two-step ACA sont presque confondus quel que soit c . Les deux versions de ACA donnent un rayon spectral toujours légèrement au-dessus de celui de ASA. Pour ACA, la différence maximum est de 0.01 pour τ proche de 1.0 tandis que le rayon spectral de ASA est environ égal à 0.142. À cinquante régions, la différence entre ces trois méthodes est plus prononcée pour τ plus grand que 0.02 et s'accroît à mesure que c s'approche de 1.0. Two-step ACA est globalement meilleure que ACA à l'exception du cas où $c = 1.0$ où le rayon spectral est dégradé dans la zone $\tau \in [0.2, 2]$. Ceci est cohérent avec ce

que l'on a observé par l'analyse de Fourier.

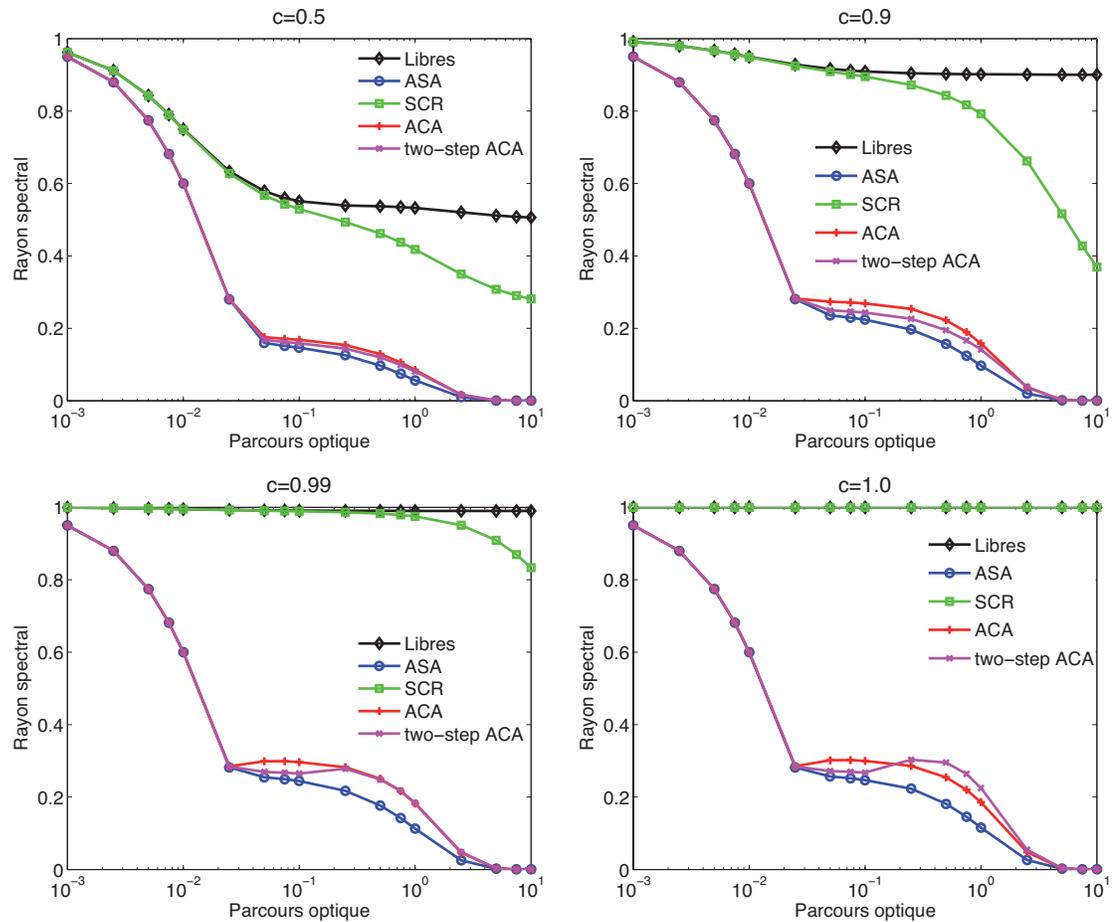


FIG. 4.5 Rayon spectral pour l'analyse spectrale directe homogène pour $N = 50$ avec $c = 0.5, 0.9, 0.99, 1.0$

Pour résumer, Two-step ACA améliore globalement les performances de ACA; ces méthodes offrent une bonne réduction du rayon spectral, bien meilleure que celle de SCR, proche de celle de ASA. Comme le coût en stockage, en temps de construction et de résolution du système ACA est bien moindre que celui lié à ASA, on peut s'attendre à de meilleures accélérations. Une comparaison faite sur le 1^{er} benchmark de l'Annexe IX dans [Le Tellier & Hébert, 2005] a confirmé cette tendance.

4.3 Méthodologie de résolution du système correctif

L'inversion itérative du système correctif à la fin de chaque itération de la méthode des caractéristiques est un facteur important dans l'efficacité d'une technique d'accélération et cela requiert une attention particulière. On se contente dans ce paragraphe d'exposer le choix que nous avons fait, le détail des méthodes est présenté à l'Annexe VIII.

Par construction, la matrice \mathbb{D} est creuse et les techniques spécifiques développées en mathématiques appliquées pour la résolution des grands systèmes linéaires creux telles qu'exposées dans [Saad, 1996, Meurant, 1999] sont disponibles. Par ailleurs, une librairie «open-source» telle que P_SPARSLIB [Saad & Wu, 1995] fournit un point de départ intéressant pour une implémentation efficace de ces techniques dans une version dédiée au contexte de ACA. La procédure à implémenter comprend les points suivants :

- le format de stockage des matrices ;
- la renumérotation des inconnues pour réduire la largeur de bande de la matrice ;
- le préconditionnement type ILU ;
- la méthode itérative de Krylov.

Pour le choix des méthodes, le travail de comparaison réalisé par Santandrea dans [Santandrea & Sanchez, 2005] avec les méthodes DP_0 et DP_1 nous a facilité la tâche. En effet, les contextes sont similaires et comme les systèmes générés par ACA sont a priori plus aisés à résoudre que les systèmes DP_I de par leur taille, une technique trop coûteuse (préconditionnement ou méthode de résolution) dans le contexte des méthodes DP_0 et DP_1 sera vraisemblablement inefficace pour la résolution du système ACA.

Ainsi, on a opté pour un préconditionnement ILU0 et une méthode de Krylov à récurrence courte, Bi-CGSTAB.

4.4 Illustration des propriétés de l'hypothèse de ACA

La discussion détaillée de l'implantation logicielle des diverses méthodes discutées dans les premiers chapitres de ce document est différée au Chapitre 6. On se contentera pour les résultats préliminaires présentés dans ce chapitre et le suivant de mentionner que ces diverses méthodes ont été implémentées dans le code de calcul de réseau DRAGON [Marleau et al., 2006b].

L'hypothèse ACA procède par un découplage au niveau de l'opérateur de sommation sur le tracking et par conséquent est a priori directement affectée par le raffinement des paramètres angulaires et spatiaux de la procédure de tracking. Pour illustrer cette dépendance et caractériser la robustesse de ACA vis à vis de ce raffinement, on utilise un benchmark mono-énergétique proposé dans [Stepanek et al., 1982]. La description de ce benchmark est donnée à l'Annexe IX (c.f. 1er benchmark). Il s'agit d'un problème à source avec une expansion des sections efficaces de diffusion à l'ordre P_2 .

Ce benchmark est un bon test numérique pour des méthodes d'accélération car les gradients de flux sont forts dans l'assemblage. La configuration de base pour les tests présentés est la géométrie discrétisée avec un maillage 16×16 , c'est à dire que chaque région est coupée en $n_{\text{split}} = 4$ selon les axes x et y . La procédure de tracking utilise un pas spatial uniforme de 0.1 cm, 8 angles azimuthaux et 4 angles polaires issus d'une quadrature trapézoïdal tandis que la diffusion est considérée isotrope. À partir de cette configuration, on a réalisé trois analyses en variant respectivement la densité du tracking, le nombre d'angles azimuthaux et le nombre d'angles polaires.

Le critère de convergence est

$$\frac{\left\| \vec{\Phi}^{(n+1)} - \vec{\Phi}^{(n)} \right\|_{\infty}}{\left\| \vec{\Phi}^{(n+1)} \right\|_{\infty}} \leq 10^{-5},$$

pour la convergence sur les flux scalaires.

Pour chaque configuration, le calcul a été fait pour des itérations libres, accélérées par **ACA** et accélérées par **Two-step ACA**. Les nombres d'itérations sont notés respectivement n_0 , n_1 , n_2 et les précisions atteintes, ϵ_0 , ϵ_1 , ϵ_2 . Les nombres d'itérations pour les divers cas sont donnés au Tableau 4.1 où l'on peut voir que les performances de **ACA** sont peu sensibles au raffinement du tracking. Ceci est cohérent avec ce qui peut être observé lors de l'utilisation de **ACA** pour des études paramétriques sur des assemblages réalistes.

		Densité du tracking (cm^{-1})								
		2.0-10.0	20.0	30.0	40.0	50.0	75.0	100.0		
n_0		244	245	246	246	244	244	250		
n_1		6	6	6	7	7	8	8		
n_2		6	6	6	6	6	6	8		
		Nombre d'angles azimuthaux					Nombre d'angles polaires			
		4	8	16	32	64	2	4	8	16
n_0		243	244	245	247	247	245	244	246	245
n_1		6	6	6	6	7	6	6	6	6
n_2		6	6	6	6	7	6	6	6	6

TAB. 4.1 Nombre d'itérations pour les différents paramètres de tracking

Pour aller plus loin et dégager des effets dus au raffinement du tracking, on présente

les résultats à l'aide de la quantité suivante

$$\rho_i = \sqrt[n_i]{\epsilon_i},$$

qui peut être vue comme un estimateur du rayon spectral de la matrice itérative. Les résultats sont alors présentés à l'aide de figures de mérite pour **ACA** et **Two-step ACA** définies par $\frac{\rho_0}{\rho_1}$ et $\frac{\rho_0}{\rho_2}$ respectivement.

De plus, on s'est intéressé au ratio **TMT** défini comme le ratio entre le nombre de segments dans Υ^+ et celui dans T^+ . En effet, cela donne une idée du gain dans le temps de construction du système correctif entre **ACA** et **Two-step ACA**.

La Fig. 4.6 présente le comportement de la figure de mérite lorsque la densité du tracking varie. Comme on pouvait s'en douter, on a pas affaire à une fonction régulière étant donné que la convergence de **ACA** est atteinte en un faible nombre d'itérations. Néanmoins, en ce qui concerne **ACA**, on peut décomposer la figure en deux zones. Pour une densité inférieure à 30 cm^{-1} , les variations de la figure de mérite sont faibles et l'hypothèse synthétique donne des résultats stables avec $n_1, n_2 = 6$ dans cette zone. Pour une densité plus grande, les performances de **ACA** se dégradent de manière notable (n_1 commence à augmenter); on voit que cette dégradation est largement retardée avec **Two-step ACA**. Cet effet est causé directement par l'hypothèse synthétique de l'Eq. (4.21) qui devient de plus en plus grossière à mesure que la densité du tracking augmente. La méthode **TMT** permet de retarder grandement la perte d'efficacité de **ACA** qui n'apparaît que pour une densité plus grande que 75 cm^{-1} avec **Two-step ACA**. En effet, lorsque la densité varie, **TMT** permet de conserver un nombre de lignes d'intégration regroupées à peu près constant; le ratio **TMT** évolue de manière linéaire au même titre que le nombre de lignes d'intégration vis à vis de la densité. Par conséquent, l'hypothèse **ACA** de l'Eq. (4.36) ne se dégrade pas, les variations de performances de **Two-step ACA** sont

directement dues à la dégradation de l'hypothèse TMT de l'Eq. (4.35) qui devient significative pour une plus grande densité.

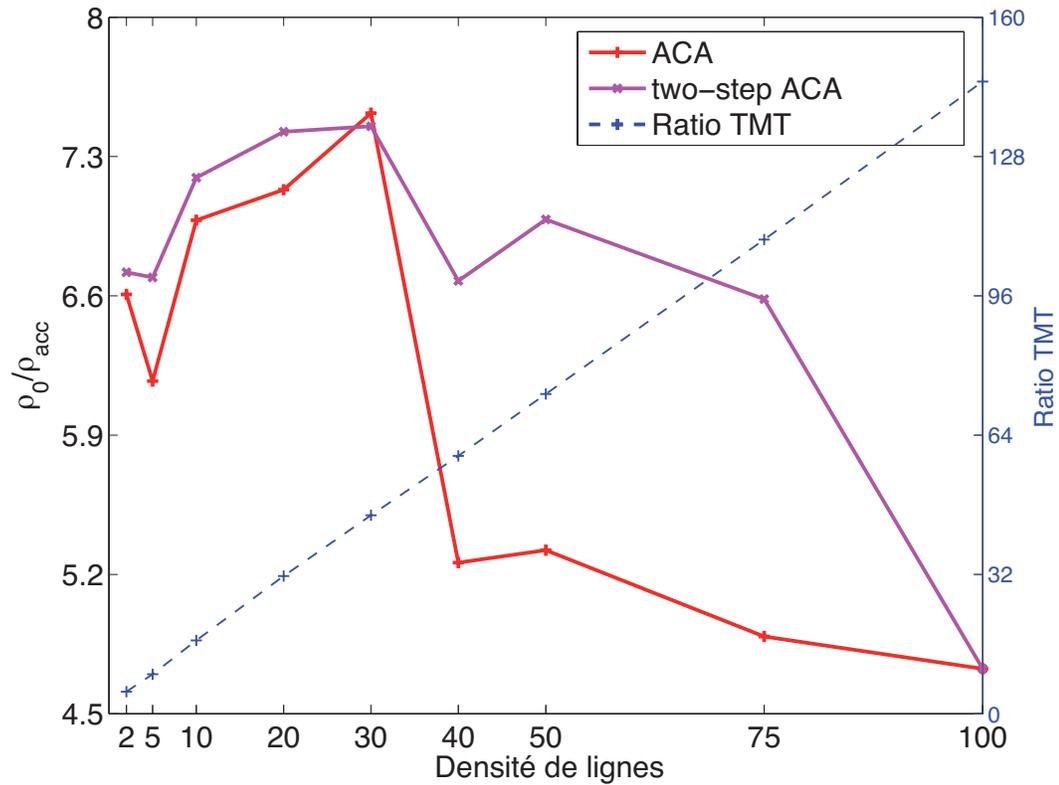


FIG. 4.6 Figure de mérite lorsque la densité du tracking varie

À la Fig. 4.7, on fait varier le nombre d'angles azimuthaux de 4 à 64. On observe une stabilité des performances avec une diminution notable seulement pour 64 angles. Ce comportement est satisfaisant dans la mesure où l'intervalle de ces variations est moins important qu'à la Fig. 4.6 où l'on faisait varier la densité du tracking. Il est intéressant de noter que dans ce cas, le ratio TMT se stabilise rapidement et par conséquent, les comportements de ACA et Two-step ACA sont similaires.

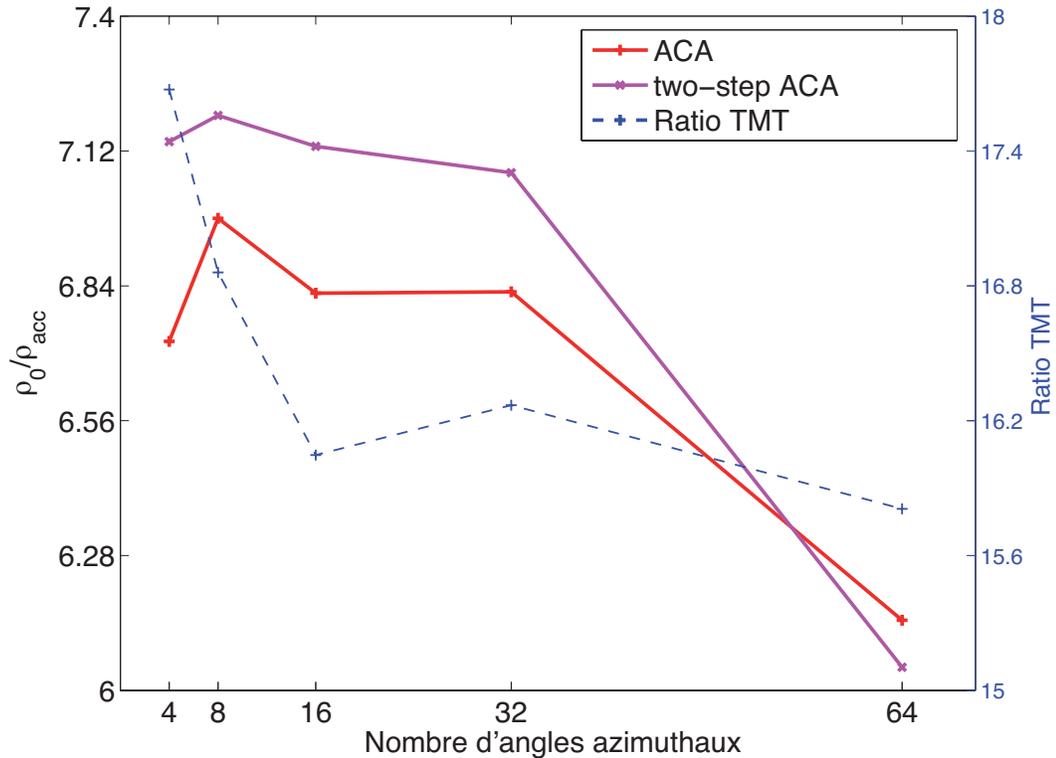


FIG. 4.7 Figure de mérite lorsque le nombre d'angles azimuthaux varie

Finalement, à la Fig. 4.8, on fait varier le nombre d'angles polaires de 2 à 16. Comme dans le cas de l'angle azimuthal, l'amplitude des variations de la figure de mérite est plutôt faible. On observe une légère dégradation des performances tout à fait cohérente avec la nature de l'hypothèse synthétique. Le nombre de lignes le long desquelles le flux est intégré est directement proportionnel au nombre d'angles polaires ; par conséquent, comme avec TMT tous les angles polaires sont regroupés en un seul en 2D, l'hypothèse ACA de l'Eq. (4.36) n'est pas affectée directement par le nombre d'angles. Ainsi, comme dans le cas de la densité du tracking, les performances de Two-step ACA sont totalement liées à la dégradation de l'hypothèse TMT de l'Eq. (4.35). Dans ce cas, on observe une diminution puis une stabilisation (l'augmentation de la figure de mérite n'est pas significative) des performances de

Two-step ACA.

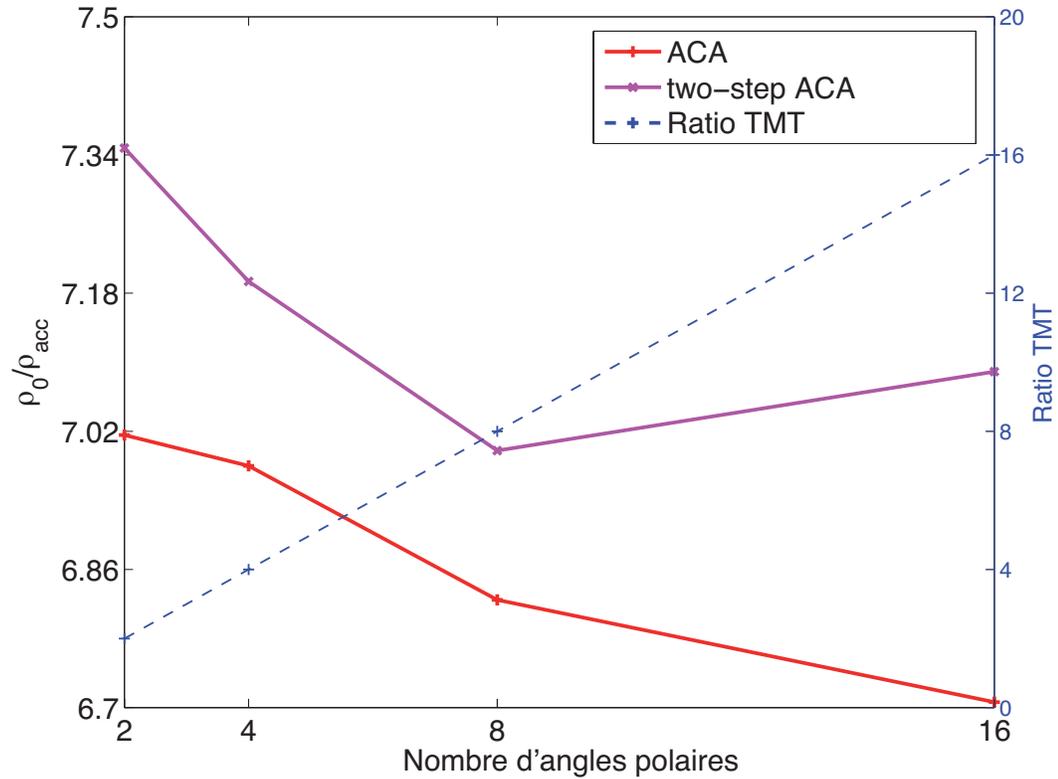


FIG. 4.8 Figure de mérite lorsque le nombre d'angles polaires varie

Pour finir cette illustration des propriétés de la méthode ACA, on fait varier l'ordre du développement des sections efficaces de diffusion de 0 à 2. Comme on l'a vu ACA n'accélère que les moments fondamentaux du flux et les courants. La correction non-linéaire des moments anisotropes de l'Eq. (4.2) n'est pas utilisée.

Le Tableau 4.2 montre bien la grande perte d'efficacité avec ACA lorsque la diffusion est anisotrope. En passant de $L = 0$ à $L = 1$, l'estimateur du rayon spectral et le nombre d'itérations sont presque multipliés par deux pour ACA. Par contre, lorsque L augmente de 1 à 2, les performances restent stables. Dans un contexte multigroupe comme on le verra au Chapitre 7, cette dégradation des performances

avec l'introduction d'un traitement anisotrope de la diffusion est beaucoup moins importante. Pourtant, il reste clair que le fait que **ACA** n'accélère pas les premiers moments anisotropes du flux est une des limitations majeures de cette méthode.

L	0	1	2
Libres	0.9539 ^a (244 ^b)	0.9518 (234)	0.9517 (234)
ACA	0.1367 (6)	0.3371 (11)	0.3374 (11)
two-step ACA	0.1326 (6)	0.3365 (11)	0.3370 (11)

^a ρ_i l'estimateur du rayon spectral,

^b n_i le nombre d'itérations.

TAB. 4.2 Figure de mérite lorsque l'ordre d'anisotropie L varie

4.5 Combinaison de **SCR** et **ACA**

On se propose ici de dériver une version anisotrope de la méthode **SCR** déjà évoquée au Chapitre 2 afin de la combiner avec **ACA** dans le but de fournir une accélération des moments anisotropes et limiter la perte de performances observées au Tableau 4.2.

4.5.1 Préconditionnement **SCR**

On commence par présenter la méthode de «Self-Collision Rebalancing» développée par Wu et Roy au sein du module MCI. Il s'agit en fait d'une méthode d'accélération des itérations multigroupes qui reposent sur l'équivalence entre la méthode CP et la méthode des caractéristiques [Wu & Roy, 1999]. Cette méthode a donné de bons résultats dans le cadre des calculs CANDU et demandent très peu de

mémoire; nous nous proposons donc d'en dériver une version pour l'accélération des itérations internes.

Si l'on considère le cas général de la diffusion anisotrope, comme il est montré à l'Annexe IV, les moments du flux peuvent être décomposés en deux contributions sous la forme (c.f. Eq. (IV.1))

$$\Phi_{l(j)}^m = \sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} (2l'+1) Q_{l'(j)}^{m'} p_{jj}^{l \leftarrow l', m \leftarrow m'} + \check{\Phi}_{l(j)}^m, \quad (4.37)$$

La méthode **SCR** a été développée pour une diffusion isotrope. Dans ce cas, en omettant les indices de mode angulaire, une itération libre s'écrit

$$\Phi_j^{(n+\frac{1}{2})} = Q_j^{(n)} p_{jj} + \check{\Phi}_j^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (4.38)$$

où $Q_j^{(n)} = \Sigma_{sj} \Phi_j^{(n)} + S_j$. La méthode **SCR** corrige alors le terme de source de manière à satisfaire

$$\Phi_j^{(n+1)} = Q_j^{(n+1)} p_{jj} + \check{\Phi}_j^{(n+\frac{1}{2})}. \quad (4.39)$$

Autrement dit, on a pour le terme de flux correctif

$$\Phi_j^{(n+1)} - \Phi_j^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{\Sigma_{sj} p_{jj}}{1 - \Sigma_{sj} p_{jj}} \left(\Phi_j^{(n+\frac{1}{2})} - \Phi_j^{(n)} \right). \quad (4.40)$$

Contrairement à **ACA**, il n'y a pas ici d'itérations pour la résolution du système de correction.

On voit clairement que l'Eq. (4.37) peut être utilisée pour généraliser **SCR** de manière à accélérer tous les moments du flux dans le cas d'une diffusion aniso-

trope. Dans ce cas, les Eqs. (4.38) et (4.39) précédentes se réécrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{l(j)}^{m(n+\frac{1}{2})} = \sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} (2l'+1) Q_{l'(j)}^{m'(n)} P_{jj}^{l\leftarrow l', m\leftarrow m'} + \check{\Phi}_{l(j)}^{m(n+\frac{1}{2})}, \\ \Phi_{l(j)}^{m(n+1)} = \sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} (2l'+1) Q_{l'(j)}^{m'(n+1)} P_{jj}^{l\leftarrow l', m\leftarrow m'} + \check{\Phi}_{l(j)}^{m(n+\frac{1}{2})}. \end{array} \right. \quad (4.41)$$

L'étape de correction requiert ici l'inversion pour chaque région d'un système qui a pour ordre le nombre de modes angulaires, c'est à dire $(L+1)^2$ pour le cas d'une géométrie 3D générale.

Par ailleurs, pour des conditions aux frontières de type albedo avec un tracking non-cyclique, cette méthode corrige aussi les courants sortant en décomposant le courant sortant par la frontière $\partial\mathcal{D}_\alpha$ de l'Eq. (2.8) sous la forme

$$J_\alpha^+ = \check{J}_\alpha^+ + P_{j_\alpha\alpha} V_{j_\alpha} Q_{j_\alpha}, \quad (4.42)$$

où

$$P_{j_\alpha\alpha} = \frac{1}{V_{j_\alpha}} \int_{\Upsilon} d^4T \chi_\alpha(\vec{r}_{K+1}) B_K^{\text{SC}}, \quad (4.43)$$

$$\check{J}_\alpha^+ = \int_{\Upsilon} d^4T \chi_\alpha(\vec{r}_K) \phi_{K+1}(\vec{T}) A_K^{\text{SC}}, \quad (4.44)$$

et j_α désigne la région en contact avec la surface α (on considère ici qu'une surface est en contact avec une seule région pour la clarté de la présentation). On remarque que $P_{j_\alpha\alpha}$ est la probabilité de fuite à travers la surface α à partir de la région j_α .

Pour ce courant, une itération libre s'écrit

$$J_\alpha^{+(n+\frac{1}{2})} = \check{J}_\alpha^{+(n+\frac{1}{2})} + P_{j_\alpha\alpha} V_{j_\alpha} Q_{j_\alpha}^{(n)}, \quad (4.45)$$

et la méthode **SCR** corrige alors le terme de source de manière à satisfaire

$$J_\alpha^{+(n+1)} = \check{J}_\alpha^{+(n+\frac{1}{2})} + P_{j_\alpha\alpha} V_{j_\alpha} Q_{j_\alpha}^{(n+1)}. \quad (4.46)$$

Autrement dit, on a pour le terme correctif

$$J_\alpha^{+(n+1)} - J_\alpha^{+(n+\frac{1}{2})} = P_{j_\alpha\alpha} V_{j_\alpha} \sum_s \left(\Phi_{j_\alpha}^{(n+1)} - \Phi_{j_\alpha}^{(n)} \right). \quad (4.47)$$

Si on revient à un formalisme matriciel, en notant,

- $\mathbb{P}_{VV} = \text{diag}(p_{jj})_{j \in [1, N]}$,
- $\mathbb{P}_{SV} = \text{diag}(P_{j_\alpha\alpha} V_{j_\alpha})_{\alpha \in [1, M]}$,
- $\mathbb{E} = (E_{\alpha j})_{\substack{\alpha \in [1, M] \\ j \in [1, N]}}$ telle que $\forall \alpha \in [1, M], \forall j \in [1, N]$,

$$E_{\alpha j} = \begin{cases} 1 & \text{si la région } j \text{ est en contact avec la frontière } \alpha \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

on peut alors présenter la méthode **SCR** comme un préconditionnement à gauche du type

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} - \vec{\Phi}^{(n)} = \mathbb{P} (\vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} - \vec{\Phi}^{(n)}) \quad (4.48)$$

$$\text{où } \mathbb{P} = \mathbb{I}_{N_L+M} + \mathbb{I}_{\text{int}} \left[\begin{array}{c|c} (\mathbb{I}_N - \mathbb{P}_{VV} \sum_s)^{-1} - \mathbb{I}_N & \mathbb{O}_{N \times M} \\ \hline \mathbb{P}_{SV} \mathbb{E} \sum_s (\mathbb{I}_N - \mathbb{P}_{VV} \sum_s)^{-1} & \mathbb{O}_{M \times M} \end{array} \right] \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s.$$

4.5.2 Schéma à trois niveaux

Un schéma d'accélération peut être mis en place de manière à combiner **ACA** et **SCR**. Comme on l'a vu clairement à l'Eq. (4.41), la méthode **SCR** ne corrige que le terme de source interne à chaque région en laissant tel quel le terme provenant des flux d'interfaces. Ainsi, on peut espérer marier **ACA** et **SCR** dans un schéma trois niveaux

en utilisant **ACA** pour accélérer le terme isotrope des flux d'interfaces $\check{\Phi}_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})}$ plutôt que le flux scalaire $\Phi_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})}$. Pour cela, le plus simple est de conserver **ACA** dans sa forme présentée et de dériver une accélération pour $\check{\Phi}_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})}$ à partir de $\Phi_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})}$ en utilisant la décomposition de l'Eq. (4.37) i.e.

$$\check{\Phi}_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})} - \check{\Phi}_{0(j)}^{0(n)} = \Psi_j^{(n+1)} - \sum_{l'=1}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} (2l'+1) \Sigma_{sj}^{l'} \left(\delta_{0l'} \delta_{0m'} \Psi_j^{(n+1)} + R_{m'(j)}^{l'(n+1)} \right) p_{jj}^{0 \leftarrow l', 0 \leftarrow m'}, \quad (4.49)$$

$$\text{où } R_{m'(j)}^{l'(n+1)} = \Sigma_{sj}^{l'} \left(\Phi_{l'(j)}^{m'(n+\frac{1}{2})} - \Phi_{l'(j)}^{m'(n)} \right).$$

Dans ce cadre, **ACA** est écrite avec diffusion anisotrope en utilisant le résidu suivant $R_j^{(n+1)} = \sum_{l'=1}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} (2l'+1) \Sigma_{sj}^{l'} R_{m'(j)}^{l'(n+1)} p_{jj}^{0 \leftarrow l', 0 \leftarrow m'}$ dans l'Eq. (4.3) de correction des flux scalaires, en mettant à zéro les termes de correction d'ordre supérieur.

SCR est alors utilisée de manière à rétablir le bilan anisotrope en corrigeant uniquement le terme de source interne à chaque région à l'aide de l'Eq. (4.41).

Ce processus peut être résumé sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{l(j)}^{m(n)} \xrightarrow{\text{MOC}} \Phi_{l(j)}^{m(n+\frac{1}{2})}, \\ \check{\Phi}_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})} \xrightarrow{\text{ACA}} \check{\Phi}_{0(j)}^{0(n+\frac{1}{2})}, \\ \Phi_{l(j)}^{m(n+\frac{1}{2})} \xrightarrow{\text{SCR}} \Phi_{l(j)}^{m(n+1)}. \end{array} \right. \quad (4.50)$$

On voit clairement que pour une diffusion isotrope, cette formulation est équivalente à la méthode **ACA**. Ceci nous garantit la comptabilité des deux méthodes avec ce schéma à trois niveaux lorsque la diffusion est anisotrope. Bien sûr, il ne s'agit pas d'une correction «complète» des effets de diffusion anisotrope étant donné que **ACA** reste dans une formulation qui ne corrige que les flux scalaires. Pourtant, étant donné le faible coût de la méthode **SCR**, cette approche semble intéressante.

Cette option a été testée sur le benchmark précédent pour deux discrétisations différentes $n_{\text{split}} = 1$ et $n_{\text{split}} = 4$. Les résultats comparant Two-step **ACA**, **SCR** et la

combinaison des deux sont présentés au Tableau 4.3 lorsque L varie de 0 à 2. Pour $n_{\text{split}} = 1$, on voit clairement l'amélioration apportée par l'utilisation de ce schéma trois niveaux pour les cas avec diffusion anisotrope ; malheureusement, ce gain en performances diminue rapidement lorsque le nombre de régions augmente. Ceci est directement lié à la rapide dégradation des performances de SCR.

	L	0	1	2
$n_{\text{split}} = 4$	Libres	0.9539 ^a (244 ^b)	0.9518 (234)	0.9517 (234)
	SCR	0.8251 (60)	0.8124 (56)	0.8125 (56)
	Two-step ACA	0.1326 (6)	0.3365 (11)	0.3370 (11)
	Two-step ACA + SCR	0.1326 (6)	0.3039 (10)	0.3040(10)
$n_{\text{split}} = 1$	Libres	0.9382(245)	0.9378 (180)	0.9379 (234)
	SCR	0.4176 (14)	0.4107 (13)	0.4109 (13)
	Two-step ACA	0.0918 (5)	0.3156 (10)	0.3157(10)
	Two-step ACA + SCR	0.0918 (5)	0.1435 (7)	0.1420(7)

^a ρ_i l'estimateur du rayon spectral,

^b n_i le nombre d'itérations.

TAB. 4.3 Comparaison des différentes méthodes lorsque l'ordre d'anisotropie L varie

4.6 Extension aux itérations multigroupes

Comme on l'a évoqué au § 3.1.4, toute méthode synthétique d'accélération peut être facilement étendue au contexte multigroupe. Les G systèmes couplés présentés

à l'Eq. (3.13) peuvent être alors résumés sous la forme

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \mathbb{D}^1 & -\mathbb{E}^1 \tilde{\Sigma}_s^{1 \leftarrow 2} & \dots & -\mathbb{E}^1 \tilde{\Sigma}_s^{1 \leftarrow G} \\ -\mathbb{E}^2 \tilde{\Sigma}_s^{2 \leftarrow 1} & \mathbb{D}^2 & \dots & -\mathbb{E}^2 \tilde{\Sigma}_s^{2 \leftarrow G} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -\mathbb{E}^{G-1} \tilde{\Sigma}_s^{G-1 \leftarrow 1} & \dots & \mathbb{D}^{G-1} & -\mathbb{E}^{G-1} \tilde{\Sigma}_s^{G-1 \leftarrow G} \\ -\mathbb{E}^G \tilde{\Sigma}_s^{G \leftarrow 1} & \dots & -\mathbb{E}^G \tilde{\Sigma}_s^{G \leftarrow G-1} & \mathbb{D}^G \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\Psi}^g \\ \vdots \end{pmatrix}_{g \in [1, G]} \\
& = \begin{bmatrix} \mathbb{E}^1 \mathbb{I}_{\text{proj}}^1 \Sigma_s^1 & \dots & \mathbb{E}^1 \mathbb{I}_{\text{proj}}^1 \Sigma_s^{1 \leftarrow G} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbb{E}^G \mathbb{I}_{\text{proj}}^G \Sigma_s^{G \leftarrow 1} & \dots & \mathbb{E}^G \mathbb{I}_{\text{proj}}^G \Sigma_s^G \end{bmatrix} \begin{pmatrix} R^g \\ \vdots \end{pmatrix}_{g \in [1, G]}. \quad (4.51)
\end{aligned}$$

Pour la résolution de ce système, on peut envisager deux niveaux d'itérations à la manière des itérations multigroupes et internes. Dans le contexte de *ACA*, il n'y a pas de considérations à avoir concernant les accès à un fichier de tracking comme c'est le cas avec *MOC* ; par conséquent, il est avantageux dans ce contexte de traiter les groupes séquentiellement de 1 à G . Ainsi, en pratique, on utilise l'approche suivante pour résoudre le système correctif multigroupe :

1. Les systèmes *ACA* des groupes rapides $g \in [1, G_{\text{fast}}]$ sont résolus séquentiellement de 1 à G_{fast} . Comme pour ces groupes, il n'y a pas de remontée de neutrons de groupes plus thermiques, ce schéma de type Gauss-Seidel ne requiert pas d'itérations pour atteindre la convergence.
2. Les systèmes *ACA* pour les groupes thermiques $g \in [G_{\text{fast}} + 1, G]$ sont traités comme un seul système sous la forme

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \mathbb{D}^{G_{\text{fast}+1}} & \dots & -\mathbb{E}^{G_{\text{fast}+1}} \sum_s \tilde{G}^{G_{\text{fast}+1} \leftarrow G} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -\mathbb{E}^G \sum_s \tilde{G}^{G \leftarrow G_{\text{fast}+1}} & \dots & \mathbb{D}^G \end{bmatrix} \left(\vec{\Psi}^g \right)_{g \in [G_{\text{fast}+1}, G]} \\
= & \begin{bmatrix} \mathbb{E}^{G_{\text{fast}+1}} \mathbb{I}_{\text{proj}}^{G_{\text{fast}+1}} \sum_s \tilde{G}^{G_{\text{fast}+1} \leftarrow 1} & \dots & \mathbb{E}^{G_{\text{fast}+1}} \mathbb{I}_{\text{proj}}^{G_{\text{fast}+1}} \sum_s \tilde{G}^{G_{\text{fast}+1} \leftarrow G} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbb{E}^G \mathbb{I}_{\text{proj}}^G \sum_s \tilde{G}^{G \leftarrow 1} & \dots & \mathbb{E}^G \mathbb{I}_{\text{proj}}^G \sum_s \tilde{G}^G \end{bmatrix} (R^g)_{g \in [1, G]} \\
& + \begin{bmatrix} \mathbb{E}^{G_{\text{fast}+1}} \sum_s \tilde{G}^{G_{\text{fast}+1} \leftarrow 1} & \dots & \mathbb{E}^{G_{\text{fast}+1}} \sum_s \tilde{G}^{G_{\text{fast}+1} \leftarrow G_{\text{fast}}} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbb{E}^G \sum_s \tilde{G}^{G \leftarrow 1} & \dots & \mathbb{E}^G \sum_s \tilde{G}^{G \leftarrow G_{\text{fast}}} \end{bmatrix} \left(\vec{\Psi}^g \right)_{g \in [1, G_{\text{fast}}]} \quad (4.52)
\end{aligned}$$

La méthode de résolution exposée au § 4.3, basée sur la méthode Bi-CGSTAB est appliquée à ce système thermique directement. On a donc un seul niveau d'itérations. Cette procédure a été comparée avec une approche à deux niveaux d'itérations avec des itérations de type Gauss-Seidel pour la propagation entre les groupes et s'est révélée plus performante. Il est intéressant de remarquer que dans ce schéma de résolution à un niveau, comme la décomposition ILU0 reste calculée par groupe, le préconditionnement obtenu n'est pas la décomposition ILU0 du système de l'Eq. (4.52) mais de la matrice diagonale par blocs $\text{diag}(\mathbb{D}^g)_{g \in [G_{\text{fast}+1}, G]}$. Ceci est comparable à la situation que l'on a lorsqu'une approche par décomposition de domaines est utilisée pour résoudre un système linéaire. Dépendamment de comment les domaines (i.e. les groupes suivant les milieux matériels) sont couplés (i.e. la forme de la matrice de diffusion dans les divers milieux matériels), des techniques telles qu'une méthode basée sur le complément de Schur [Saad, 1996] peuvent être envisagées pour améliorer la résolution du système. Cette option n'a pas été explorée plus avant car la méthode de résolution exposée a donné de bons résultats et la mise en place de cette option n'est pas triviale. En effet, elle

requiert la mise en place de structures de stockage afin d'isoler par groupe g les *inconnues d'interface* (i.e. les flux correctifs dans une région matérielle telle que $\exists g', \Sigma_s^{g' \leftarrow g} \neq 0$). De plus, cette méthode introduirait un deuxième niveau d'itérations pour la résolution du complément de Schur.

Pour illustrer l'intérêt d'un tel préconditionnement multigroupe avec la stratégie de résolution retenue, on présente ici des résultats sur une configuration préliminaire de l'assemblage PWR étudié en détail au Chapitre 9. Il s'agit d'une discrétisation en 2454 régions du 1/8 d'assemblage avec un tracking cyclique qui utilise 40 angles azimuthaux $\in [0, \pi/2]$, une densité uniforme de 25 cm^{-1} et une quadrature polaire à deux angles telle que proposée dans [Goldberg et al., 1995]. On considère un calcul de valeur propre à 20 groupes.

Différentes approches basées sur Two-step ACA sont comparées :

Two-step ACA (1) pour le préconditionnement du système interne à chaque groupe ;

Two-step ACA (2) pour le préconditionnement des itérations multigroupes en faisant fi de la remontée des neutrons par diffusion d'un groupe vers un groupe plus rapide i.e. un schéma Gauss-Seidel sans itérations ;

Two-step ACA (3) pour le préconditionnement des itérations multigroupes basé sur la stratégie de résolution présentée.

Les résultats sont présentés au Tableau 4.4. On voit clairement que l'option Two-step ACA (3) est la plus performante dans ce contexte multigroupe : elle permet de réduire le temps de calcul d'un facteur de 2.22. Avec la stratégie de résolution présentée, le temps de résolution du système ACA est environ 5 % du temps d'une itération. Si l'on considère un calcul à 172 groupes, cette fraction du temps CPU passe à 17 % ce qui reste raisonnable tandis que l'efficacité du préconditionneur reste la même. Ainsi, cette stratégie de résolution multigroupe apparaît performante. Cette conclusion va être étayée par la suite par l'étude de configurations

avec un grand nombre de régions au Chapitre 7. Par ailleurs, l'utilisation de Two-step ACA permet de réduire le temps de construction du système correctif de 43 à 27 s., les performances des deux préconditionnements étant les mêmes par ailleurs.

Il est important de noter que pour les itérations libres, on présente ici le schéma Jacobi à un niveau discuté au § 2.4; si l'on considère un schéma à deux niveaux avec une boucle interne dans un schéma multigroupe de type Jacobi, le nombre d'itérations multigroupes est réduit de 33 à 30 mais le temps CPU est multiplié par 2.25. Ceci justifie l'intérêt de cette approche à un seul niveau d'itérations, même avec un nombre de groupes restreint.

Option d'accélération	temps CPU (s.)			N_{out}^a	N_{track}^b	N_{calc}^c
	ASM ^d	FLU ^e	Total			
-	0	1435	1435	11	33	648
Two-step ACA (1)	17	1358	1375	11	31	610
Two-step ACA (2)	17	839	856	6	19	377
Two-step ACA (3)	17	629	646	5	14	278

^a N_{out} est le nombre d'itérations externes,

^b N_{track} est le nombre d'accès au tracking,

^c $N_{\text{calc}} = \sum_i N_g^{(i)}$ où $N_g^{(i)}$ est le nombre de groupes traités à l'itération i ,

^d temps CPU pour la construction du système ACA,

^e temps CPU pour le calcul du flux multigroupe.

TAB. 4.4 Comparaison de différentes approches multigroupes pour ACA

4.7 Extension à un environnement parallèle à mémoire partagée

Bien que l'aspect de parallélisation des algorithmes n'ait pas été abordé en pratique dans ce travail de doctorat, on présente ici sous forme d'une extension possible du présent travail, la méthode **ACA** dans un environnement parallèle à mémoire distribuée.

On considère ici une implantation parallèle de la méthode des caractéristiques telle que proposée dans [Dahmani & Roy, 2005]. Dans ce contexte, le tracking Υ^+ fait l'objet d'une partition $\Upsilon^+ = \bigcup_{t=1}^{N_p} \Upsilon_t^+$ et $\forall t \in [1, N_p], \forall t' \in [1, N_p], \Upsilon_t^+ \cap \Upsilon_{t'}^+ = \emptyset$ si $t \neq t'$ où N_p est le nombre de processus. Cette partition peut être, soit créée directement, soit résultée d'un partage entre les processus d'un fichier de tracking généré par le processus principal.

Pour la simplicité de la présentation, on considèrera la diffusion isotrope dans cette partie de l'exposé sans perte de généralité. Dans ce cadre, le processus t à l'issue de l'itération libre n aura calculé des quantités de la forme $\Phi_i^t = \mathcal{S}_i^{\Upsilon_t^+} \left(\vec{\phi}^{(n+\frac{1}{2})}(\vec{T}) \right)$. Une communication collective bloquante de réduction (la somme) avec diffusion du résultat i.e. de type «All Reduce» permet alors d'obtenir le flux scalaire sous la forme $\vec{\Phi}^{(n+\frac{1}{2})} = \sum_{t=1}^{N_p} \vec{\Phi}_t^{(n+\frac{1}{2})}(\vec{T})$ en utilisant le fait que $\mathcal{S}_i^{\Upsilon} = \sum_{t=1}^{N_p} \mathcal{S}_i^{\Upsilon_t^+}$.

Étant donnée la formulation de l'hypothèse **ACA**, on voit que ce type de parallélisme est intéressant pour le préconditionnement **ACA** même si il oblige à revoir l'algorithme de résolution. En effet, on peut envisager que chaque processus t a préalablement construit localement \mathbb{D}_t et \mathbb{E}_t par sommation sur Υ_t^+ . À l'issue de cette communication «All Reduce», un processus t peut alors résoudre le système $\mathbb{D}_t \vec{\Psi}_t = \mathbb{E}_t \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s \left(\vec{R} + \mathbb{I}_{\text{int}} \sum_{t' \neq t} \vec{\Psi}_{t'} \right)$. On voit bien que la résolution de ces N_p systèmes distribués va nécessiter des communications collectives. Par exemple, une

procédure très simple de type Jacobi peut être mise en place comme décrit à l’Algorithme 4.1.

Algorithme 4.1 ACA dans un environnement parallèle à mémoire distribuée

ACA \parallel ()

```

1   $\vec{\Psi}_t^{(0)} = \vec{0}$ 
2  while  $\frac{\|\vec{\Psi}^{(k+1)} - \vec{\Psi}^{(k)}\|}{\|\vec{\Psi}^{(k+1)}\|} < \epsilon$  do
3      Inversion de  $\mathbb{D}_t \vec{\Psi}_t^{(k+1)} = \mathbb{E}_t \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s \left( \vec{R} + \mathbb{I}_{\text{int}} \left( \vec{\Psi}^{(k)} - \vec{\Psi}_t^{(k)} \right) \right)$ 
4       $\vec{\Psi}_t^{(k+1)} \xrightarrow{\text{All Reduce}} \vec{\Psi}^{(k+1)}$ 
5  endwhile
6  return  $\vec{\Psi}^{(k+1)}$ 

```

Ce qui est intéressant c’est que, bien que ces communications viennent pénaliser ACA en parallèle, dans le même temps la qualité du préconditionnement est directement améliorée par cette formulation en N_p «groupes» (toujours par analogie avec la condensation énergétique) de l’hypothèse synthétique de «collapsing». Par contre, ces groupements ne peuvent être arbitraires car l’on doit s’assurer que chaque matrice \mathbb{D}_t est inversible. Par exemple, c’est le cas pour une partition par angle du fichier de tracking. Cette considération pourrait être en concurrence avec la question de la répartition de la charge dans le calcul principal de flux mais les tests de [Dahmani & Roy, 2005] montrent que la charge est assez facile à répartir.

CHAPITRE 5

GMRES DANS LE CONTEXTE DE LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

On va exposer cette méthode et son implémentation avec la méthode des caractéristiques. On a choisi la version avec contrôle de la dimension maximale de l'espace de Krylov m couramment notée $\text{GMRES}(m)$ afin de limiter les ressources mémoires requises pour cette méthode. L'Annexe VI donne les détails relatifs à cet algorithme dans le contexte général des méthodes de Krylov tandis que ce chapitre s'attache à présenter la manière dont la méthode des caractéristiques peut être adaptée à ce processus itératif.

5.1 Implantation avec la méthode des caractéristiques

Notre point de départ est l'algorithme $\text{GMRES}(m)$ tel que présenté à l'Algorithme 5.1. Notons par ailleurs que comme l'implantation de MOC est faite de manière vectorielle afin de limiter le nombre d'accès au tracking, l'algorithme GMRES est lui aussi modifié de manière à s'accommoder d'un traitement vectoriel des groupes. Ceci n'est pas apparent à l'Algorithme 5.1 afin de ne pas compliquer inutilement sa présentation.

Algorithme 5.1 Méthode Generalized Minimal RESidual

GMRES(m)

```

1  choix de  $\vec{\Phi}^{(o)}$ 
2   $v_1 \leftarrow \frac{\vec{r}^{(o)}}{\|\vec{r}^{(o)}\|}$ 
3  calcul du membre de droite du système :  $\mathbb{P}\mathbb{L}\vec{S}$ 
4  for  $j \leftarrow 1$  to  $m$  do
5      while  $\|\vec{r}^{(j)}\| \geq \varepsilon \|\vec{\Phi}^{(j)}\|$  do
6           $\hat{v}_{j+1} \leftarrow \mathbb{P}\mathbb{H}v_j$ 
7          for  $i \leftarrow 1$  to  $j$  do
8               $h_{ij} \leftarrow \langle \hat{v}_{j+1} | v_i \rangle$ 
9               $\hat{v}_{j+1} \leftarrow \hat{v}_{j+1} - h_{ij}v_i$ 
10         endfor
11          $h_{j+1j} \leftarrow \|\hat{v}_{j+1}\|$ 
12          $v_{j+1} \leftarrow \frac{\hat{v}_{j+1}}{h_{j+1j}}$ 
13         mise à jour de la décomposition QR de  $\check{\mathbb{H}}_{e_j}$  :  $\mathbb{Q}_j\check{\mathbb{H}}_{e_j} = \mathbb{R}_j$ 
14          $\|\vec{r}^{(j)}\| \leftarrow |\mathbb{R}_j(j+1, j+1)|$ 
15         calcul de  $y_j$  et  $\vec{\Phi}^{(j)}$ 
16     endwhile
17 endfor
18 calcul du “vrai” résidu  $\|\vec{\Phi}^{(j+1)} - \vec{\Phi}^{(j)}\|$ 
19 if  $\|\vec{\Phi}^{(j+1)} - \vec{\Phi}^{(j)}\| > \varepsilon \|\vec{\Phi}^{(j)}\|$  then
20      $v_1 \leftarrow \frac{\vec{r}^{(j)}}{\|\vec{r}^{(j)}\|}$ 
21     goto 3
22 else
23     return  $\vec{\Phi}^{(j+1)}$ 
24 endif

```

Les différentes étapes mises en jeu dans cette méthode à chaque nouvelle itération

j sont :

1. un calcul par la méthode des caractéristiques fournit un vecteur pour augmenter la dimension de l'espace de Krylov : on passe de $\mathcal{K}_{j-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{PH})$ à $\mathcal{K}_j(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{PH})$;
2. le processus d'Arnoldi permet d'orthogonaliser ce vecteur par rapport aux précédents et d'obtenir une base orthonormale de $\mathcal{K}_j(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{PH})$;
3. par une décomposition QR de la matrice de Hessenberg $\check{\mathbb{H}}_{ej}$ supérieure qui résulte de la projection orthogonale de \mathbb{PH} sur $\mathcal{K}_j(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{PH})$, on a accès à la fois à $\vec{\Phi}^{(j)}$ le nouvel estimé de la solution et à un estimé du résidu $\|\vec{r}_{(j)}\|$ qui permettent de savoir si l'on a atteint la convergence. Cette décomposition QR est obtenue par la méthode des rotations de Givens qui permet d'utiliser la décomposition de $\check{\mathbb{H}}_{ej-1}$ pour mettre à jour celle de $\check{\mathbb{H}}_{ej}$.

On remarque en particulier qu'un calcul de la méthode des caractéristiques est nécessaire au début de l'algorithme afin de calculer le membre de droite du système à résoudre sous la forme : $\mathbb{PL}\vec{S} = \mathbb{PH}\vec{\Phi}^{\text{in}} + \vec{\Phi}^{\text{out}} - \vec{\Phi}^{\text{in}}$ où $\vec{\Phi}^{\text{out}}$ est le résultat d'une itération de la méthode des caractéristiques avec comme entrée $\vec{\Phi}^{\text{in}} = \vec{0}$. Dans ces conditions, à chaque itération, $\mathbb{PH}v_j$ peut être calculé sous la forme $\mathbb{PH}v_j = \mathbb{PL}\vec{S} - v^{\text{out}} + v_j$ où v^{out} est le résultat d'une itération de la méthode des caractéristiques avec comme entrée v_j . C'est de cette manière que l'on peut adapter GMRES au contexte de la résolution de l'équation de transport dans une formulation MOC.

5.2 Préconditionnement

Dans ce projet, deux preconditionnements sont utilisés, la méthode ACA développée au Chapitre 4 et la méthode SCR explicitée au § 4.5.1.

L'utilisation d'un preconditionneur tel que ACA introduit une boucle d'itérations

à l'intérieur du solveur basé sur une méthode de Krylov. Comme dans n'importe quelle configuration de boucles itératives imbriquées, se pose alors la question de la stratégie à adopter pour optimiser le critère de convergence de la boucle interne ε_j^i en fonction du résidu de la boucle externe $\|\vec{r}_j^e\|$ à chaque itération externe j . Les travaux reportés dans [Bouras & Fraysse, 2000] ont montré en assimilant la boucle interne d'itérations à une perturbation de la matrice du système linéaire qu'une stratégie de relaxation du critère de convergence interne pouvait être avantageuse. Remarquons que la situation est l'inverse de celle que l'on peut rencontrer entre des itérations de type puissance (et plus généralement une méthode de Newton) comme boucle externe comme c'est le cas dans la méthodologie de résolution de l'équation de transport multigroupe. Dans ce cas, c'est une stratégie de contraction qui est à favoriser.

L'obtention d'une stratégie de relaxation est une procédure hautement heuristique. Dans notre cas, la relaxation est effectivement possible mais le critère de base des itérations pour le préconditionnement doit être assez serré sinon dans les cas fortement hétérogènes tel que celui présenté au § 5.3.1, l'estimé du résidu calculé par **GMRES** suite à la décomposition QR (ligne 14 de l'Algorithme 5.1) peut être largement en erreur. Après divers tests, partant de la stratégie proposée par [Bouras & Fraysse, 2000], on a retenu comme règle

$$\varepsilon_j^i = \max \left(\frac{\varepsilon^e}{100}, \min \left(1, \frac{\varepsilon^e}{100 \min (100 \|\vec{r}_j^e\|, 1)} \right) \right). \quad (5.1)$$

Elle est illustrée pour un précision externe $\varepsilon^e = 10^{-5}$ à la Fig. 5.1

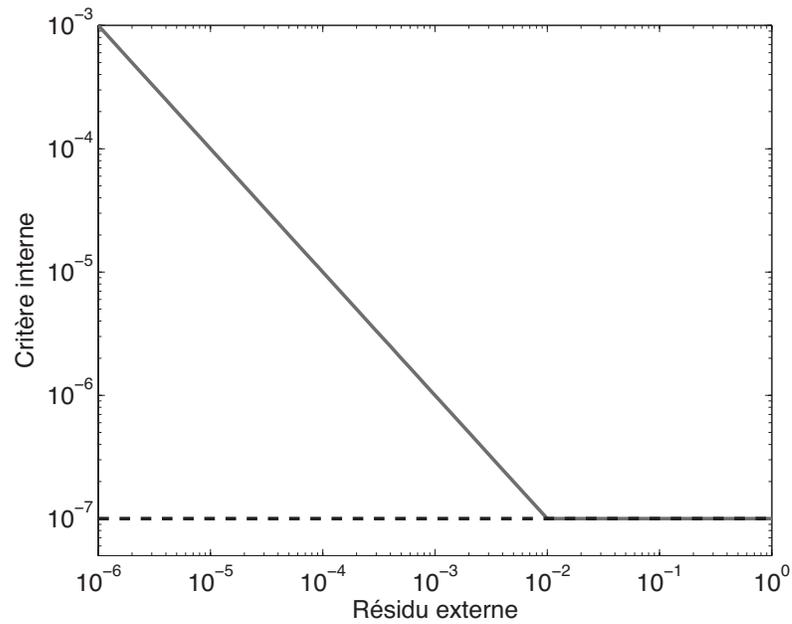


FIG. 5.1 Stratégie de relaxation pour GMRES

5.3 Résultats numériques préliminaires

On présente ici quelques exemples numériques sur des cas simples qui illustrent l'utilisation de GMRES tel que décrite ici dans le cadre de la méthode des caractéristiques.

5.3.1 Assemblage fortement hétérogène

Dans [Le Tellier & Hébert, 2004], une première étude a été menée pour démontrer la faisabilité d'une telle implantation avec la méthode des caractéristiques et reproduire les comportements observés en méthode S_N en combinant un préconditionnement DSA avec GMRES pour des cas fortement hétérogènes [Warsa et al., 2003a]. Ces résultats ont été obtenus avec une implantation non définitive de ACA et de la

peuvent apparaître très vite ; par exemple, si la stratégie de résolution du système *ACA* n'est pas au point, typiquement, si le préconditionnement *ILU0* est enlevé, la convergence de *ACA* est dégradée.

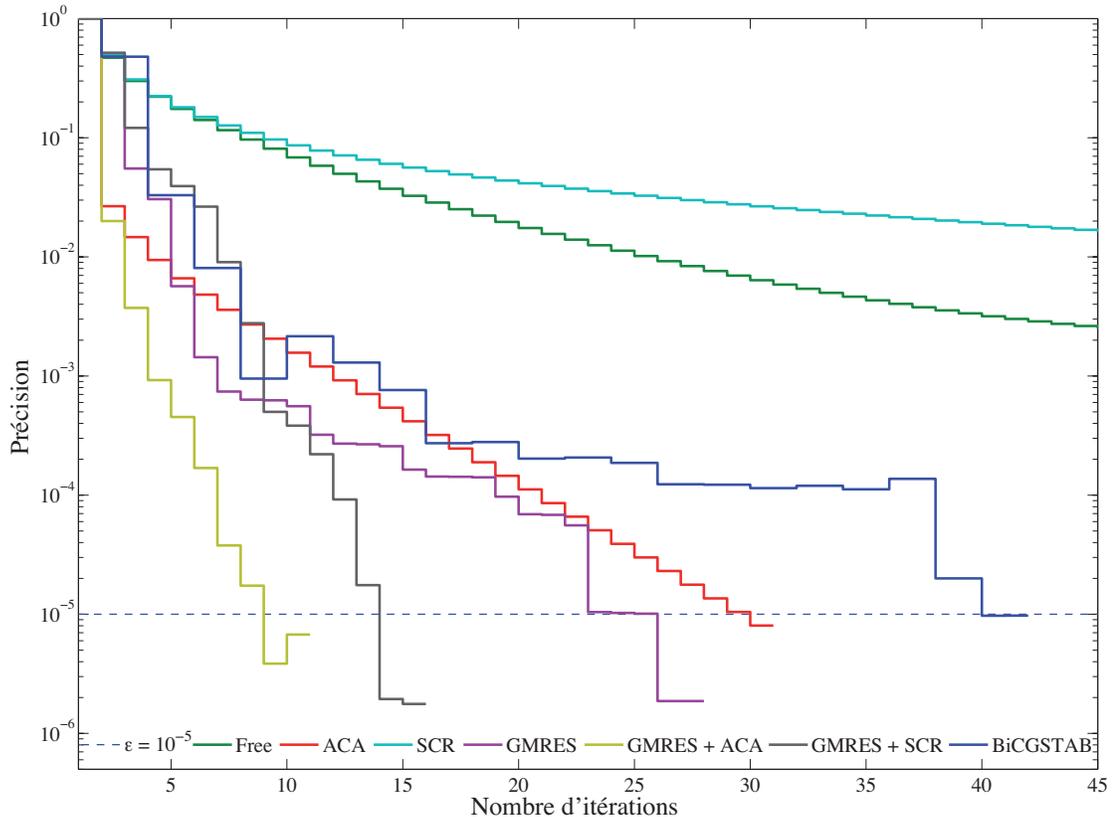


FIG. 5.3 Histogramme de convergence pour l'assemblage fortement hétérogène

Concernant les méthodes de Krylov, *GMRES* donne de bien meilleurs résultats que *Bi-CGSTAB* ce qui conforte notre choix de cette méthode pour MOC. Bien que *SCR* seul ne donne pas de bons résultats, lorsqu'il est utilisé comme préconditionnement avec *GMRES*, il permet de réduire le nombre d'itérations de manière notable. La situation est ici tout à fait similaire à ce qui a été observé avec une méthode *DSA* dans le contexte des méthodes aux ordonnées discrètes dans [Warsa et al., 2003a] ou encore avec *ACA* dans son implantation préliminaire avec MOC. Au final,

GMRES préconditionnée par ACA est ici la meilleure combinaison et réduit le nombre d'itération à 10 tandis qu'il est de 30 avec ACA et 27 avec GMRES prises séparément.

5.3.2 Calcul d'auto-protection par une méthode de sous-groupes

Un contexte très intéressant pour la méthode GMRES est le calcul d'auto-protection des résonances par une méthode de sous-groupes tel que présenté à l'Annexe I. Comme on l'a déjà mentionné, dans ce cadre, les hétérogénéités peuvent être bien plus importantes que dans le contexte du calcul de flux. On présente ici des résultats sur une géométrie constituée d'un seul crayon d'uranium enrichi entouré de sa gaine et du caloporteur. Ce cas test est issu des benchmarks de Rowlands [Trkov, 1998] tels qu'analysés avec DRAGON dans [Hébert, 2005]. Le module d'auto-protection de DRAGON utilisé ici est décrit au Chapitre 6. Les résultats sont présentés au Tableau 5.1 en termes du nombre total d'intégrations du flux par MOC dans le module d'auto-protection suivant la stratégie d'accélération. Les temps ne sont donnés qu'à titre indicatif; ils sont trop faibles pour être significatifs. On observe que ACA donne un facteur d'accélération proche de 2 tandis que SCR donne un facteur de seulement 1.2. Concernant les méthodes de Krylov, GMRES donne de bien meilleurs résultats que Bi-CGSTAB avec des facteurs d'accélération de 1.8 et 1.3 respectivement. Dans cet exemple, le préconditionnement, qu'il soit de type ACA ou SCR ne profite que peu à GMRES. Si les résultats sont un peu améliorés par rapport à GMRES seule, la combinaison de GMRES et ACA ne présente aucun gain comparée à ACA seule. Cette situation, différente de celle exposée dans l'exemple précédent, montre bien que la combinaison optimale de méthodes d'accélération dépend fortement du problème à résoudre.

KRYL	paramètres		N_{calc}^a	t^b (s.)
	ACA	SCR		
-	-	-	47967	12
-	✓	-	23990	6
-	-	✓	39833	11
GMRES	-	-	26638	8
BICGSTAB	-	-	36747	10
GMRES	✓	-	24164	7
GMRES	-	✓	26328	8

^a nombre total d'intégrations de flux par MOC,

^b temps passé dans le module d'autoprotection.

TAB. 5.1 Analyse de convergence pour le cas test de Rowlands

CHAPITRE 6

CADRE DE DÉVELOPPEMENT ET MÉTHODOLOGIE DE TEST

Dans ce chapitre, on précise le cadre de développement de la méthode des caractéristiques avec une présentation du code DRAGON et plus particulièrement des parties d'intérêt pour MOC. Ensuite, on présente la procédure de test utilisée.

6.1 Développement logiciel : le code DRAGON

L'ensemble de la programmation des méthodes décrites dans les chapitres précédents a été réalisée dans le code de calcul DRAGON [Marleau et al., 2006b] développé à l'École Polytechnique au sein de l'Institut de Génie Nucléaire. Ce code de cellule est construit sur une architecture modulaire; l'échange de données et la liaison entre les différents modules sont basés sur la librairie GANLIB du «GAN generalized Driver» [Roy & Hébert, 2000]. La version de développement utilisée dans ce projet diffère de DRAGON 3.05, disponible à

<http://www.polymtl.ca/nucleaire/DRAGON/download/index.php>.

D'un point de vue structural, cette version de DRAGON est entièrement vectorielle, bâtie autour de portes vectorielles pour le traitement des groupes. Elle intègre une version modifiée du module de traitement des librairies de sections efficaces microscopiques et un nouveau module d'auto-protection basée sur l'utilisation de tables de probabilités [Hébert, 2005]. Dans ce projet, les modules qui sont affectés sont :

USS le nouveau module d'auto-protection par méthodes des sous-groupes,

ASM le module de construction des matrices de probabilités de collision ou des

matrices de préconditionnement dans le cadre de la résolution pour le flux multigroupe,

FLU le module de résolution pour le flux multigroupe,

EDI le module de calcul et d'édition des taux de réaction qui permet le calcul SPH lors d'une procédure d'homogénéisation/condensation.

Les modules USS, FLU, EDI requièrent tous la résolution de l'équation de transport dans sa forme présentée à l'Eq. (1.6), pour plusieurs groupes à la fois et plusieurs fois de suite, en fonction des boucles d'itérations. Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour sa résolution au sein de DRAGON et chacun des modules fait appel à une même porte vectorielle DOORFV (DOORFVR pour le calcul de flux multigroupe) qui regroupe l'ensemble des méthodes. De même pour la construction des matrices dans USS, ASM, EDI, c'est la porte vectorielle DOORAV qui regroupe les méthodes qui peuvent être mises en jeu. En pratique, l'implémentation des techniques envisagées s'est faite en même temps que la mise en place de l'approche vectorielle au sein de cette version en développement de DRAGON.

Par ailleurs, les modules standards de DRAGON pour la création d'une géométrie, son analyse et la création du fichier de lignes d'intégration sont présents dans cette version du code. Il est à noter que le résultat de ce travail est disponible depuis septembre 2006 dans une nouvelle distribution des codes de neutronique du GAN, Version4 [Hébert, 2006b, Marleau et al., 2006a], disponible à

[http ://www.polymtl.ca/merlin](http://www.polymtl.ca/merlin).

L'implantation de la méthode des caractéristiques cycliques du module MOCC [Roy, 1998] disponible dans DRAGON 3.05 ainsi que certaines routines du code MCCG [Suslov, 1993] ont fourni une base pour ce travail de développement.

Comme on l'a vu au Chapitre 2, la méthode des caractéristiques est entièrement basée sur une procédure de tracking pour l'intégration spatiale. La discussion

concernant les différents modules de tracking utilisés dans ce projet est présentée au cours de la description de la méthodologie de test.

6.2 Les benchmarks utilisés pour la validation

L'implantation proposée de la méthode des caractéristiques a fait l'objet d'une procédure de *validation* qui consiste en une comparaison détaillée des résultats avec un code Monte-Carlo sur une série de cas tests ou *benchmarks* couvrant le panel d'utilisation prévu de la méthode. La procédure de validation présentée ici représente en fait une première partie d'une telle procédure car comme on l'a déjà indiquée, on se limite à des calculs sans évolution du combustible. Le code Monte-Carlo utilisé est TRIPOLI4 [Both & Penelieu, 1996], version 4.3, un code à énergie continue développé au *Commissariat à l'Énergie Atomique* (CEA).

Le choix des benchmarks a été fait de manière à couvrir différents types de réacteurs aux conceptions bien distinctes. Ainsi, on se propose d'étudier le comportement de la méthode des caractéristiques pour des assemblages de type CANDU, PWR et BWR. Les réacteurs de type CANDU utilisent des tubes de forces et un modérateur à l'eau lourde séparé du caloporteur. Pour les CANDU actuellement en service (CANDU-6), le combustible est de l'oxyde d'Uranium naturel et le caloporteur est de l'eau lourde tandis que pour la nouvelle génération en développement, le combustible est légèrement enrichi et le caloporteur est de l'eau légère. Les réacteurs à eau légère (PWR et BWR) sont quant à eux basés sur un concept de cuve pressurisée ; caloporteur et modérateur sont un même liquide, de l'eau légère et le combustible est enrichi. Pour le PWR choisi, le combustible est de l'oxyde d'Uranium enrichi tandis que l'assemblage BWR est de type MOX (mélange entre de l'oxyde d'Uranium et de l'oxyde de Plutonium).

6.2.1 Benchmarks type BWR

Ces cas sont issus du programme d'expérimentation BASALA [Cathalau et al., 2004, Litaize et al., 2004] implanté dans les installations EOLE du CEA de Cadarache. Ce programme est une collaboration entre des organisations françaises (CEA, COGEMA) et une organisation japonaise (NUPEC). Les manipulations expérimentales ont eu lieu entre 2000 et 2002 et visaient à étudier le comportement d'un assemblage BWR hautement modéré dont le combustible est composé entièrement de MOX. Quatre assemblages 9×9 avec une croix de contrôle au centre ont été utilisés dans deux séries d'expériences : BASALA-H et BASALA-C qui simulaient des conditions d'opération présentées au Tableau 6.1.

	BASALA-H	BASALA-C
pas de réseau	1.13 cm	1.35 cm
lame d'eau	0.62 cm	0.70 cm
H/HM ^a	≈ 5	≈ 9
T ^b	≈ 287 °C	≈ 20 °C
p ^b	≈ 75 bar	≈ 1 bar
taux de vide ^b	≈ 42 %	≈ 0 %

^a proportion hydrogène/métaux lourds dans l'assemblage

^b conditions d'opération simulées

TAB. 6.1 Propriétés des assemblages BASALA

Les assemblages 9×9 contiennent des crayons avec différentes concentrations en Plutonium (3%, 4.3%, 7% et 8.7 %) comme le montre la Fig. 6.1. Chaque crayon de combustible est entouré d'une gaine en Zircaloy et d'une surgaine en aluminium. Cette surgaine permet, en variant l'épaisseur, de simuler différents taux de vide

dans l'assemblage. Dans chaque cas, une configuration de référence et quatre autres configurations avec différentes sortes de perturbations (poison consommable comme le Gadolinium, croix de contrôle, ...) ont été testées. La criticité a été ajustée par le nombre de crayons de combustible en périphérie des quatre assemblages centraux.

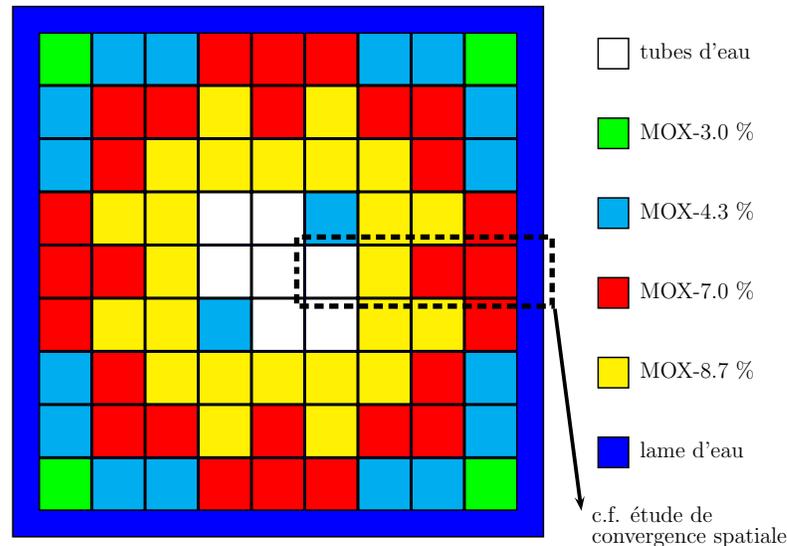


FIG. 6.1 Agencement d'un des sous-assemblages centraux de BASALA

Pour ce benchmark, les données nous ont été fournies par le CEA de Cadarache et diffèrent, pour des raisons de confidentialité, des données exactes de cette série d'expérience. On a extrait trois benchmarks de cette série de configurations :

BASALA-H : l'assemblage BASALA-H dans sa configuration de référence qui correspond aux conditions que l'on retrouve dans un réacteur BWR à mi-hauteur de la cuve.

BASALA-V : l'assemblage BASALA-H pour lequel on a augmenté le taux de vide à ≈ 70 % de manière à simuler les conditions dans la partie haute du réacteur.

BASALA-C : l'assemblage BASALA-C qui simule les conditions dans la partie

basse du réacteur avec une croix de contrôle formée de crayons absorbant au B_4C .

Ces trois assemblages sont présentés à la Fig. 6.2 où l'échelle des tailles est préservée.

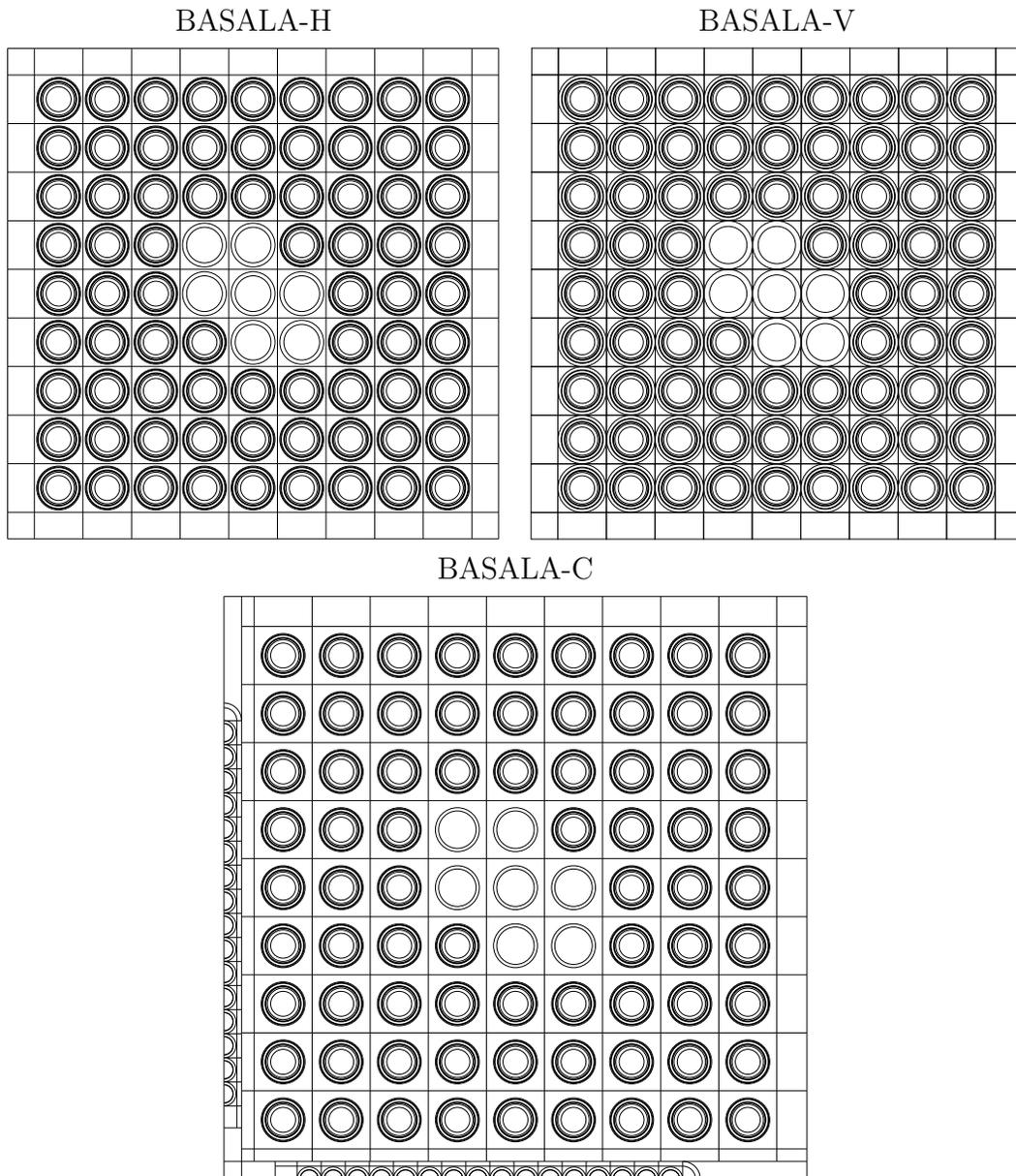


FIG. 6.2 Géométries des assemblages BASALA

Cette étude a d'abord été menée sur les benchmarks BASALA-H et BASALA-C [Le Tellier & Hébert, 2006b]. Le benchmark BASALA-V a été ajouté dans ce document de manière à couvrir toute la gamme des taux de vide que l'on peut retrouver dans un réacteur BWR. Avec ces benchmarks, on s'est intéressé à l'utilisation de la méthode des caractéristiques pour le calcul multigroupe de flux mais aussi pour l'auto-protection avec une méthode des sous-groupes itérative.

6.2.2 Benchmark CANDU NG

Ce cas test consiste en une cellule de type «Advanced CANDU Reactor» (ACR). Ce type de réacteurs, successeurs des réacteurs CANDU-6 est à l'heure actuelle en plein développement au Canada. Les données relatives à cet assemblage proviennent d'une proposition [Boczar, 2002], dénommée *CANDU NG*, antérieure au design ACR actuellement étudié par l'*Énergie Atomique du Canada Limitée* (EACL). L'assemblage de combustible est de type cluster cylindrique avec 43 crayons (contre 37 dans les réacteurs CANDU-6), la grappe de type CANFLEX est présentée à la Fig. 6.3.

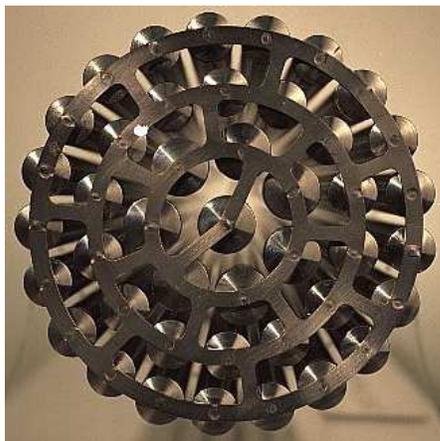


FIG. 6.3 Grappe de type Canflex

Les crayons sont de deux tailles différentes : les 8 crayons centraux ont un diamètre de 13.5 mm tandis que les 35 autres crayons périphériques ont un diamètre de 11.5 mm. Les crayons du centre ont une densité de 10.12 g/cm^3 en UO_2 naturel et contiennent de l'oxyde de Dysprosium (4.6 %) tandis que les 35 crayons périphériques ont une densité de 9.825 g/cm^3 en UO_2 enrichi à 2.0%. La cellule est carrée de dimension 22 cm.

Cette cellule a fait l'objet de deux études au cours de ce projet. Une première étude [Le Tellier et al., 2004], non reproduite dans ce document a été réalisée pour comparer les différentes options d'auto-protection dans le cas d'une cellule avec caloporteur. Cette cellule a été analysée en cylindrisant la frontière externe de manière à pouvoir discrétiser correctement le modérateur avec les limitations du module de tracking de l'époque (c.f § 6.3). Par la suite, une seconde étude réalisée en collaboration avec R. Karthikeyan [Karthikeyan et al., 2006] a été menée avec un nouveau module de tracking pour étudier la réactivité du vide d'un tel assemblage non seulement pour un cellule isolée mais aussi dans le cas d'un assemblage 2×2 . Les résultats de cette étude sont en partie reproduits au Chapitre 8 avec l'addition de considération sur les performances des méthodes d'accélération dans le contexte de l'auto-protection. Ce benchmark a permis de tester l'utilisation de la méthode des caractéristiques à la fois pour le calcul d'auto-protection basé sur une méthode des sous-groupes et pour le calcul de flux multigroupe.

6.2.3 Benchmark type PWR

Ce benchmark est typique des assemblages que l'on retrouve dans les réacteurs pressurisés commerciaux. Il s'agit d'un assemblage 17×17 avec comme combustible de l'oxyde d'Uranium utilisé pour tester les modèles d'auto-protection dans [Hébert, 2001]. Le combustible est enrichi à 1.8 % en ^{235}U tandis que le caloporteur contient

du bore à une concentration de 500 ppm. Cet assemblage est représenté à la Fig. 6.4 ; on y distingue le crayon d'instrumentation central et les 24 tubes guide pour l'insertion de mécanismes de réactivité.

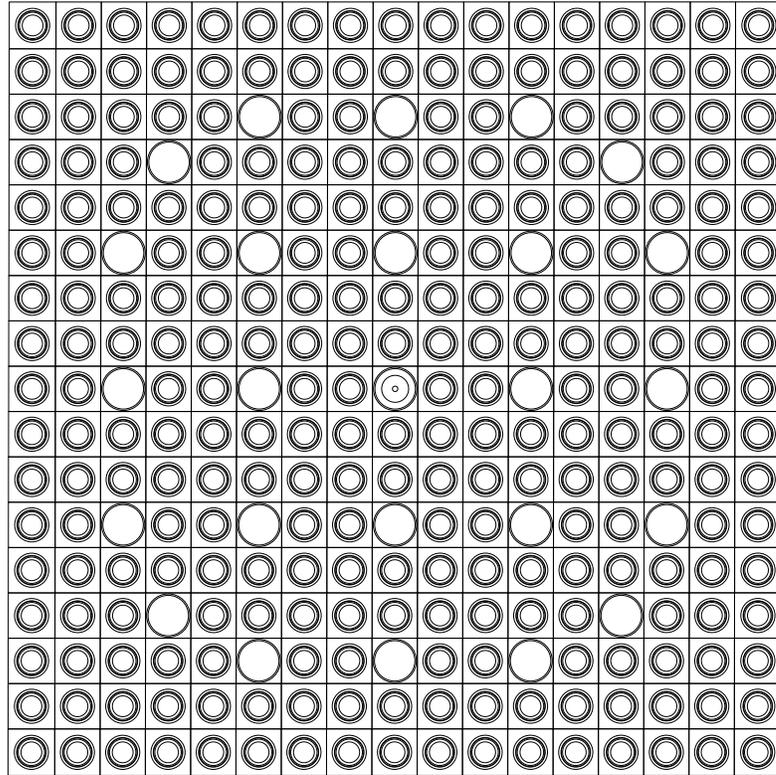


FIG. 6.4 Assemblage de type PWR

Pour ce benchmark, on s'est intéressé à l'utilisation de MOC dans un schéma de calcul à vocation industrielle basé sur deux niveaux de calcul du flux multigroupe. Par là-même, on a pu tester l'utilisation de la méthode des caractéristiques et des méthodes d'accélération proposées avec deux maillages énergétiques différents

6.3 Les tracking

Comme le tracking est la base même de la méthode des caractéristiques, on donne ici quelques détails sur les deux modules de tracking de DRAGON et le tracking externe utilisés dans ce projet.

Le module de tracking EXCELT [Roy et al., 1989] a d'abord été utilisé. La conception de ce module a débuté en 1986 pour l'analyse de géométries de type «carcel» (i.e. des cylindres dans un maillage cartésien) en 2 et 3 dimensions. Il permet aussi le traitement des géométries de type «cluster» (un arrangement non-cartésien de cylindres) en 2D. Le tracking peut être généré de manière cyclique en 2D. Ce module a été utilisé pour des études préliminaires des benchmarks CANDU NG, BASALA-H et PWR ainsi que les diverses études complémentaires reportées dans ce rapport.

Pour l'étude des benchmarks BWR, étant donné certaines spécificités géométriques de l'assemblage BASALA-C avec croix de contrôle, le module précédent n'a pu être utilisé. Dans ce cas, on a utilisé un tracking externe à DRAGON développé par le CEA au sein du module TDT [Sanchez & Mao, 1997, Sanchez et al., 2002] intégré au code APOLLO2 [Sanchez et al., 1998]. Dans cette approche limitée aux géométries 2D, l'assemblage est d'abord décomposé en *éléments surfaciques* i.e. des segments et arcs de cercle *élémentaires* (dans le sens où ils sont l'interface de deux régions uniquement) puis une numérotation des régions est créée et la connectivité des éléments surfaciques par rapport aux régions est établie. Cette description de la géométrie par décomposition en éléments surfaciques est ensuite utilisée pour générer le tracking en fonction des quadratures spatiale et angulaire. Un module a été écrit de manière à convertir un fichier de tracking au format TDT dans le format du module EXCELT de DRAGON. L'utilisation de TDT a été rendue possible par la collaboration avec le centre CEA de Cadarache au sein duquel un stage de quatre

mois a été effectué.

À la fin de ce projet, le module NXT [Marleau et al., 2006b] a fait son entrée au sein du code DRAGON. Le module EXCELT est basé sur une représentation globale de la géométrie dans laquelle les maillages cartésiens et les cylindres doivent s'étendre à travers la géométrie au complet. Bien que ce module ait été largement amélioré, cette limitation d'une description globale de la géométrie est restée. Dans ce cadre, le module NXT qui, à termes, doit remplacer le module EXCELT est une refonte du tracking et de l'analyse de géométrie dans DRAGON basée sur une représentation par blocs de la géométrie. Ce module peut traiter des géométries type carcel et cluster en 2 et 3 dimensions avec des maillages non-uniformes. Il est basé sur une description hiérarchique à trois niveaux de la géométrie. Le premier niveau est un maillage cartésien, le second niveau décrit les cylindres de ce maillage qui peuvent être orientés selon les trois axes x , y , z et finalement, le troisième niveau comprend la description des clusters, parallèles au cylindre auquel ils appartiennent et qui peuvent se trouver n'importe où dans ce cylindre. Les clusters ne s'étendent pas forcément sur la même longueur que les cylindres. Ce module a été utilisé pour une seconde étude du benchmark CANDU NG et le benchmark PWR. Les benchmarks BWR n'ont pas été repris avec ce nouveau module.

6.4 Le processus de validation

On fait ici différentes remarques sur les termes de la comparaison entre DRAGON et TRIPOLI4.

6.4.1 Les bibliothèques de sections efficaces microscopiques

Dans un processus de validation, il est important de s'assurer que la comparaison entre les résultats de deux codes est faite de manière cohérente. Pour ce faire, un point important concerne les bibliothèques de sections efficaces microscopiques utilisées par ces deux codes.

Dans ce projet, afin d'assurer la cohérence de la comparaison, les bibliothèques utilisées par les deux codes ont été créées spécifiquement pour chaque benchmark à partir de l'évaluation JEF-2.2 avec NJOY99 [MacFarlane & Muir, 2000] et le module `Dragr` [Hébert & Saygin, 1992]. TRIPOLI4 ne réalise pas d'interpolation en température; par conséquent, les sections efficaces des différents isotopes ont été générées aux températures exactes des benchmarks. Il est à noter que dans le cas des isotopes comportant des données thermiques ($E < 5$ eV) pour la diffusion, c'est à dire les matériaux modérateurs, les températures du benchmark ont été choisies de manière à correspondre aux températures T pour lesquelles la loi de diffusion $\frac{d^2\sigma_s}{dEd^2\Omega}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}', E' \leftarrow E, T)$ dans le domaine thermique est donnée dans l'évaluation.

La génération de ces bibliothèques est faite à l'aide d'un script Python basé sur la classe `PyNjoy` [Hébert & Karthikeyan, 2005] qui incorpore l'appel des différents modules de NJOY99 sous la forme de méthodes. Pour la création d'une bibliothèque DRAGLIB au format DRAGON, la chaîne de production passe par la création de fichiers PENDF qui donne une représentation discrète des différentes sections efficaces à la température considérée. Cette représentation est construite de manière à ce qu'une interpolation linéaire garantisse une précision donnée. TRIPOLI4, pour sa part, utilise directement ces fichiers PENDF en conjonction avec les évaluations. Ainsi, la cohérence entre les deux codes est assurée en utilisant les fichiers PENDF produit lors de la création de la DRAGLIB pour TRIPOLI4. Suite à cette étape,

la DRAGLIB requiert une condensation des sections efficaces sur une structure de groupes à l'aide d'un flux de pondération et produit des fichiers GENDF qui sont ensuite utilisés par le module `Dragr`. Le format XMAS à 172 groupes a été utilisé. De plus, le module `Dragr` inclut les informations nécessaires à l'auto-protection des résonances pour tout isotope et groupe d'énergie pour lesquels l'évaluation contient des paramètres de résonances. D'une part, il s'agit de sections efficaces auto-protégées calculées par NJOY99 pour un milieu homogène et infini, tabulées en fonction du paramètre de dilution (c.f. Annexe I, Eq. (I.29)). D'autre part, pour les modèles avancés d'auto-protection, le module `Dragr` inclut des données *Autolib* générées à partir des fichiers PENDF. Diverses quantités utilisées pour la création des tables de probabilités mathématiques sont calculées et tabulées en fonction de la dilution pour leur usage subséquent dans l'auto-protection. Cette procédure est limitée au domaine des résonances résolues de chaque isotope.

Pour finir, TRIPOLI4 utilise pour le traitement des résonances dans le domaine non-résolu des tables de probabilités externes. Dans notre usage de TRIPOLI4, de telles tables n'ont pas été utilisées et par conséquent, l'auto-protection n'est pas faite dans ce domaine. Pour être cohérent, l'auto-protection dans DRAGON est déconnectée pour une énergie supérieure à 11.138 KeV (i.e. les groupes inférieurs à 45).

6.4.2 Les méthodes d'auto-protection

Pour les benchmarks CANDU NG et BWR, la validation de la méthode des caractéristiques s'est faite en conjonction avec la validation des différentes options d'auto-protection de DRAGON. Une validation plus complète de ces méthodes est donnée dans [Karthikeyan, 2006].

Cinq méthodes d'auto-protection sont utilisées. Deux d'entre elles sont basées sur une méthode de sous-groupes [Hébert, 2005] et sont décrites plus en détail à l'Annexe I. Il s'agit de :

- USS 1, le modèle d'auto-protection de Ribon étendu qui consiste en une méthode de sous-groupes basée sur des tables de probabilité mathématiques dans les groupes pour lesquels des données Autolib sont présentes dans la librairie et le modèle statistique qui utilise des tables de probabilités physiques pour les autres groupes. Avec cette méthode, un modèle est disponible pour la prise en compte d'effet de recouvrement des résonances entre des isotopes différents.
- USS 2, une méthode d'auto-protection par sous-groupes basée sur le modèle statistique qui utilise des tables de probabilités physiques pour tous les groupes résonnants.

La méthode des caractéristiques peut être utilisée comme solveur de flux pour ces méthodes.

Les trois autres méthodes sont basées sur une équivalence en dilution entre l'assemblage hétérogène et un mélange homogène. Il s'agit de calculer une section efficace de dilution équivalente pour un problème hétérogène de manière à interpoler l'intégrale effective de résonance à partir de celles tabulées dans la librairie pour un milieu homogène. On distingue :

- SHI 0, la méthode de Stamm'ler avec normalisation de Livolant-Jeanpierre pour le calcul de la structure fine du flux [Hébert & Marleau, 1991]. Cette option est la seule disponible dans DRAGON 3.05. Elle ne permet pas la prise en compte d'effets d'auto-protection distribués.
- SHI 1, SHI 0 basé sur l'équation de Nordheim de manière à pouvoir tenir compte des effets d'auto-protection distribués [Hébert, 2004].
- SHI 2, SHI 1 où la procédure pour obtenir la dilution équivalente est remplacée par une intégration de Riemann utilisant des données Autolib pour le calcul du

taux d'absorption [Hébert, 2004].

Ces approches sont basées dans leur formalisme sur la méthode des probabilités de collision. Elle procède par une expansion rationnelle des probabilités de collision en fonction de la dilution. Ces méthodes ne peuvent donc pas utiliser la méthode des caractéristiques.

Ces cinq différentes options ont été testées sur les benchmarks CANDU NG et BWR tandis que l'option USS 2 a été retenue pour le benchmark PWR.

Dans l'étude des benchmarks présentés, les crayons de combustible sont découpés en 4 anneaux concentriques représentant respectivement de l'intérieur vers l'extérieur 50%, 30%, 15% et 5% du volume du crayon. Un tel découpage est présenté à la Fig. 6.5. Il suit les recommandations faites dans [Santamarina et al., 2004] pour traiter correctement la distribution spatiale de l'absorption résonnante de ^{238}U .

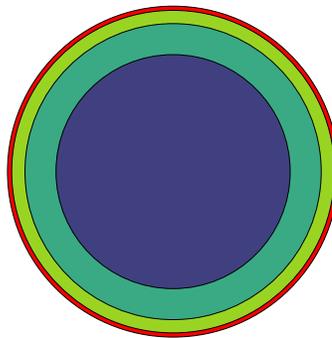


FIG. 6.5 Découpage des crayons de combustible

6.4.3 Notations

De manière à pouvoir comparer TRIPOLI4 et DRAGON, tous les benchmarks mentionnés ont été traités par des calculs de valeur propre à *buckling* nul : aucun modèle de fuites n'est utilisé. Les résultats sont présentés en termes de la différence

en k_{eff} i.e $\delta k_{\text{eff}} = k_{\text{eff}} - k_{\text{eff}}^{\text{ref}}$ et de l'erreur $\epsilon_i = \frac{\tau_i - \tau_i^{\text{ref}}}{\tau_i^{\text{ref}}}$ sur des taux de réactions macroscopiques τ_i avec i l'indice de région. Cette erreur est parfois présentée à l'aide de l'erreur moyenne $\bar{\epsilon}$ et de l'erreur maximum ϵ_{max} définie par

$$|\epsilon_{\text{max}}| = \max_i (|\epsilon_i|), \quad (6.1)$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{V_{\text{tot}}} \sum_i V_i |\epsilon_i|, \quad (6.2)$$

où V_i est le volume de la région i et $V_{\text{tot}} = \sum_i V_i$.

Pour cette comparaison, les taux de réactions sont condensés dans une structure à quatre groupes présentée au Tableau 6.2. Cette structure décompose le domaine énergétique en une zone rapide, une zone des résonances non-résolues, une zone de résonances résolues et finalement, une zone thermique.

groupe	intervalle d'énergie (eV)
1]4.0762.10 ⁵ [
2]6.7729.10 ² 4.0762.10 ⁵ [
3]2.7679 6.7729.10 ² [
4] 2.7679[

TAB. 6.2 Macro-groupes d'énergie pour la condensation

CHAPITRE 7

BENCHMARKS BWR

On présente dans ce chapitre l'étude relative aux trois benchmarks BASALA présentés au § 6.2.1. L'analyse paramétrique quant à la discrétisation, le tracking et l'anisotropie est présentée pour le cas BASALA-H tandis que pour les benchmarks BASALA-C et BASALA-V, on se contente de présenter les résultats. En effet, la configuration pour ces deux cas a été déduite à partir de la configuration retenue dans l'analyse du cas BASALA-H. Bien sûr, ces configurations ont ensuite été testées en raffinant les paramètres pour s'assurer de la convergence des résultats sans pour autant refaire une analyse paramétrique complète. Finalement, on discute du temps de calcul et des performances des méthodes d'accélération.

7.1 Remarques préliminaires

Pour ces benchmarks avec comme combustible du MOX, les isotopes à auto-protéger sont l' ^{235}U , l' ^{238}U , le ^{238}Pu , le ^{239}Pu , le ^{240}Pu , le ^{241}Pu , le ^{242}Pu , l' ^{241}Am et le Zr. En plus des modèles d'auto-protection présentés au Chapitre 6, on s'intéresse aussi à l'utilisation du modèle d'auto-protection développé dans le cadre de l'approche de Ribon étendue pour traiter le recouvrement des résonances entre deux isotopes. En effet, avec le MOX, les recouvrements de résonances entre isotopes de l'Uranium et du Plutonium ont un effet important, spécialement les recouvrements entre l' ^{238}U et le ^{240}Pu aux alentours de 66 eV et 21 eV. Ainsi, le modèle USS 1* représente le modèle USS 1 avec prise en compte de l'auto-protection mutuelle entre l' ^{238}U et le ^{240}Pu .

Pour l'auto-protection, une géométrie non discrétisée telle que présentée à la Fig. 6.2 est utilisée. Aucune discrétisation du caloporteur n'est faite et des conditions aux frontières blanches avec un tracking non-cyclique sont utilisées. Une densité uniforme de 50 cm^{-1} et une quadrature azimuthale trapézoïdale avec 10 angles $\in [0, \pi/2]$ sont utilisées. Les résultats ont été trouvés peu sensibles à ces paramètres. Par ailleurs, les régions résonnantes sont définies par regroupement des cellules selon leur teneur en Plutonium. On a donc un total de 4 anneaux par cellule \times 4 teneurs = 16 régions résonnantes.

Par contre, pour le calcul multigroupe de flux, un raffinement important à la fois de la géométrie et du tracking est nécessaire pour obtenir une solution convergée. En effet, comme la méthode des caractéristiques est basée sur une hypothèse de source plate (c.f. § 2.1.4) et que le libre parcours moyen dans l'eau légère est faible, une importante discrétisation est nécessaire dans ces assemblages qui présentent d'importants gradients de flux. Un tracking cyclique qui permet de reproduire exactement les conditions aux limites de réflexion a été utilisé.

Comme le but est de valider des méthodes, on n'a pas recherché de compromis comme on peut en trouver dans le développement d'une schéma de calcul à vocation pratique. Pourtant, ce travail est la base même d'un tel schéma.

Les calculs TRIPOLI4 ont été menés avec 20 millions d'historiques par paquet de 1000 neutrons. L'écart-type sur le k_{eff} est de l'ordre de 25 pcm tandis que pour les taux de réaction auxquels on s'est intéressé, il est de l'ordre de 0.1 % dans le groupe 4, 0.2 % dans les groupes 2 et 3 et 0.05 % dans le groupe 1.

7.2 Le cas BASALA-H

On se concentre ici sur le cas BASALA-H. Les aspects importants de l'analyse paramétrique et la comparaison des différents modèles d'auto-protection avec les résultats de TRIPOLI4 sont présentés.

7.2.1 Notations et configurations

La discrétisation de l'assemblage complet a été étudiée sous deux angles, la sectorisation des cellules de combustible et la discrétisation (par anneaux) du caloporteur. Concernant la sectorisation, les trois configurations \mathcal{F}_i utilisées sont présentées à la Fig. 7.1. Les différentes discrétisations du caloporteur \mathcal{C}_i sont, quant à elles, présentées à la Fig. 7.2. Par la suite, une géométrie est entièrement définie en précisant les configurations \mathcal{F}_i et \mathcal{C}_i utilisées.

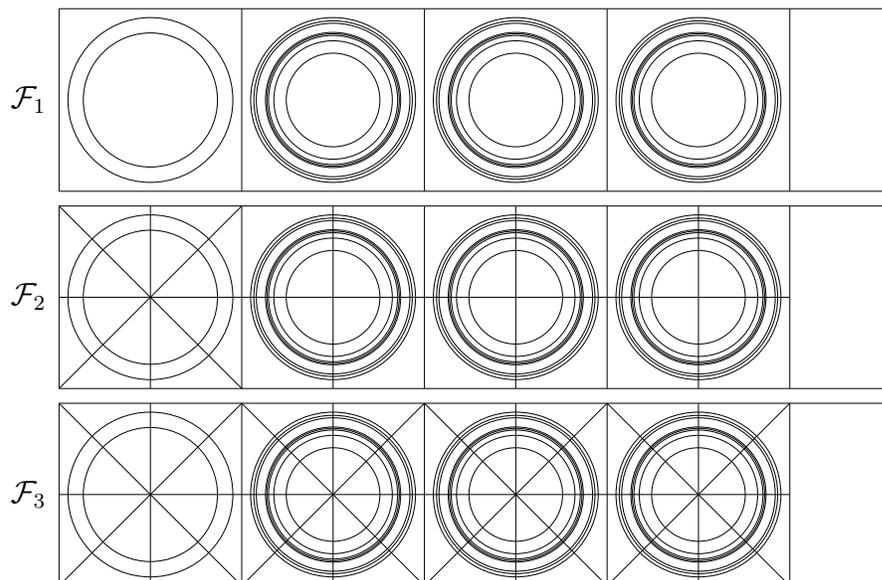


FIG. 7.1 Les différentes sectorisations des cellules

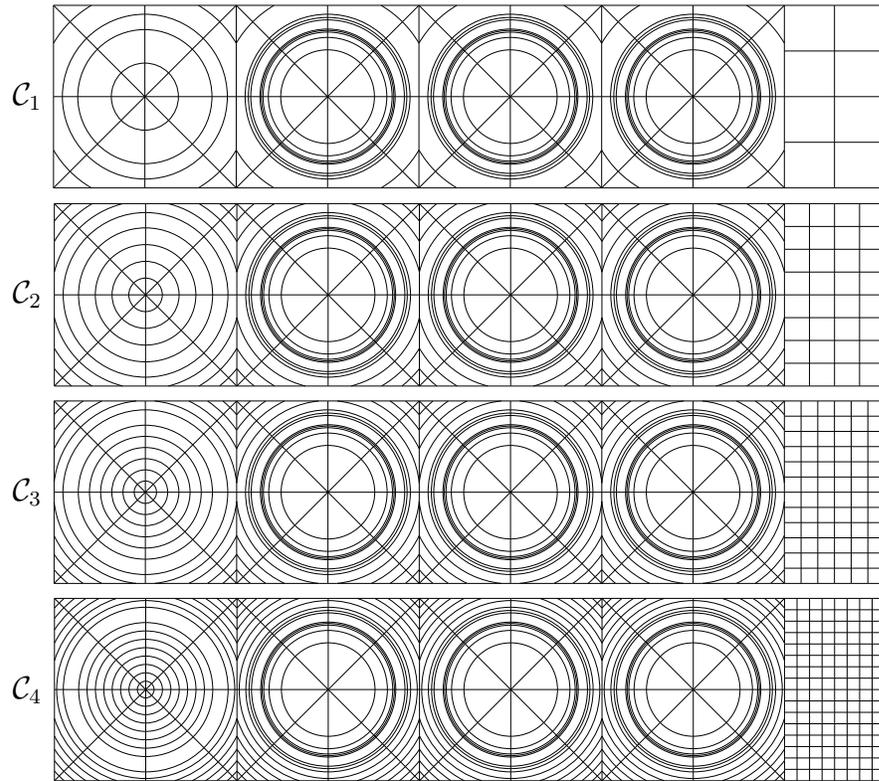


FIG. 7.2 Les différentes discrétisations du caloporteur

La procédure de tracking cyclique est basée sur une quadrature azimuthale qui approche une quadrature trapézoïdale dans $[0, \pi/2]$ [Sanchez et al., 2002] et une densité constante de lignes d'intégration. Deux types de quadratures polaires ont été utilisées, une quadrature de Gauss-Legendre (G-L) et une quadrature obtenue par une procédure d'optimisation vis à vis des fonctions de Bickley-Naylor (OP_0) telle que proposée dans [Goldberg et al., 1995] et discutée dans l'Annexe II.

En ce qui concerne la diffusion, différents ordres L ont été testés quant à l'expansion de la section efficace de diffusion en polynômes de Legendre. Ces configurations sont notées P_L ; P_0^* (resp. P_0^\dagger) fait référence à une correction de transport type APOLLO (resp. WIMS) pour la section efficace isotrope de diffusion [Marleau et al., 2006b].

Ainsi, avec ces notations, la configuration de départ pour ces différentes analyses est :

Diffusion P_0^* ,	Quadrature Azimuthale 8 angles,
Auto-protection USS 1*,	Densité de lignes 100 cm ⁻¹ ,
Géométrie $\mathcal{C}_4\text{-}\mathcal{F}_3$,	Quadrature polaire OP ₀ à 3 angles.

Pour cette étude paramétrique, on s'est concentré sur le taux de fission dans le groupe 4, de capture radiative dans les groupes 2 et 3 et finalement, le taux d'interaction totale dans le groupe 1.

7.2.2 Convergence spatiale

Au Tableau 7.1, les sectorisations \mathcal{F}_1 et \mathcal{F}_2 sont comparées à la sectorisation \mathcal{F}_3 . On voit clairement que la configuration avec 8 secteurs \mathcal{F}_3 est nécessaire pour une représentation correcte des gradients de flux dans l'assemblage, spécialement dans le groupe 4 des neutrons thermiques.

Secteurs	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon}$ (ϵ_{max}) (%)			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
\mathcal{F}_1	311.7	2.24 (-4.41)	0.04 (0.05)	0.04 (-0.10)	0.41 (-0.91)
\mathcal{F}_2	64.3	0.45 (-0.94)	0.00 (-0.01)	0.01 (-0.02)	0.08 (-0.19)

La référence est la configuration \mathcal{F}_3 .

TAB. 7.1 Effet de la sectorisation

L'effet de discrétisation du caloporteur est présenté au Tableau 7.2 où sont comparées les configurations \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_3 vis à vis de la configuration \mathcal{C}_4 . On voit bien

qu'un maillage assez fin est nécessaire pour assurer la convergence du flux thermique et de la réactivité. Pour la suite, la configuration \mathcal{C}_3 a été retenue.

Discr.	Δk_{eff}	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$							
		Fission gr. 4		Capture gr. 3		Capture gr. 2		Totale gr. 1	
Eau	(pcm)								
\mathcal{C}_1	120.1	0.09	(0.17)	0.00	(0.01)	0.01	(0.01)	0.01	(-0.03)
\mathcal{C}_2	21.5	0.05	(0.08)	0.01	(0.01)	0.01	(0.02)	0.01	(0.01)
\mathcal{C}_3	-0.3	0.04	(0.04)	0.01	(0.01)	0.02	(0.02)	0.01	(0.01)

La référence est la configuration \mathcal{C}_4 .

TAB. 7.2 Effet de la discrétisation du caloporteur

Pour la mise en place d'un schéma de calcul optimisé, la discrétisation du caloporteur peut être différenciée par cellules. Dans ce cadre, comme montré dans [Santamarina et al., 2006], une discrétisation fine est obligatoire dans la lame d'eau et les cellules de coin mais dans l'assemblage, un maillage plus grossier peut être utilisé.

7.2.3 Convergence vis à vis du nombre d'angles azimuthaux

Au Tableau 7.3, on compare les calculs avec 8, 16, 20 angles avec le cas à 32 angles.

Nombre d'angles	Δk_{eff}	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$							
		Fission gr. 4		Capture gr. 3		Capture gr. 2		Totale gr. 1	
8	-182.8	0.19	(-0.43)	0.28	(0.36)	0.16	(0.21)	1.04	(-2.02)
16	-30.1	0.05	(-0.09)	0.01	(0.02)	0.04	(0.04)	0.17	(-0.21)
20	-1.2	0.04	(0.06)	0.01	(-0.03)	0.01	(0.02)	0.05	(-0.18)

La référence est la configuration avec 32 angles.

TAB. 7.3 Effet du nombre d'angles azimuthaux

On voit que 20 angles sont suffisants pour garantir une bonne convergence à la fois de la réactivité et des flux.

Comme on l'a déjà mentionné, un tracking cyclique qui traite exactement les conditions aux frontières est nécessaire pour obtenir de bons résultats.

7.2.4 Convergence vis à vis de l'ordre d'expansion de la diffusion

On s'intéresse ici à l'ordre d'expansion du terme de diffusion qui garantit des résultats convergés. Comme on l'a déjà évoqué, un aspect important lié au traitement de l'anisotropie est le choix des quadratures azimuthales et polaires. On renvoie le lecteur à l'Annexe II pour plus de détails. Pour l'angle azimuthal, le choix d'une quadrature sur $[0, \pi]$ qui approche une quadrature construite par symétrie à partir d'une quadrature trapézoïdale à N_a points sur $[0, \pi/2]$ garantit la conservation des particules. Aucun problème n'apparaît à ce niveau-à mais par contre, en ce qui concerne la quadrature polaire, l'utilisation d'une quadrature OP_0 peut poser des problèmes car ces quadratures intègrent mal les polynômes de Legendre qui apparaissent dans l'Eq. (1.10) et donnent un schéma non-conservatif pour $P_{L \geq 1}$. En pratique, dépendamment des cas, l'erreur peut ne devenir significative que pour un ordre plus élevé. Il faut donc toujours comparer cette quadrature avec une quadrature qui est conservative, par exemple G-L. Dans l'étude des assemblages BASALA de [Vaglio-Gaudard et al., 2006], il est montré que l'usage de la quadrature OP_0 devient problématique pour $P_{L \geq 4}$. Dans notre étude limitée à l'ordre 3, l'usage de la quadrature OP_0 est donc maintenu.

Les résultats sont présentés au Tableau 7.4 en faisant varier l'ordre d'anisotropie de 0 à 2 en prenant la configuration P_3 comme référence. On voit que l'effet d'anisotropie de diffusion est assez important et que contrairement au PWR, pour

ces configurations BWR-MOX, la différence entre les calculs P_1 et P_2 n'est pas négligeable. Par conséquent, une expansion au second ordre a été retenue pour la suite.

Pour confirmer l'usage d'une quadrature OP_0 , la configuration OP_0 à 3 angles a été comparée dans le cas P_3 avec un quadrature GL à 9 angles, l'écart en réactivité est de 5 pcm tandis que l'écart moyen sur les divers taux de réaction est inférieur à 0.1 %. Les quadratures G-O et OP_1 introduites dans l'Annexe II ont aussi été testées sur ce benchmark et ont donné des résultats comparables à OP_0 ; ce benchmark est peu sensible à la quadrature polaire.

Ordre L	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon}$ (ϵ_{max}) (%)							
		Fission gr. 4		Capture gr. 3		Capture gr. 2		Totale gr. 1	
P_0	-47.1	2.41	(6.50)	0.90	(-1.86)	1.17	(1.61)	0.57	(0.85)
P_0^*	-80.5	0.45	(0.52)	0.22	(-0.63)	0.52	(0.71)	0.63	(-1.64)
P_0^\dagger	-74.2	0.34	(-0.43)	0.20	(-0.34)	0.71	(0.94)	0.41	(-1.13)
P_1	-128.4	0.19	(-0.25)	0.34	(0.45)	0.06	(0.21)	0.23	(-0.29)
P_2	30.4	0.02	(0.06)	0.06	(-0.06)	0.06	(-0.08)	0.11	(0.13)

La référence est la configuration P_3 .

TAB. 7.4 Effet de l'ordre d'expansion P_L du terme de diffusion

7.2.5 Comparaison des modèles d'auto-protection

Conformément à l'étude de convergence précédente, pour la comparaison des différents modèles d'auto-protection, le calcul du flux a été fait avec

Diffusion P_2 ,

Densité de lignes 100 cm^{-1} ,

Géométrie $\mathcal{C}_3\text{-}\mathcal{F}_3$ (11104 régions),

Quadrature polaire OP_0 à 3 angles.

Quadrature Azimuthale 20 angles,

Les résultats sont présentés au Tableau 7.5. On voit bien que lorsque l'on utilise un méthode d'auto-protection par sous-groupes, l'accord entre DRAGON et TRIPOLI4 est très bon. Un aspect intéressant est l'amélioration de 134 pcm du k_{eff} liée à l'utilisation du modèle d'auto-protection mutuelle pour l' ^{238}U et le ^{240}Pu . En ce qui concerne les modèles dérivés de la méthode de Stamm'ler, les améliorations introduites par les modèles SHI 1 et SHI 2 sont significatives pour la prédiction de la réactivité mais l'erreur sur les taux de réaction montrent les limites de ces approches.

Modèle	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon}$ (ϵ_{max}) (%)			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
USS 1*	-71	0.26 (-0.60)	1.07 (1.39)	0.40 (-0.41)	0.89 (-1.19)
USS 1	-205	0.21 (-0.68)	1.79 (2.15)	0.40 (-0.41)	0.89 (-1.18)
USS 2	-204	0.21 (-0.68)	1.74 (2.06)	0.40 (-0.41)	0.89 (-1.18)
SHI 0	-464	0.23 (-0.64)	13.98 (14.17)	0.64 (-2.64)	0.89 (-1.14)
SHI 1	-300	0.46 (0.61)	3.24 (5.74)	4.91 (-5.80)	0.91 (-1.06)
SHI 2	-77	0.24 (-0.52)	3.73 (4.56)	4.90 (-5.82)	0.89 (-1.17)

Référence TRIPOLI4 : $k_{\text{eff}} = 1.23933$ ($\sigma = 26$ pcm).

TAB. 7.5 Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour BASALA-H

Si l'on s'intéresse au taux de fission thermique, on voit que l'accord entre DRAGON et TRIPOLI4 est bon, quel que soit le modèle d'auto-protection. L'erreur moyenne est en dedans de trois écart-types du calcul Monte-Carlo. Ce résultat valide le traitement d'une telle géométrie par la méthode des caractéristiques.

On présente ensuite une comparaison détaillée du taux de capture dans les groupes 2 et 3 respectivement. Les taux sont homogénéisés selon la teneur en Plutonium des diverses cellules. Bien que les flux soient légèrement différents, cette présentation des résultats ne cachent aucune compensation notable. Les quatre anneaux de

combustible dans une cellule ne sont par contre pas homogénéisés de manière à illustrer l'effet de peau et sa représentation par les divers modèles d'auto-protection. Par conséquent, les macro-régions ainsi définies sont notées «MOX teneur % i_r » où i_r correspond à la couronne considérée ($i_r = 1$ est à la partie centrale des crayons). Les taux présentés sont intégrés sur le volume de la macro-région correspondante i.e. ils sont en s^{-1} .

Macro Région	Taux TRIPOLI4	ϵ (%)					
		USS 1*	USS 1	USS 2	SHI 0	SHI 1	SHI 2
3.0% 1	9.59516e-04	-0.18	-0.18	-0.18	-0.87	-6.58	-6.60
3.0% 2	6.01239e-04	-0.07	-0.07	-0.07	-5.30	-5.65	-5.67
3.0% 3	3.14838e-04	0.47	0.47	0.47	-9.28	-0.32	-0.34
3.0% 4	1.08800e-04	0.56	0.56	0.56	-12.75	10.83	10.81
4.3% 1	4.41785e-03	-0.49	-0.49	-0.49	0.11	-6.25	-6.25
4.3% 2	2.75745e-03	-0.30	-0.30	-0.30	-3.69	-5.20	-5.21
4.3% 3	1.43661e-03	-0.14	-0.14	-0.14	-7.52	-0.46	-0.47
4.3% 4	4.95087e-04	0.05	0.05	0.05	-10.53	10.80	10.80
7.0% 1	7.13138e-03	-0.46	-0.46	-0.46	1.00	-5.52	-5.51
7.0% 2	4.42787e-03	-0.31	-0.31	-0.31	-2.27	-4.46	-4.46
7.0% 3	2.29078e-03	-0.32	-0.32	-0.32	-5.72	-0.08	-0.08
7.0% 4	7.85262e-04	0.05	0.05	0.05	-8.18	11.02	11.02
8.7% 1	6.27233e-03	-0.47	-0.47	-0.47	1.19	-5.23	-5.22
8.7% 2	3.88629e-03	-0.33	-0.34	-0.34	-1.92	-4.15	-4.14
8.7% 3	2.00898e-03	-0.19	-0.19	-0.19	-5.05	0.29	0.30
8.7% 4	6.88344e-04	-0.12	-0.12	-0.13	-7.63	10.93	10.94

TAB. 7.6 Taux de capture dans le macro-groupe 2

Le Tableau 7.6 présente les résultats pour le groupe 2 qui correspond au domaine des

résonances non-résolues. On voit que USS 1 avec ou sans corrélation entre l' ^{238}U et le ^{240}Pu et USS 2 donnent des résultats très proches de la référence TRIPOLI4. La plupart des taux sont en dedans de deux écart-types et tous sont en dedans de trois. Pour SHI 0, on voit bien que le taux de capture est sous-estimé dans la couronne externe de tous les crayons à cause de l'effet de peau. SHI 1 et 2 donnent des résultats proches l'un de l'autre; on observe une sous-estimation dans la région interne des crayons et une surestimation dans la couronne externe. Ces modèles prédisent un effet de peau trop prononcé dans ce domaine d'énergie.

Macro Région	Taux TRIPOLI4	ϵ (%)					
		USS 1*	USS 1	USS 2	SHI 0	SHI 1	SHI 2
3.0% 1	3.16810e-03	<u>1.07</u>	<u>1.70</u>	1.56	22.80	7.23	3.52
3.0% 2	2.25222e-03	0.57	1.01	1.53	7.97	5.86	2.13
3.0% 3	1.56002e-03	0.69	0.92	1.60	-19.21	0.52	-0.33
3.0% 4	1.17163e-03	0.16	0.17	0.11	-63.53	-15.03	-14.12
4.3% 1	1.41355e-02	<u>1.00</u>	<u>1.75</u>	1.57	22.34	6.63	3.88
4.3% 2	9.90927e-03	<u>0.22</u>	<u>0.76</u>	1.10	9.20	5.14	2.19
4.3% 3	6.61854e-03	-0.21	0.10	0.56	-15.62	1.22	-0.92
4.3% 4	4.65656e-03	-1.05	-1.03	-1.15	-59.25	-14.90	-14.64
7.0% 1	2.31598e-02	<u>1.57</u>	<u>2.43</u>	2.22	21.41	3.58	5.09
7.0% 2	1.59881e-02	<u>0.71</u>	<u>1.36</u>	1.53	9.95	2.89	3.28
7.0% 3	1.03090e-02	-0.54	-0.16	0.10	-12.29	0.79	0.63
7.0% 4	6.66313e-03	-1.54	-1.51	-1.71	-53.86	-11.72	-12.65
8.7% 1	2.04708e-02	<u>1.85</u>	<u>2.72</u>	2.51	20.94	2.28	5.66
8.7% 2	1.40839e-02	<u>1.01</u>	<u>1.67</u>	1.80	9.82	1.58	3.89
8.7% 3	9.01504e-03	-0.36	0.02	0.24	-11.53	0.04	1.53
8.7% 4	5.63948e-03	-1.27	-1.25	-1.46	-51.99	-10.31	-11.14

TAB. 7.7 Taux de capture dans le macro-groupe 3

Dans le domaine des résonances résolues présenté au Tableau 7.7, la situation pour SHI est encore dégradée, l'incapacité du formalisme de SHI 0 à représenter la distribution spatiale de l'auto-protection est clairement montrée et conduit à de grandes erreurs. Avec SHI 1 et 2, les résultats sont grandement améliorés mais l'erreur reste importante dans la couronne externe des divers crayons. Lorsque l'on passe aux modèles par sous-groupes USS 1 et 2, les résultats deviennent proches de TRIPOLI4. Alors que USS 1 sans corrélation et USS 2 donnent des écarts similaires, l'introduction du modèle d'auto-protection mutuelle avec USS 1 réduit de manière notable l'erreur. Il est intéressant de noter que lorsque la teneur en Plutonium augmente, l'écart avec TRIPOLI4 augmente étant donné qu'il est principalement dû au recouvrement de résonances entre les isotopes de l'Uranium et du Plutonium. Les valeurs illustrant ce phénomène et son amélioration avec le modèle de corrélation sont soulignées au Tableau 7.7.

7.3 Le cas BASALA-C

On présente ici les résultats relatifs à l'assemblage BASALA-C avec une croix de contrôle remplie de crayons de B_4C (16 par aile de la croix).

La modélisation de cet assemblage s'est fait en suivant les recommandations de l'étude paramétrique précédente sur le cas BASALA-H. On a ensuite fait un calcul sur une configuration plus discrétisée avec un expansion à l'ordre 3 du terme de diffusion pour vérifier que la convergence est atteinte (de la même manière que lors de l'étude paramétrique sur BASALA-H). Ce test a été concluant.

Les résultats sont présentés au Tableau 7.8 pour le modèle d'auto-protection USS 1 avec ou sans traitement de l'auto-protection mutuelle entre l' ^{238}U et le ^{240}Pu . L'accord entre DRAGON et TRIPOLI4 est bon. Lorsque l'on compare avec les

résultats du cas BASALA-H, une différence notable est la dégradation de la prédiction du taux de fission thermique à cause de la présence du fort absorbant dans la croix de contrôle. Cependant, l'erreur maximale de 1.4%, localisée dans un coin de l'assemblage est totalement acceptable, surtout si l'on considère que la puissance d'un tel assemblage est largement réduite par le mécanisme de réactivité. En effet, le pic de puissance dans cet assemblage ne pose pas de problème de sûreté.

Un autre point intéressant est la différence en k_{eff} entre USS 1* et USS 1 : elle est réduite de 134 pcm dans le cas BASALA-H à 73 pcm dans cette configuration. En effet, cet assemblage simule des conditions de modération plus grande et par conséquent, le spectre est plus thermique; l'erreur introduite par le recouvrement des résonances dans le domaine épithermique est réduite.

Modèle	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon}$ (ϵ_{max}) (%)			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
USS 1*	-70	0.69 (1.40)	1.10 (1.54)	0.18 (-0.41)	0.98 (-1.18)
USS 1	-143	0.67 (1.35)	1.76 (2.04)	0.18 (-0.41)	0.98 (-1.18)

Référence TRIPOLI4 : $k_{\text{eff}} = 1.12617$ ($\sigma = 27$ pcm).

TAB. 7.8 Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour BASALA-C

7.4 Le cas BASALA-V

Au vu des résultats précédents, on voit clairement l'importance d'un modèle d'auto-protection qui traite le recouvrement des résonances entre isotopes dans le cas d'un combustible MOX. De plus, on a vu que cet effet dépend des conditions de modération de l'assemblage i.e. du taux de vide; dans le cas d'un réacteur BWR où le taux de vide varie de manière très importante axialement (quasiment de 0 % en bas du réacteur à 80 % en haut), ce point est donc crucial. Les résultats sur

les deux cas précédents montrent la bonne performance du modèle de corrélation développé dans le cadre du modèle d'auto-protection de Ribon étendu. Dans ce contexte, on a ajouté la configuration BASALA-V i.e. l'assemblage BASALA-H où l'on a augmenté le rayon externe de la surgaine en aluminium de manière à obtenir un taux de vide de l'ordre de 70 %.

Pour modéliser cet assemblage, on a suivi la même démarche que pour BASALA-C à partir des résultats de l'étude paramétrique sur BASALA-H.

Les résultats sont présentés au Tableau 7.9 pour les modèle d'auto-protection USS 1* et USS 1. Les résultats restent bons mais montrent les limites du modèle de corrélation présenté ; les 156 pcm qui séparent USS 1* et USS 1 ne sont pas suffisants pour compenser les 415 pcm d'erreur de USS 1 en comparaison de TRIPOLI4. L'erreur maximale sur le taux de capture est dégradée de 0.5 %. Cette dégradation est sûrement en partie causée par le recouvrement de résonances entre d'autres isotopes que l' ^{238}U et le ^{240}Pu qui devient important avec le spectre de ce cas à haut taux de vide. Par ailleurs, le taux de fission thermique est lui-aussi dégradé ; il sous-estimé par près de 2 % dans les coins de l'assemblage. On peut penser que au delà du modèle d'auto-protection et de la méthode des caractéristiques, c'est le maillage énergétique XMAS à 172 groupes qui est ici mis en défaut avec un tel spectre. Ceci est cohérent avec ce qui a été observé dans [Santamarina et al., 2006] avec l'introduction d'un nouveau maillage énergétique, le maillage SHEM à 281 groupes [Hfaiedh & Santamarina, 2005] pour le traitement des assemblages BASALA.

Modèle	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
USS 1*	-259	0.72 (-1.98)	1.43 (1.97)	0.28 (-0.33)	0.87 (-1.46)
USS 1	-415	0.66 (-2.08)	2.16 (2.74)	0.28 (-0.33)	0.87 (-1.45)

Référence TRIPOLI4 : $k_{\text{eff}} = 1.21260$ ($\sigma = 26$ pcm).

TAB. 7.9 Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour BASALA-V

7.5 Temps de calcul et efficacité des méthodes d'accélération

7.5.1 Dans le cadre de l'auto-protection par une méthode des sous-groupes

On s'est limité ici à comparer l'utilisation de la méthode des caractéristiques avec différentes options d'accélération et la méthode des probabilités de collision avec le modèle USS 2 d'auto-protection. Le modèle USS 1 n'est, en pratique pas intéressant avec une autre approche que CP comme on le montre au Chapitre 8. Pour ACA, la version Two-step ACA est utilisée dans ces calculs d'auto-protection.

Au Tableau 7.10, on présente une comparaison des résultats pour une géométrie BASALA-H sans regroupement de cellules ; les temps sont normalisés par rapport au temps CP avec intégration vectorielle des probabilités de collision. Les k_{eff} obtenus avec CP ou MOC comme solveur pour l'auto-protection sont en-dedans de 2 pcm. Dans ce cas, la géométrie non-discrétisée compte 402 régions. D'abord, on voit que sans accélération, la méthode des caractéristiques n'a pas convergé : le maximum d'itérations permises pour la boucle interne, fixé à 20, est atteint à la fin du processus d'auto-protection dans certains groupes résonnants de certains isotopes sans que le critère de convergence de 10^{-5} soit satisfait. Dès que l'une

des méthodes d'accélération proposées est utilisée, la convergence est atteinte en un temps moindre qu'avec CP. En termes de préconditionnement, ACA donne de meilleurs résultats que SCR mais, par contre, combinée avec GMRES, le faible coût de cette accélération permet d'obtenir un temps CPU plus faible qu'avec ACA même si le nombre d'itérations est légèrement plus important. Dans ces deux configurations avec GMRES et préconditionnement, MOC est plus de deux fois plus rapide que CP.

KRYL	paramètres		N_{calc}	t^a (s.)
	ACA	SCR		
-	-	-	278235 ^b	2.960
-	✓	-	53361	0.627
-	-	✓	71238	0.754
GMRES	-	-	41486	0.518
GMRES	✓	-	34063	0.475
GMRES	-	✓	37131	0.453

^a la référence est le temps avec CP (13608 s),

^b résultat non convergé.

TAB. 7.10 Auto-protection USS 2 sur l'assemblage BASALA-H

Bien sûr, comme on l'a évoqué plus haut, il est possible dans le cadre de l'auto-protection de regrouper les cellules sans détériorer les résultats. On a donc refait ces tests pour une géométrie où les cellules de l'assemblage sont regroupées selon leur teneur en MOX. Ainsi, le nombre de régions est réduit à 41 et la méthode CP est directement avantageuse : le temps avec CP (toujours normalisé par rapport au temps avec CP du cas précédent) est réduit à 0.659. Avec la méthode des caractéristiques accélérée par GMRES préconditionné par SCR, le temps est réduit à

0.432. Si la réduction est moins significative, MOC reste 50 % plus rapide que CP dans ce cas. Ainsi, comme on le voit, la stratégie d'accélération basée sur GMRES est efficace dans ce contexte de l'auto-protection avec USS 2.

Bien sûr, pour l'auto-protection, il est commun dans le cas d'assemblages à maillage cartésien d'utiliser l'approximation des courants d'interfaces de la méthode des probabilités de collision. Elle consiste à ne calculer les matrices de probabilités de collision qu'à l'intérieur des différentes cellules en couplant ces cellules par les courants d'interface considérés uniformes et représentés angulairement par une expansion DP_1 . C'est la méthode UP_1 de SYBILT dans DRAGON utilisée au Chapitre 9. Cette option a aussi été testée sur la géométrie BASALA-H et le temps est largement diminué : cette approche est bien plus rapide (≈ 200) que MOC. Par contre, cette méthode devient inapplicable directement lorsque la géométrie n'est plus cartésienne, comme c'est le cas avec BASALA-C ; dans ce cas, l'utilisation de MOC est intéressante, au moins à titre de référence en comparaison d'un calcul d'auto-protection avec la méthode des courants d'interfaces sur une géométrie partiellement homogénéisée dans la zone de la croix.

7.5.2 Dans le cadre du calcul multigroupe de flux

On présente au Tableau 7.11 une comparaison des différentes méthodes d'accélération multigroupe sur le benchmark BASALA-H dans la configuration retenue à l'issue de l'étude paramétrique. Les temps sont normalisés par rapport au cas où l'on utilise la méthode Two-step ACA.

D'abord, on observe par les itérations libres que la convergence sur un tel benchmark est lente. La méthode Two-step ACA est de loin la plus performante et donne une accélération de 3.6 en comparaison des itérations libres. Il est intéressant de

noter qu'en comparaison de **ACA**, elle permet de réduire le temps de construction des matrices du système correctif par un facteur de 2.7 et, en plus, fournit un préconditionnement plus performant. Au final, Two-step **ACA** offre un gain d'environ 10 % en temps de calcul par rapport à **ACA**. Dans cette configuration P_2 , la résolution du système correctif de **ACA** représente 6.8 % du temps d'une itération de la méthode des caractéristiques.

P_L	Option d'accélération	temps CPU normalisés ^a			N_{out}^b	N_{track}^c	N_{calc}^d
		ASM	FLU	Total			
P_2	–	0.000	3.640	3.640	25	89	14179
	SCR	0.039	3.265	3.304	25	73	12123
	ACA	0.019	1.088	1.107	7	23	3922
	Two-step ACA	0.007	0.993	1.000	6	21	3578
P_0^*	Two-step ACA	0.007	0.353	0.360	5	19	3268

^a la référence est le temps total pour le calcul P_2 avec Two-step **ACA** (13.5 h),

^b N_{out} est le nombre d'itérations externes,

^c N_{track} est le nombre d'accès au tracking,

^d $N_{\text{calc}} = \sum_i N_g^{(i)}$ où $N_g^{(i)}$ est le nombre de groupes traités à l'itération i .

TAB. 7.11 Résultats en termes du coût de calcul sur le benchmark BASALA-H

En ce qui concerne **SCR**, on présente ici les résultats pour l'extension proposée de **SCR** à l'accélération des moments anisotropes du flux. On voit que cette accélération n'est pas très efficace et n'offre un gain que d'environ 10 % par rapport aux itérations libres. La résolution du système correctif de **SCR** représente 2.6 % du temps d'une itération de la méthode des caractéristiques. Si l'on utilise la version standard de **SCR**, le temps de construction dans ASM est réduit mais les performances aussi si bien que l'efficacité est à peu près la même. Pour la configuration

P_2 , on a aussi testé la combinaison de Two-step ACA et SCR avec le schéma deux niveaux proposé au § 4.5 sans amélioration (ni détérioration) des résultats.

Au Tableau 7.11, on a aussi reporté un calcul sur la même configuration de géométrie et de tracking mais avec une diffusion P_0^* . On observe d'abord que le temps de calcul est largement réduit lorsque la diffusion est isotrope; en effet, bien que le formalisme MOC s'accommode facilement de l'anisotropie, le coût de calcul de ce traitement pour l'intégration du flux n'est pas négligeable. Ainsi, dans cette configuration, la résolution du système ACA représente 19.2 % du temps d'une itération de MOC. Par ailleurs, les performances de ACA sont meilleures dans le cas P_0^* avec une réduction d'environ 9 % du nombre d'intégrations du flux. On est bien loin de la chute de performances de ACA discutée sur l'exemple du benchmark de Stepanek au Chapitre 4 lorsque la diffusion est anisotrope mais on observe tout de même une dégradation.

Les performances pour le benchmark BASALA-V sont semblables à celles du benchmark BASALA-H. Dans le cas du benchmark BASALA-C, la présence de la croix augmente le nombre de régions et rend la convergence du problème encore plus lente. Les itérations libres n'ont pas convergé au bout de $N_{\text{track}} = 100$ tandis qu'avec Two-step ACA, la convergence est atteinte pour $N_{\text{out}} = 7$, $N_{\text{track}} = 26$, $N_{\text{calc}} = 4464$ soit une augmentation d'environ 25 % du nombre de calculs de flux.

Ses configurations très discrétisées avec des gradients de flux importants représentent de très bons benchmarks réalistes pour les méthodes numériques de transport neutronique. MOC accélérée par Two-step ACA donne de bons résultats et assure une convergence en un nombre raisonnable d'itérations.

CHAPITRE 8

BENCHMARK CANDU NG

On s'intéresse dans ce chapitre à l'étude du benchmark CANDU NG présenté au § 6.2.2. Une étude paramétrique similaire à celle présentée au Chapitre 7 a été menée pour le traitement de cet assemblage. Les conclusions de cette étude sont d'abord présentées et les résultats en termes de réactivité du vide sont ensuite analysés. La méthode des caractéristiques a été utilisée à la fois pour le calcul multigroupe de flux mais aussi pour l'auto-protection par une méthode des sous-groupes.

Ce benchmark a été étudié avec et sans Dysprosium dans le crayon central de l'assemblage de manière à illustrer l'intérêt d'un poison tel que le Dysprosium pour le contrôle de la réactivité du vide. Par ailleurs, les configurations à une cellule et 2×2 cellules ont été traitées. Dans le cas de l'assemblage, la vidange totale a été étudiée mais aussi la vidange en échiquier en appliquant des conditions de translation à la frontière et en vidangeant deux cellules en diagonal. Dans [Cotton et al., 2005], il a été observé sur une cellule ACR-700 que dans une telle configuration de vidange, la réactivité du vide est plus importante que dans le cas d'une vidange complète du caloporteur. Dans une autre étude [Talebi, 2006], cette configuration en échiquier a été analysée avec DRAGON en utilisant le module EXCELT ; compte tenu des limitations de ce module, les crayons étaient remplacés par des crayons carrés en homogénéisant le combustible avec la gaine.

Pour cette étude, un autre code Monte-Carlo a été utilisé pour la validation, le code MCNP5* développé au *Los Alamos National Laboratory* [X-5 Monte Carlo Team,

*Ce code requiert une licence pour son utilisation et les résultats de cette étude avec ce code ont été obtenus par R. Karthikeyan, détenteur d'une telle licence pour son travail de doctorat.

2003]. Une librairie au format «A Compact ENDF» (ACE) nécessaire pour les analyses avec MCNP5 a été générée de manière cohérente avec les fichiers PENDF pour TRIPOLI4 et la DRAGLIB pour DRAGON en utilisant une autre méthode implantée dans la classe Python PyNjoy [Karthikeyan, 2006].

8.1 Modélisation de la cellule

Les isotopes à auto-protéger sont l' ^{235}U , l' ^{238}U , le ^{160}Dy , le ^{161}Dy , le ^{162}Dy , le ^{163}Dy , le ^{164}Dy et le Zr. Pour l'auto-protection, une géométrie non-discrétisée est utilisée. Des conditions aux frontières uniformes et isotropes (de réflexion dans le cas à une cellule, de translation dans le cas 2×2 cellules) avec un tracking non-cyclique sont utilisées. Les paramètres de tracking sont une densité uniforme de 20 cm^{-1} et une quadrature azimuthale trapézoïdale avec 8 angles $\in [0, \pi/2]$. Un point important, par contre, est la discrétisation du combustible. Comme on l'a indiqué au Chapitre 6, les crayons sont partagés en 4 régions annulaires ; pour cette étude, on a observé qu'une discrétisation supplémentaire «intérieur/extérieur» telle qu'illustrée à la Fig. 8.1 est importante. Cette discrétisation faite en termes de zones résonnantes, a un effet notable sur le k_{eff} (de l'ordre de 40 pcm) lors de la vidange du caloporteur et par conséquent, améliore la prédiction de la réactivité du vide (de l'ordre de 25 pcm). Le taux de capture résonnante dans la couronne externe des crayons est lui aussi amélioré (de l'ordre de 1.5 %). Le découpage en termes de régions pour le calcul multigroupe de flux permet quant à lui une amélioration de la prédiction du taux de fission thermique (de l'ordre de 2 %). Avec ce découpage, on obtient 8 régions par anneau \times 4 anneaux = 32 régions résonnantes pour une cellule.

Pour le calcul multigroupe de flux, comme le caloporteur est de l'eau légère, une discrétisation assez fine est nécessaire. Chacune des 3 régions annulaires de ca-

loporteur (correspondant aux différents anneaux de crayons de combustible) est divisée en 12 sous-anneaux. Une discrétisation plus grossière est employée pour le modérateur étant donné qu'il s'agit d'eau lourde. Cette discrétisation comporte des anneaux autour du tube de calandre et un maillage cartésien près de la frontière de la cellule. Ce maillage est utilisé pour représenter correctement les gradients de flux qui pourrait apparaître à cause de cellules voisines hétérogènes dans une configuration d'assemblage. Il faut tout de même noter que cet effet est faible même si la quantité d'eau lourde est moins importante dans une telle cellule en comparaison d'une cellule CANDU-6 traditionnelle. Au final, on obtient une géométrie telle qu'illustrée à la Fig. 8.1 qui compte 389 régions et 60 surfaces à la frontière. La géométrie à 2×2 cellules correspondante est présentée à la Fig. 8.2. Des conditions aux frontières uniformes et isotropes avec un tracking non-cyclique sont utilisées. En effet, au moment de cette étude, le module NXT était limité à ce genre de tracking. Notons que dans le cas de l'assemblage de 2×2 cellules, il n'y a pas d'approximation aux surfaces internes entre les cellules. Par conséquent, l'effet des conditions aux frontières approchées peut être déduit par comparaison des calculs à une cellule et 2×2 cellules. On reviendra sur cet effet dans la présentation des résultats. Une densité uniforme de 50 cm^{-1} et une quadrature azimuthale trapézoïdale avec 12 angles $\in [0, \pi/2]$ sont utilisées. La quadrature polaire consiste en une quadrature OP_0 à 2 angles. L'influence de ces paramètres de quadratures est faible pour le traitement d'un tel assemblage.

Un traitement isotrope avec correction de transport type APOLLO (P_0^*) a été utilisé pour la diffusion.

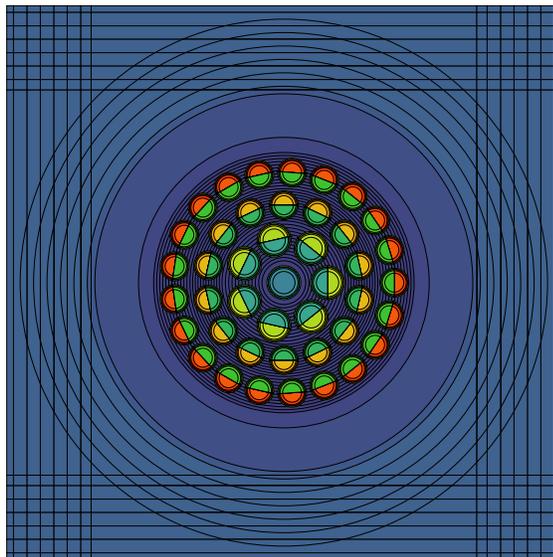
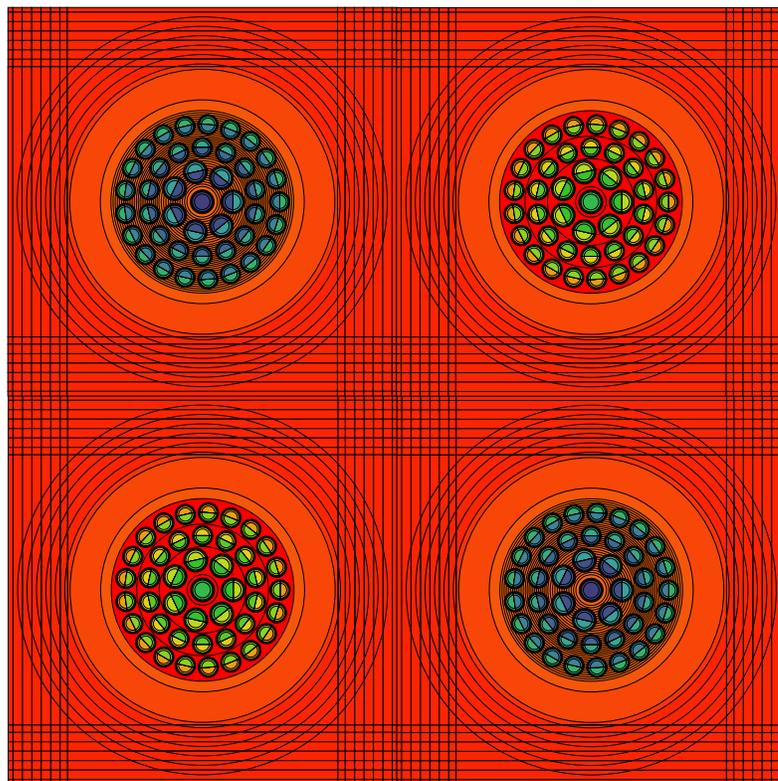


FIG. 8.1 Cellule CANDU NG discrétisée

FIG. 8.2 Assemblage de 2×2 cellules CANDU NG

Les calculs MCNP5 et TRIPOLI4 ont été menés avec 10 millions d'historiques.

8.2 Résultats pour une cellule

La réactivité du vide (CVR) est évaluée par

$$\rho_{\text{CVR}} = \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}} - \frac{1}{k_{\text{eff}}^{\text{vide}}} \right), \quad (8.1)$$

où $k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$ correspond à la cellule avec caloporteur à une densité de 0.714 g.cm^{-3} tandis que $k_{\text{eff}}^{\text{vide}}$ correspond à la cellule vidangée (simulée par une densité du caloporteur de 0.001 g.cm^{-3}).

Pour les calculs Monte-Carlo, étant donné que les calculs avec et sans caloporteur ne sont pas corrélés, les écart-types σ^{pleine} et σ^{vide} qui accompagnent $k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$ et $k_{\text{eff}}^{\text{vide}}$ respectivement, peuvent être combinés pour donner l'incertitude à 1σ sur la réactivité du vide par

$$\sigma_{\text{CVR}} = \sqrt{\frac{(\sigma^{\text{vide}})^2}{(k_{\text{eff}}^{\text{pleine}})^4} + \frac{(\sigma^{\text{pleine}})^2}{(k_{\text{eff}}^{\text{vide}})^4}}. \quad (8.2)$$

Les résultats pour une cellule sont présentés au Tableau 8.1 en termes du k_{eff} et du CVR pour MCNP5, TRIPOLI4 et les différents modèles d'auto-protection de DRAGON. En ce qui concerne les méthodes Monte-Carlo, les résultats de TRIPOLI4 et MCNP5 sont en bon accord, en dedans de $(\sigma^{\text{TRIPOLI4}} + \sigma^{\text{MCNP5}})$ pour tous les cas sauf le cas vidangé avec de l'Uranium naturel pour le crayon central pour lequel ils sont en dedans de $2(\sigma^{\text{TRIPOLI4}} + \sigma^{\text{MCNP5}})$. Un point intéressant est que pour un même nombre d'historiques, l'écart-type de MCNP5 est deux fois moins élevé qu'avec TRIPOLI4. Ceci peut en partie s'expliquer par l'utilisation d'un estima-

teur combiné (corde et collision) dans MCNP5. La comparaison des résultats de DRAGON est faite vis à vis des résultats de MCNP5.

Modèle	Uranium Naturel		
	$k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{vide}}$	$\rho_{\text{CVR}}^{\text{vide}}$ (pcm)
MCNP5	1.30449 (16 ^a)	1.32867 (17)	1395 (13 ^b)
TRIPOLI4	1.30435 (38 ^a)	1.32770 (39)	1348 (31 ^b)
SHI 0	1.29840 (-609 ^c)	1.32311 (-556)	1438 (43 ^d)
SHI 1	1.29909 (-540)	1.32291 (-576)	1386 (-9)
SHI 2	1.30315 (-134)	1.32442 (-426)	1232 (-163)
USS 1	1.30163 (-286)	1.32444 (-423)	1323 (-72)
USS 2	1.30137 (-312)	1.32488 (-379)	1364 (-32)
Modèle	Uranium Naturel avec Dysprosium		
	$k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{vide}}$	$\rho_{\text{CVR}}^{\text{vide}}$ (pcm)
MCNP5	1.25556 (17)	1.26374 (18)	516 (16)
TRIPOLI4	1.25538 (37)	1.26330 (38)	499 (33)
SHI 0	1.24989 (-567)	1.25867 (-507)	559 (43)
SHI 1	1.25049 (-507)	1.25856 (-518)	513 (-3)
SHI 2	1.25411 (-146)	1.25979 (-395)	360 (-156)
USS 1	1.25276 (-280)	1.25970 (-404)	440 (-76)
USS 2	1.25252 (-305)	1.26013 (-361)	482 (-33)

^a σ (pcm),

^b σ_{CVR} (pcm),

^c $\delta k_{\text{eff}} = k_{\text{eff}}^{\text{modèle}} - k_{\text{eff}}^{\text{MCNP5}}$ (pcm),

^d $\delta \rho_{\text{CVR}} = \rho_{\text{CVR}}^{\text{modèle}} - \rho_{\text{CVR}}^{\text{MCNP5}}$ (pcm).

TAB. 8.1 Comparaison des k_{eff} pour une cellule CANDU NG

Dans le Tableau 8.1, on voit clairement que DRAGON sous-estime le k_{eff} quel que soit le modèle d'auto-protection considéré. En ce qui concerne les modèles SHI, en termes de $k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$, on observe les mêmes tendances que pour le benchmark BASALAH : SHI 1 et SHI 2 améliorent de manière notable les résultats par rapport à SHI 0. Par contre dans le cas vidangé cette amélioration est beaucoup moins nette, SHI 1 donne des résultats très proches de SHI 0. Ce qu'il est important de noter, c'est que dans le cas de SHI 2, il y a une dégradation importante de la prédiction du k_{eff} lors de la vidange et par conséquent, ce modèle donne la plus mauvaise prédiction du CVR. Pour les approches par sous-groupes, les k_{eff} sont en erreur de -300 à -350 pcm soit une amélioration de près de 150 pcm en comparaison des modèles SHI 0 et 1. La dégradation des résultats lors de la vidange est limitée pour USS 2, de l'ordre de 50 pcm mais plus importante pour USS 1, de l'ordre de 125 pcm. Par conséquent, le modèle USS 2 prédit très bien le CVR, il est en dedans de $3\sigma_{\text{CVR}}$ tandis que la prédiction de USS 1 est moins bonne, en dedans de $5\sigma_{\text{CVR}}$. Dans ce cadre, USS 2 apparaît comme le modèle le plus performant et a été retenu pour l'étude des cellules en assemblage 2×2 .

Il est important de noter que la présence de Dysprosium n'affecte que peu la performance des divers modèles alors qu'il est crucial pour le CVR. En effet, l'introduction de Dysprosium dans le crayon central réduit le CVR positif d'un facteur de 2.7. À la Fig. 8.3, le taux de capture dans le macro-groupe 3 est représenté pour les diverses régions de combustible $i - j$ où est i indique l'anneau dans les crayons et j la couronne de crayons considérés. On voit clairement l'absorption induite par les isotopes du Dysprosium dans le crayon central. Ce qui est intéressant c'est que cette absorption augmente largement lorsque la cellule est vidangée ce qui explique le rôle du Dysprosium dans la diminution du CVR.

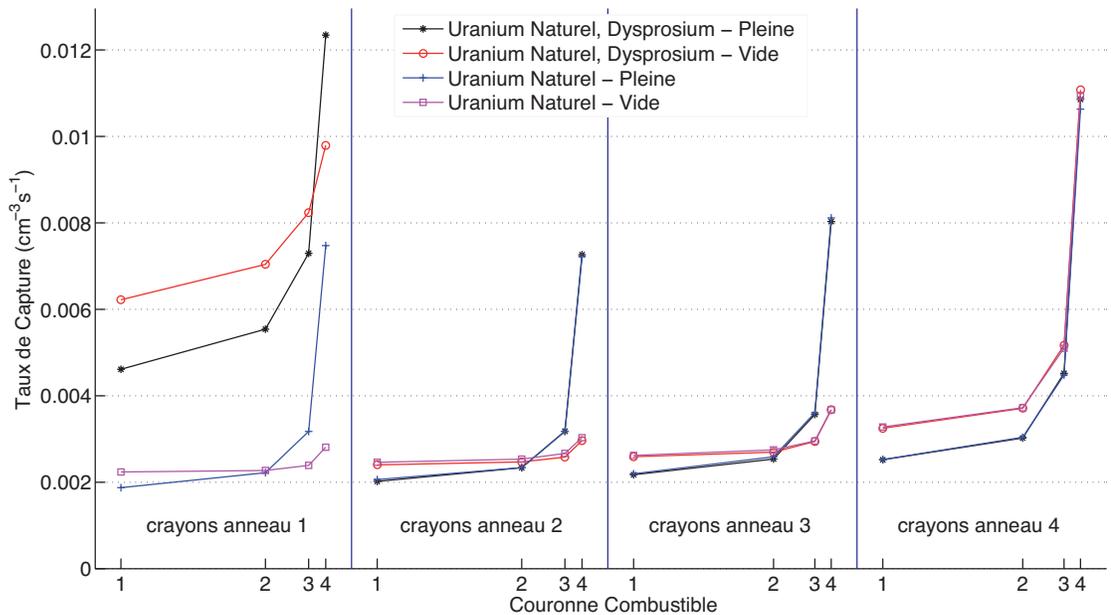


FIG. 8.3 Taux de capture dans le macro-groupe 3 pour une cellule CANDU NG

On s'intéresse ensuite à comparer les divers modèles d'auto-protection de DRAGON vis à vis de MCNP5 en termes du taux de capture radiatif dans le macro-groupe 3 pour le cas avec Dysprosium dans le crayon central. Au Tableau 8.2, la cellule pleine est présentée tandis que la cellule sans caloporteur est présentée au Tableau 8.3. Les taux de réaction sont par unité de volume, en $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. L'écart type de MCNP5 sur ces taux de réaction varie d'environ 0.05% dans la partie centrale à 0.2 % dans la couronne externe des crayons.

Dans le cas de la cellule pleine, on voit clairement que les modèles basés sur une équivalence en dilution sous-estime l'effet de peau et au final surestime l'absorption résonnante dans les crayons. Les méthodes de sous-groupes donnent de meilleurs résultats mais il faut tout de même noter une surestimation du taux de capture dans le crayon central. La difficulté d'un tel assemblage est qu'avec la présence de Dysprosium, le taux de capture est bien plus important dans le crayon central en

comparaison des crayons périphériques.

Région Combustible	Taux MCNP5	ϵ (%)				
		SHI 0	SHI 1	SHI 2	USS 2	USS 1
1-1	4.6127e-03	18.30	6.59	9.25	5.18	5.40
1-2	5.5395e-03	8.88	2.79	5.42	3.05	2.99
1-3	7.2948e-03	-10.41	-2.11	2.51	1.37	1.04
1-4	1.2344e-02	-44.13	-1.93	-1.23	0.00	0.02
2-1	2.0176e-03	28.95	7.98	4.90	1.91	2.34
2-2	2.3350e-03	18.73	5.59	2.32	1.22	1.15
2-3	3.1801e-03	-8.25	0.20	-0.87	0.58	0.04
2-4	7.2628e-03	-58.51	-22.89	-17.16	-2.62	-2.57
3-1	2.1742e-03	29.85	9.53	6.10	2.15	2.50
3-2	2.5368e-03	17.60	7.66	3.80	1.25	1.10
3-3	3.5682e-03	-12.69	1.50	1.91	0.09	-0.58
3-4	8.0317e-03	-60.09	-19.67	-13.73	-3.49	-3.25
4-1	2.5182e-03	29.16	9.64	5.06	1.29	1.47
4-2	3.0229e-03	14.13	8.37	3.12	0.94	0.41
4-3	4.5187e-03	-20.13	2.01	1.87	0.44	-0.65
4-4	1.0857e-02	-65.80	-15.37	-11.01	-0.83	-0.70

TAB. 8.2 Comparaison DRAGON - MCNP5 pour les taux de capture dans le macro-groupe 3 (cellule pleine avec Dysprosium dans le crayon central)

Lorsque la cellule est vidée, comme on l'a vu à la Fig. 8.3, l'effet de peau est atténué dans le crayon central ainsi que dans les anneaux 2 et 3 de crayons tandis qu'il reste très prononcé pour les crayons proches du modérateur. Cela rend la tâche plus difficile pour l'auto-protection des résonances et on observe une dégradation systématique des résultats, à l'exception notable de SHI 0 qui de tout manière ne traite pas la distribution spatiale des effets d'auto-protection. Ceci est cohérent

avec les résultats en termes de k_{eff} ; en effet, SHI 0 est le seul modèle dont la prédiction du k_{eff} est meilleure lorsque la cellule est vidangée. Dans les anneaux 2 et 3, tous les modèles surestiment le taux de capture; les modèles USS surestiment assez notablement l'effet de peau dans ces crayons. Dans l'anneau 4, l'effet de peau est sévère et l'erreur dans la couronne extérieure des crayons augmente; elle passe de moins de 1 % à plus de 5 % avec les méthodes des sous-groupes. Il n'y a que dans le crayon central où la situation est améliorée lorsque la cellule est vidangée car l'effet de peau y est diminué.

Région Combustible	Taux MCNP5	ϵ (%)				
		SHI 0	SHI 1	SHI 2	USS 2	USS 1
1-1	6.2208e-03	9.19	2.49	5.93	3.61	3.79
1-2	7.0400e-03	3.16	-0.32	3.94	1.26	1.37
1-3	8.2389e-03	-6.87	-3.25	0.44	-0.76	-0.73
1-4	9.7927e-03	-18.72	7.17	3.76	0.05	0.22
2-1	2.4022e-03	15.14	5.23	4.23	1.66	2.24
2-2	2.4713e-03	14.12	2.60	1.58	2.23	2.74
2-3	2.5813e-03	10.81	10.01	10.86	4.52	4.94
2-4	2.9633e-03	-2.68	5.09	8.45	15.36	15.62
3-1	2.5898e-03	17.19	6.82	7.16	1.63	2.17
3-2	2.6958e-03	14.80	3.62	2.72	1.89	2.33
3-3	2.9404e-03	6.75	9.88	8.82	2.45	2.74
3-4	3.6744e-03	-13.74	-1.88	2.58	9.35	9.83
4-1	3.2472e-03	15.16	7.23	4.62	0.54	0.84
4-2	3.7094e-03	4.37	5.24	1.43	0.40	0.19
4-3	5.1698e-03	-23.18	-0.44	1.85	-2.06	-2.77
4-4	1.1074e-02	-63.58	-26.58	-22.39	-5.27	-5.07

TAB. 8.3 Comparaison DRAGON - MCNP5 pour les taux de capture dans le macro-groupe 3 (cellule vide avec Dysprosium dans le crayon central)

Au final, USS 2 est le modèle qui donne les meilleurs résultats. On voit bien avec cette étude détaillée du taux de capture résonnante que ce type d'assemblages présente de grandes difficultés pour les méthodes d'auto-protection de par une distribution spatiale très hétérogène des effets. Au final, ces difficultés s'avèrent plus difficiles à affronter que les effets d'auto-protection mutuelle des benchmarks BASALA. Encore une fois, il est fort possible que le maillage énergétique XMAS participe grandement à ces difficultés de représentation des effets d'auto-protection des résonances.

8.3 Résultats pour un assemblage de 2×2 cellules

On présente au Tableau 8.4 les résultats pour l'assemblage en termes du k_{eff} et du CVR pour MCNP5, TRIPOLI4 et le modèle USS 2 de DRAGON. Les trois états de la cellule sont présentés : cellule pleine, cellule vide et cellule vidangée en échiquier. Deux réactivités du vide sont calculées, une pour la cellule vidée totalement, l'autre pour la vidange en échiquier.

D'abord, dans les cas complètement plein ou vide, on voit que les k_{eff} sont totalement cohérents avec les résultats sur une seule cellule. Quand les quatre cellules de l'assemblage sont pleines (resp. vidées), on a un écart d'environ 15 pcm (resp. 40 pcm) avec le cas à une cellule du Tableau 8.1. Il est intéressant de remarquer que ces écarts sont à peu près la moitié de ceux obtenus par comparaison de calculs MCNP5 sur une cellule avec des conditions aux limites isotropes ou spéculaires. Ceci est cohérent dans la mesure où chacune des cellules d'un assemblage 2×2 a deux surfaces sur quatre pour lesquelles les conditions aux limites approchées sont utilisées.

Pour ce qui est du cas de vidange en échiquier, les performances de DRAGON sont

très proches de celles du cas plein et par conséquent, la prédiction du CVR est très bonne, de l'ordre d'un écart type du calcul MCNP5.

Modèle	Uranium Naturel			
	$k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{vide}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{chb } a}$	$\rho_{\text{CVR}}^{\text{vide}}$ (pcm) $\rho_{\text{CVR}}^{\text{chb}}$ (pcm)
MCNP5	1.30480 (16)	1.32967 (17)	1.32497 (16)	1433 (13) 1167 (13)
TRIPOLI4	1.30368 (39)	1.32788 (38)	1.32411 (38)	1398 (31) 1184 (32)
USS 2	1.30150 (-330)	1.32532 (-435)	1.32148 (-349)	1381(-53) 1162 (-5)
Modèle	Uranium Naturel avec Dysprosium			
	$k_{\text{eff}}^{\text{pleine}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{vide}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{chb}}$	$\rho_{\text{CVR}}^{\text{vide}}$ (pcm) $\rho_{\text{CVR}}^{\text{chb}}$ (pcm)
MCNP5	1.25609 (17)	1.26494 (18)	1.26774 (18)	557 (16) 732 (16)
TRIPOLI4	1.25530 (37)	1.26297 (39)	1.26660 (37)	484 (34) 711 (33)
USS 2	1.25265 (-344)	1.26051 (-443)	1.26395 (-379)	498 (-59) 713 (-18)

^a «chb» est utilisé pour faire référence au cas de vidange en échiquier.

TAB. 8.4 Comparaison des k_{eff} pour un assemblage 2×2 de cellules CANDU NG

On observe bien par ces calculs le phénomène physique reporté dans [Cotton et al., 2005] : le CVR est plus important dans le cas d'une vidange en échiquier que dans le cas d'une vidange complète du caloporteur. Dans le cas d'une vidange en échiquier,

le libre parcours moyen des neutrons dans les cellules vides augmente et on a ainsi plus de neutrons rapides qui échappent à une absorption résonnante et passent des cellules vides aux cellules pleines où ils se thermalisent dans le modérateur. Ces neutrons thermiques ont ensuite tendance à aller vers les cellules vides. Ces phénomènes conduisent à une réactivité plus importante que dans le cas d'une vidange totale.

8.4 Temps de calcul et efficacité des méthodes d'accélération

On s'intéresse ici aux performances des méthodes d'accélération dans le cadre de l'auto-protection des résonances par une méthode de sous-groupes avec MOC. On compare ici MOC avec différentes options d'accélération et la méthode CP avec intégration vectorielle des probabilités de collision. Pour *ACA*, la version Two-step *ACA* est utilisée dans tous ces tests.

On présente d'abord les résultats sur une cellule avec caloporteur sans Dysprosium dans le crayon central. Cette géométrie compte 44 régions. Il faut noter que ce nombre de régions est largement réduit à cause du regroupement des crayons de combustible par anneau pour cette géométrie cluster. Les Tableaux 8.5 et 8.6 correspondent respectivement aux modèles d'auto-protection USS 2 et USS 1. D'un point de vue des méthodes d'accélération, les deux cas se comportent de la même manière. Avec les itérations de Richardson, *ACA* donne une accélération d'environ 1.8 et est meilleure que *SCR*. En ce qui concerne les méthodes de Krylov, *GMRES* donne de meilleurs résultats que Bi-CGSTAB, légèrement meilleurs que *ACA* seule dans ce cas. Dans le cas de USS 2, la combinaison de *ACA* avec *GMRES* n'est pas efficace, le nombre d'intégrations du flux est bien diminué mais le temps total est comparable à celui de *GMRES* seule. Par contre, dans le cas de USS 1, cette combinaison apporte une légère amélioration. Dans les deux cas, la meilleure option est la

combinaison de GMRES et SCR qui fournit une accélération de 1.87 et 2.17 pour USS 2 et USS 1 respectivement. Dans ce contexte avec peu de régions, les bonnes performances de SCR associée à son très faible coût en font un bon préconditionnement pour GMRES.

KRYL	paramètres		N_{calc}^a	t^b (s.)
	ACA	SCR		
-	-	-	39810	4.098
-	✓	-	21503	2.327
-	-	✓	22972	2.382
GMRES	-	-	19713	2.305
BICGSTAB	-	-	24541	2.766
GMRES	✓	-	18370	2.310
GMRES	-	✓	18352	2.191

^a nombre total d'intégrations de flux par MOC,

^b temps CPU normalisé passé dans le module d'autoprotection, la référence est le temps avec CP (419 s).

TAB. 8.5 Auto-protection USS 2 sur une cellule CANDU NG

Si l'on observe le temps CPU pour cette combinaison optimale avec MOC en comparaison de CP, on voit que la résolution par matrice de réponse des équations de sous-groupes pour USS 1 (telle que discutée à l'Annexe I) pénalise largement MOC (et en fait toute autre méthode que CP) en comparaison de l'approche itérative de USS 2. Entre USS1 et USS 2, le nombre d'intégrations du flux est multiplié par 6.9 et le temps par 4.3. Clairement, la méthode USS 1 d'auto-protection doit être limitée à CP. Pour USS 2, MOC est au final 2.2 fois plus lente que CP. En comparaison du Chapitre 7, la moins bonne performance de MOC dans ce contexte d'auto-

protection s'explique à la fois par une efficacité réduite des méthodes d'accélération et par le regroupement des crayons combustibles par anneaux qui avantage largement CP.

paramètres			N_{calc}	t^a (s.)
KRYL	ACA	SCR		
-	-	-	314068	20.382
-	✓	-	167153	10.969
-	-	✓	218892	14.316
GMRES	-	-	139012	10.316
BICGSTAB	-	-	170335	12.475
GMRES	✓	-	130940	9.746
GMRES	-	✓	126753	9.385

^a la référence est le temps avec CP (421 s).

TAB. 8.6 Auto-protection USS 1 sur une cellule CANDU NG

On s'intéresse ensuite au cas d'un assemblage 2×2 de cellules sans Dysprosium dans le crayon central avec vidange en échiquier. Cette fois, on a 176 régions et 8 surfaces externes pour cette géométrie non discrétisée. Les résultats avec le modèle USS 2 sont reportés au Tableau 8.7. En termes des performances des différentes accélérations, on retrouve les conclusions du cas précédent si ce n'est qu'au final, en termes de la réduction du nombre d'intégrations du flux, GMRES préconditionnée par ACA est la meilleure combinaison tandis qu'en temps de calcul, GMRES avec SCR est légèrement meilleure. Au final, le surcoût en temps de calcul de MOC dans ce cas n'est que de 14 % en comparaison de CP. Bien évidemment, dans ce contexte d'auto-protection avec USS 2, si le nombre de régions augmente, MOC est très vite performante en comparaison de CP. Notons que par ailleurs, ces calculs MOC

ont été menés avec la première stratégie d'intégration présentée à l'Annexe IV avec un traitement asymptotique. En utilisant la seconde approche sans traitement asymptotique, dans le cas de l'assemblage 2×2 , le temps normalisé pour GMRES combinée avec SCR est comparable au temps CP.

KRYL	paramètres		N_{calc}	t^a (s.)
	ACA	SCR		
-	-	-	44455	2.129
-	✓	-	24590	1.230
-	-	✓	27893	1.314
GMRES	-	-	22622	1.206
BICGSTAB	-	-	25678	1.349
GMRES	✓	-	20153	1.145
GMRES	-	✓	21135	1.137

^a la référence est le temps avec CP (2360 s).

TAB. 8.7 Auto-protection USS 2 sur un assemblage de 2×2 cellules CANDU NG

CHAPITRE 9

BENCHMARK PWR

On s'intéresse dans ce chapitre au benchmark PWR. Comme on l'a mentionné au Chapitre 6, cette étude est orientée vers la définition d'un schéma de calcul à vocation industrielle pour ce type d'assemblages basé sur MOC. En ce sens, certaines simplifications sont faites. Ce chapitre est largement inspiré de l'expérience de travail acquise au cours du stage réalisé au sein du CEA Cadarache pour les benchmarks BASALA du Chapitre 7; en ce sens, la démarche est comparable à celle exposée dans [Bernard et al., 2006] pour la validation d'un schéma pour le calcul d'assemblages de réacteurs à eau légère avec le code APOLLO2.

Pour diminuer le coût de l'auto-protection, comme on l'a déjà évoqué partiellement au Chapitre 7, différentes idées peuvent être retenues de [Santamarina et al., 2004] :

- utiliser une méthode à courants d'interfaces comme solveur et faire des regroupements de cellules ;
- grouper les mélanges résonnants par cellules et par anneaux à l'intérieur d'un crayon pour les isotopes autres que ^{238}U (pour lesquels l'effet de distribution spatial de l'auto-protection est moins important).

Pour l'auto-protection, on a utilisé le modèle USS 2 avec comme solveur, la méthode UP_1 basée sur des courants uniformes, représentés angulairement par une expansion DP_1 .

Par ailleurs, en ce qui concerne le calcul multigroupe de flux, une idée intéressante pour diminuer le coût de calcul est d'utiliser un schéma à deux niveaux comme discuté dans [Santamarina et al., 2006]. Il s'agit de faire un calcul à 172 groupes avec un opérateur simplifié, la méthode UP_1 , de manière à obtenir un flux pour

condenser les sections efficaces sur une structure énergétique à moins de groupes. Le calcul MOC est alors réalisé avec ce nombre restreint de groupes. Pour ce projet, on a utilisé le maillage à 20 groupes de [Santamarina et al., 2004] étant donné que l'on considère uniquement de l'oxyde d'Uranium comme combustible ; pour un combustible MOX, le maillage 26 groupes introduit dans [Santamarina et al., 2006] serait préférable.

9.1 Notations et configurations

On considère comme point de départ l'assemblage PWR représenté à la Fig. 9.1 avec 20 milieux matériels différents pour le combustible.

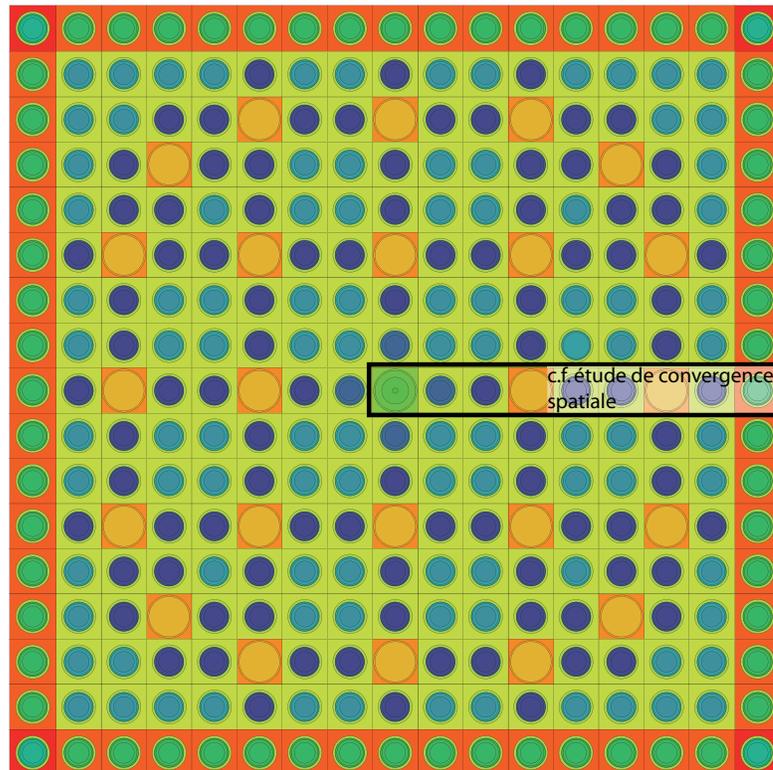


FIG. 9.1 Les mélanges dans l'assemblage PWR

On a différencié les mélanges de combustible selon la position des cellules par rapport aux tubes guide et d'instrumentation et aux frontières de l'assemblage. Cette différenciation est importante lorsque l'on considère une évolution du combustible [Santamarina et al., 2004] et a été gardée ici pour ce benchmark à burnup nul.

Pour le calcul UP_1 , il est commun pour réduire le temps de calcul de regrouper les cellules en considérant qu'elle partage le même flux. Dans cette étude on a utilisé des regroupements à 8 et 12 cellules, notés respectivement \mathcal{R}_8 et \mathcal{R}_{12} et présentés à la Fig. 9.2. Ces regroupements sont faits selon la position «face/angle» des cellules par rapport aux tubes guide et d'instrumentation; l'orientation des cellules regroupées est choisie de manière cohérente avec les regroupements.

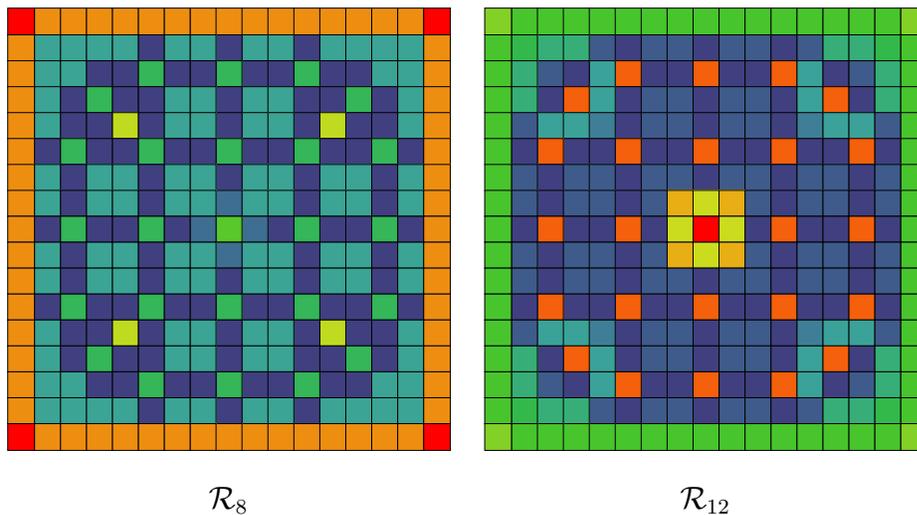


FIG. 9.2 Différents regroupements pour l'assemblage PWR

Avec ce combustible UOX, les isotopes à auto-protéger sont 1^{235}U , 1^{238}U et le Zr. Pour l'auto-protection, on a utilisé les configurations de regroupements \mathcal{R}_{12} et \mathcal{R}_8 . Par ailleurs, dans ce cadre, il est aussi commun de regrouper les mélanges résonnants; on a donc testé deux configurations à partir de \mathcal{R}_8 :

- \mathcal{R}_8^+ : les mélanges résonnants sont regroupés en un seul mélange pour 1^{235}U et le

Zr ; on a donc vingt mélanges résonnants pour l' ^{238}U et un pour l' ^{235}U et le Zr.

- \mathcal{R}_8^{++} : en plus de grouper les mélanges résonnants pour l' ^{235}U et le Zr en un seul, les mélanges pour l' ^{238}U sont groupés entre toutes les cellules mais en gardant une distinction entre les quatre anneaux par crayon ; on a donc quatre mélanges résonnants pour l' ^{238}U et un pour l' ^{235}U et le Zr.

En ce qui concerne le calcul de flux avec MOC, les différentes discrétisations utilisées sont présentées à la Fig. 9.3.

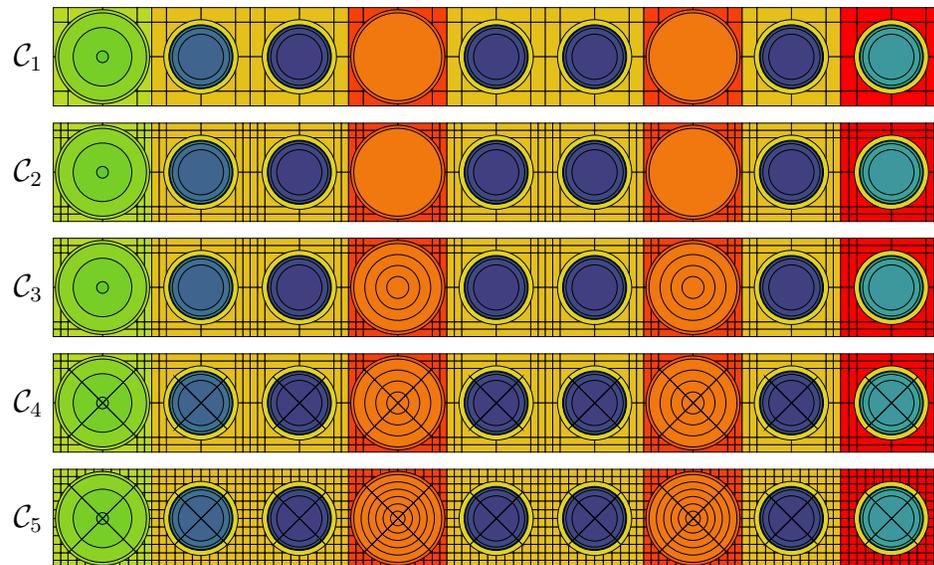


FIG. 9.3 Différentes discrétisations de la géométrie PWR

Pour l'étude paramétrique, on présente ici une forme condensée où l'on a fait varier à la fois la discrétisation et les paramètres de tracking. On a considéré à la fois un tracking cyclique et un tracking non-cyclique sur le 1/8 d'assemblage avec N_a angles $\in [0, \pi/2]$, une densité uniforme de $d \text{ cm}^{-1}$ et une quadrature polaire de type OP_0 à N_p angles.

Pour la condensation des taux de réaction pour la comparaison avec TRIPOLI4, on a utilisé une structure à quatre groupes qui diffère de celle présentée au Chapitre 6

afin d'avoir un découpage compatible à la fois avec le maillage XMAS à 172 groupes et le maillage à 20 groupes utilisé pour le schéma à deux niveaux. Cette structure est présentée au Tableau 9.1.

groupe	intervalle d'énergie (eV)
1]4.5049.10 ⁵ [
2]1.5073.10 ³ 4.5049.10 ⁵ [
3]3.3807 1.5073.10 ³ [
4] 3.3807[

TAB. 9.1 Macro-groupes d'énergie pour la condensation

Les calculs TRIPOLI4 ont été menés avec 20 millions d'historiques par paquet de 1000 neutrons. L'écart-type sur le k_{eff} est de 25 pcm tandis que pour les taux de réaction auxquels on s'est intéressé, il est de l'ordre de 0.1 % dans le groupe 4, 0.2 % dans les groupes 2 et 3 et 0.05 % dans le groupe 1.

Tout au long de ce chapitre, les temps CPU sont donnés pour les différentes étapes du calcul de manière à pouvoir comparer l'importance de chacune dans le coût total.

9.2 Schéma à un niveau

On s'intéresse en premier lieu à un calcul MOC direct à 172 groupes.

9.2.1 Étude paramétrique

On détaille ici le choix de la configuration géométrique et des paramètres de tracking, du traitement de l'anisotropie ainsi que l'option de regroupement pour l'auto-protection retenue.

Tout d'abord, au Tableau 9.2, on présente l'étude paramétrique du traitement de la géométrie avec une procédure de tracking cyclique.

Conf. ($N_a - d - N_p$)	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon}$ (ϵ_{max}) (%)			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
\mathcal{C}_5 (24 - 25 - 2)	-11.8	0.01 (-0.03)	0.02 (0.03)	0.00 (-0.01)	0.12 (-0.12)
\mathcal{C}_4 (24 - 25 - 2)	10.7	0.03 (0.04)	0.03 (0.03)	0.01 (-0.01)	0.12 (-0.12)
\mathcal{C}_4 (20 - 25 - 2)	10.2	0.03 (0.04)	0.03 (0.05)	0.01 (-0.01)	0.23 (-0.24)
\mathcal{C}_3 (20 - 25 - 2)	4.1	0.04 (0.07)	0.04 (0.05)	0.01 (-0.01)	0.23 (-0.25)
\mathcal{C}_2 (20 - 10 - 2)	5.6	0.04 (0.08)	0.05 (0.11)	0.01 (-0.02)	0.23 (-0.25)
\mathcal{C}_1 (20 - 10 - 2)	14.1	0.05 (0.10)	0.05 (0.11)	0.01 (-0.02)	0.23 (-0.25)
\mathcal{C}_1 (12 - 10 - 2)	-23.7	0.05 (0.12)	0.12 (0.15)	0.00 (-0.00)	0.68 (-0.74)

La référence est la configuration \mathcal{C}_5 avec $N_a = 24$, $d = 100.0 \text{ cm}^{-1}$ et $N_p = 3$.

TAB. 9.2 Effet de la discrétisation spatiale et des paramètres de tracking

En comparaison des cas BWR-MOX du Chapitre 7, on voit bien que l'on peut

largement relâcher les divers paramètres pour le traitement d'un tel assemblage sans une perte importante de précision. Le paramètre qui influence le plus les résultats dans ce cas est le nombre d'angles cycliques azimuthaux. On voit que lorsque N_a passe à 12, l'erreur dans le groupe rapide augmente largement. Par la suite, la configuration \mathcal{C}_1 avec $N_a = 20$, $d = 10.0 \text{ cm}^{-1}$ et $N_p = 2$ a été retenue et est notée $\mathcal{C}_{\text{spec}}$. Le tracking de cette configuration prend environ 8 s.

Par ailleurs, sur cette géométrie, on peut s'interroger sur la nécessité d'utiliser des conditions de réflexion spéculaire avec un tracking cyclique. En ce sens, au Tableau 9.3, on reprend une partie de cette étude paramétrique en utilisant un tracking non-cyclique sur la géométrie de l'assemblage avec des conditions blanches aux frontières en faisant varier le nombre d'angles azimuthaux et la densité; par ailleurs, la configuration géométrique \mathcal{C}_1 et $N_p = 2$ angles polaires sont utilisés. On voit qu'avec $N_a = 20$ et $d = 10.0 \text{ cm}^{-1}$, on obtient des résultats comparables à la configuration cyclique précédente. Au vu des performances, cette configuration a aussi été conservée pour la suite étant donné qu'elle permet de réduire de manière notable le temps de calcul (c.f. § 9.4). Cette configuration, notée \mathcal{C}_{iso} , présente un temps de tracking d'environ 4 s.

N_a	d	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$							
			Fission gr. 4		Capture gr. 3		Capture gr. 2		Totale gr. 1	
40	20	33.8	0.04	(-0.13)	0.03	(0.07)	0.03	(0.19)	0.06	(0.11)
40	10	33.1	0.04	(-0.16)	0.04	(0.06)	0.03	(0.20)	0.06	(0.13)
20	10	19.1	0.04	(-0.09)	0.05	(0.14)	0.03	(0.22)	0.22	(-0.25)
12	10	1.6	0.05	(0.11)	0.06	(0.17)	0.04	(0.29)	0.53	(-1.08)

La référence est la même qu'au Tableau 9.2.

TAB. 9.3 Utilisation d'un tracking non-cyclique

Ensuite, on a testé l'influence du traitement de l'anisotropie sur ce benchmark. La configuration $\mathcal{C}_{\text{spec}}$ a été utilisée et les résultats sont reportés au Tableau 9.4. Comme on le voit, l'anisotropie de la diffusion pour un tel assemblage est très bien représentée par une expansion P_1 ; le cas P_2 qui n'est pas présenté ne donne aucune déviation par rapport à P_3 à 0.1 pcm près sur le k_{eff} et 0.01 % sur les divers taux de réaction considérés. On voit aussi très bien que la correction de transport APOLLO avec un traitement isotrope de la diffusion est adéquat dans l'optique d'une schéma industriel ; cette option a été retenue par la suite étant donnée qu'elle est la moins coûteuse. En tant que telle, elle représente un gain d'environ 20% dans le temps de calcul de flux par rapport à la configuration P_1 . Par ailleurs, étant donné le traitement des symétries au sein des modules de tracking de DRAGON, un traitement anisotrope ne peut être fait que sur la géométrie de l'assemblage complet ce qui alourdit considérablement le temps de calcul (par un facteur de 2.5 environ).

Ordre	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon}$ (ϵ_{max}) (%)			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
P_0	-135.8	0.37 (-0.60)	0.15 (0.73)	0.20 (0.60)	0.08 (0.14)
P_0^*	-17.4	0.02 (0.13)	0.13 (-0.23)	0.06 (0.12)	0.18 (-0.20)
P_1	-0.1	0.00 (-0.00)	0.00 (0.00)	0.00 (0.00)	0.00 (0.00)

La référence est la configuration P_3 .

TAB. 9.4 Effet de l'ordre d'expansion P_L du terme de diffusion

Pour conclure cette étude paramétrique sur le schéma à un niveau, on s'est intéressé à l'impact des regroupements, à la fois en termes de régions mais aussi de mélanges résonnants pour l'auto-protection des résonances avec le solveur UP_1 . Les configurations \mathcal{R}_8 , \mathcal{R}_8^+ , \mathcal{R}_8^{++} sont comparées à \mathcal{R}_{12} au Tableau 9.5. On observe, de manière logique, que l'effet de ces regroupements est limité à la zone énergétique

des résonances. On se rend compte que dans ce cas, seul le regroupement des mélanges résonnants pour l' ^{238}U a un effet notable; pour la suite, on l'a évité et conservé la configuration \mathcal{R}_8^+ . De toute manière, le temps de création de la librairie interne et du calcul d'auto-protection est faible, d'environ 5 s. et est peu affecté par ces regroupements supplémentaires.

Conf.	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$							
		Fission gr. 4		Capture gr. 3		Capture gr. 2		Totale gr. 1	
\mathcal{R}_8	3.5	0.00	(0.00)	0.04	(0.12)	0.01	(0.02)	0.00	(-0.00)
\mathcal{R}_8^+	3.8	0.00	(0.00)	0.04	(0.12)	0.01	(0.03)	0.00	(-0.00)
\mathcal{R}_8^{++}	1.2	0.02	(-0.05)	0.74	(-1.12)	0.18	(-0.26)	0.01	(-0.02)

La référence est la configuration \mathcal{R}_{12} .

TAB. 9.5 Effet des regroupements des mélanges résonnants

9.2.2 Comparaison avec TRIPOLI4

La comparaison avec TRIPOLI4 des deux configurations retenues à l'issue de cette étude paramétrique est présentée au Tableau 9.6. On voit que ces deux configurations permettent d'avoir des résultats d'une précision comparable à celle obtenue sur le benchmark BASALA-H du Chapitre 7. Clairement, que ce soit en termes d'effets d'auto-protection ou de gradients spatiaux de flux, ce type d'assemblages PWR ne présente pas de difficultés majeures et la méthode des caractéristiques permet d'obtenir de bons résultats avec un maillage spatial relativement grossier.

Conf.	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
$\mathcal{C}_{\text{spec}}$	55	0.09 (-0.28)	0.35 (-1.25)	0.17 (-0.47)	0.14 (0.33)
\mathcal{C}_{iso}	52	0.10 (-0.56)	0.37 (-1.21)	0.18 (-0.47)	0.14 (0.50)

Référence TRIPOLI4 : $k_{\text{eff}} = 1.11153$ ($\sigma = 25$ pcm).

TAB. 9.6 Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour le schéma un niveau

9.3 Schéma à deux niveaux

On s'intéresse maintenant au schéma à deux niveaux. Le calcul MOC est donc fait avec les configurations retenues au paragraphe précédent mais sur le maillage énergétique à 20 groupes. Pour ce schéma, on s'intéresse au choix des regroupements pour le calcul de flux de premier niveau avec un méthode UP_1 et la nécessité/intérêt d'utiliser une procédure d'équivalence SPH entre les deux niveaux.

9.3.1 Effet des regroupements pour le calcul de flux du premier niveau

Pour la question des regroupements, les configurations \mathcal{R}_8 , \mathcal{R}_{12} et une configuration sans aucun regroupement ont été testés. Les résultats sont présentés en comparaison du calcul MOC à 172 groupes au Tableau 9.7 pour la configuration $\mathcal{C}_{\text{spec}}$. On voit que l'influence des regroupements est faible. En pratique, avec une approche itérative entre les flux et courants pour la résolution du système de la méthode UP_1 , le temps de calcul pour ce premier niveau de calcul de flux est d'environ 5, 2 et 1 s. pour les configurations sans regroupement, \mathcal{R}_{12} et \mathcal{R}_8 respectivement.

Conf.	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$							
		Fission gr. 4		Capture gr. 3		Capture gr. 2		Totale gr. 1	
-	-62.4	0.08	(-0.11)	0.30	(0.80)	0.00	(-0.01)	0.01	(0.02)
\mathcal{R}_{12}	-62.8	0.08	(-0.11)	0.33	(0.86)	0.00	(0.01)	0.01	(0.02)
\mathcal{R}_8	-58.8	0.07	(-0.11)	0.34	(0.89)	0.00	(-0.01)	0.01	(0.02)

La référence est le calcul MOC à 172 gr.

TAB. 9.7 Effet des regroupements pour le calcul de flux

Un désavantage de ces regroupements est qu'ils doivent être repensés pour chaque assemblage différent ; le coût de ce calcul restant faible même sans regroupements, dans les cas où ces regroupements deviennent difficiles à faire (comme dans les assemblages gadoliniés), on peut ne pas les utiliser sans pénaliser largement le coût du schéma. Notons que cela n'est vrai que lorsqu'une approche itérative est utilisée ; sans cela, le coût augmente largement sans regroupements, d'un facteur 30 environ.

Dans la suite de cette étude, on a conservé la configuration \mathcal{R}_8 pour ce premier niveau.

9.3.2 Effet de l'équivalence SPH

Un autre point intéressant d'un tel schéma est l'utilisation d'une équivalence SPH lors de la condensation des sections efficaces macroscopiques de 172 à 20 groupes. Si ce type d'équivalence est considéré comme indispensable lorsqu'une homogénéisation spatiale est faite (comme expliqué dans [Santamarina et al., 2004] pour des calculs S_n), son intérêt lorsque l'on a seulement affaire à une condensation énergétique est moins clair. Par exemple, le maillage 26 groupes de [Santamarina et al., 2006] pour des assemblages BWR-MOX a été introduit en partie pour éviter toute pro-

cédure d'équivalence dans ce processus de condensation.

Les résultats sur cet assemblage PWR présentés au Tableau 9.8 pour la configuration $\mathcal{C}_{\text{spec}}$ confirment que cette équivalence n'est pas efficace dans ce contexte et peut être évitée. Remarquons que si besoin est, cette étape prend 1 s. environ.

	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
sans	-58.8	0.07 (-0.11)	0.34 (0.89)	0.00 (-0.01)	0.01 (0.02)
avec	-53.2	0.34 (-0.61)	0.31 (-0.85)	0.07 (0.14)	0.03 (0.12)

La référence est le calcul MOC à 172 gr.

TAB. 9.8 Effet de l'équivalence SPH

9.3.3 Comparaison avec TRIPOLI4

Finalement, on présente au Tableau 9.9 les résultats des deux configurations avec ce schéma à deux niveaux en comparaison de TRIPOLI4.

Conf.	Δk_{eff} (pcm)	$\bar{\epsilon} (\epsilon_{\text{max}}) (\%)$			
		Fission gr. 4	Capture gr. 3	Capture gr. 2	Totale gr. 1
$\mathcal{C}_{\text{spec}}$	4	0.12 (-0.39)	0.64 (1.73)	0.17 (-0.48)	0.14 (0.35)
\mathcal{C}_{iso}	2	0.14 (-0.65)	0.63 (1.77)	0.18 (-0.46)	0.14 (0.52)

Référence TRIPOLI4 : $k_{\text{eff}} = 1.11153$ ($\sigma = 25$ pcm).

TAB. 9.9 Comparaison DRAGON - TRIPOLI4 pour le schéma deux niveaux

Avec le schéma deux niveaux sans équivalence, on peut considérer que l'on obtient une prédiction du k_{eff} à environ 100 pcm de la référence TRIPOLI4 : en effet, d'une part, on a environ +50 pcm entre le schéma à un niveau et TRIPOLI4 et, d'autre

part, -50 pcm entre le schéma à un niveau et le schéma à deux niveaux. Comme on l'observait déjà aux Tableaux 9.7 et 9.8, la dégradation des taux de réaction avec ce schéma deux niveaux n'est notable que dans le domaine des résonances résolues. Par ailleurs, le taux de fission dans le groupe thermique est comparé par cellule entre DRAGON et TRIPOLI4 à la Fig. 9.10 pour les cellules de combustible du 1/8 d'assemblage. On voit que l'accord entre DRAGON et TRIPOLI4 est très bon : l'erreur maximum sur le taux de fission thermique dans les cellules de combustible est environ 0.4 %.

-0.15	-0.29	-0.05	-	-0.15	-0.27	-	-0.07	0.01
-0.65	-0.22	-0.04	-	-0.12	-0.31	-	-0.04	-0.03
	-0.28	0.04	-0.14	0.01	-0.18	-0.16	-0.08	-0.08
	-0.30	0.08	-0.13	0.02	-0.11	-0.17	-0.07	-0.12
		-0.17	-0.25	-0.08	-0.24	-0.22	-0.11	-0.00
		-0.22	-0.26	-0.07	-0.22	-0.22	-0.08	-0.08
			-	-0.35	-0.39	-	-0.10	-0.15
			-	-0.30	-0.37	-	-0.02	-0.14
				-0.32	-0.34	-0.14	0.13	0.01
				-0.23	-0.34	-0.13	0.15	-0.01
					-	-0.05	-0.01	-0.04
					-	-0.06	-0.02	-0.07
						-0.00	-0.03	-0.10
						0.06	0.04	-0.27
							0.24	-0.04
							0.25	-0.17
								-0.27
								-0.42

TAB. 9.10 Écart relatif sur le taux de fission dans le groupe 4

9.4 Temps de calcul et efficacité des méthodes d'accélération

Pour terminer, on s'intéresse aux performances des méthodes d'accélération pour le calcul de flux avec ces deux schémas. On présente les résultats pour la configuration $\mathcal{C}_{\text{spec}}$ au Tableau 9.11. On voit clairement que ACA est efficace tandis que SCR ne donne aucune accélération. En plus des options d'accélération précédemment citées, on a ajouté ici l'utilisation de ACA dans une phase d'initialisation des flux et courants. Cette dernière option est efficace sur ce benchmark et permet un gain supplémentaire de 10 % par rapport à ACA utilisée seulement comme accélération multigroupe.

	Option d'accélération	temps CPU (s.)			N_{out}^a	N_{track}^b	N_{calc}^c
		ASM	FLU	Total			
20 gr.	-	0	143	143	10	32	630
	SCR	1	142	143	11	31	614
	ACA	5	71	76	5	15	297
	Two-step ACA	2	71	73	5	15	297
	Two-step ACA (Init.)	2	1^d+62	65	4	13	255
172 gr.	-	0	1564	1564	12	41	6866
	Two-step ACA (Init.)	18	28+599	645	4	13	2197

^a N_{out} est le nombre d'itérations externes,

^b N_{track} est le nombre d'accès au tracking,

^c $N_{\text{calc}} = \sum_i N_g^{(i)}$ où $N_g^{(i)}$ est le nombre de groupes traités à l'itération i ,

^d temps d'initialisation avec ACA.

TAB. 9.11 Accélération et temps CPU pour le benchmark PWR

On obtient des facteurs d'accélération de 2.2 et 2.4 avec ACA pour le calcul de flux à 20 et 172 groupes respectivement. Au final, en tenant compte des temps d'auto-protection et de tracking, le schéma à deux niveaux permet de gagner un facteur de $\frac{5 + 8 + 645}{5 + 2 + 8 + 65} \approx 8$ sur le temps de calcul en comparaison du schéma à un niveau sur cette configuration C_{spec} . L'utilisation d'un tracking non-cyclique avec C_{iso} permet de réduire ce temps total à $5 + 2 + 4 + 21 = 32$ s. soit un facteur de réduction supplémentaire de 2.5. Pour la configuration C_{spec} (resp. C_{iso}), le premier niveau, qui comprend l'accès à la librairie, l'auto-protection et le calcul de flux par la méthode UP_1 , représente environ 9 % (resp. 22 %) du temps de calcul total.

Avec ce benchmark PWR, on a un très bel exemple de l'intérêt de l'utilisation de la MOC pour la mise en place de schémas de calcul de réseau à vocation industrielle.

CONCLUSION

Dans ce projet, on s'est attaché à une mise en place efficace de la méthode des caractéristiques au sein de la chaîne de modèles que représente l'étape de calcul de réseau pour la modélisation d'un réacteur nucléaire. Dans ce cadre, l'utilisation de la méthode des caractéristiques a été validée à la fois dans le contexte de résolution de l'équation multigroupe de transport mais aussi de calcul d'auto-protection avec une méthode de sous-groupes.

D'un point de vue logiciel, l'accent des développements a été mis sur une stratégie d'accélération de la méthode des caractéristiques qui puisse s'adapter aux divers contextes dans une gamme assez large de configurations à traiter. Pour ce faire, deux approches complémentaires ont été utilisées :

- Le préconditionnement des itérations par une méthode synthétique.
La méthode «Algebraic Collapsing Acceleration» a été implémentée et testée. Une dérivation rigoureuse et une étude spectrale de cette méthode ont permis d'en proposer une version améliorée. Par ailleurs, un grand soin a été apporté à la mise en place d'une stratégie efficace de résolution du système correctif associé. Cette approche s'est montrée efficace dans le contexte du préconditionnement des itérations multigroupes.
- L'utilisation d'une méthode de Krylov pour mener à bien les itérations.
La faisabilité de l'implantation d'un solveur tel que GMRES dans le cadre de la méthode des caractéristiques a été démontrée. Les tests dans le contexte de l'auto-protection où les hétérogénéités spatiales sont importantes ont prouvé l'intérêt d'une telle approche et ont confirmé le choix de GMRES en comparaison d'une méthode à récurrence courte telle que Bi-CGSTAB.

De plus, en marge de ces développements, diverses questions soulevées par la méthode des caractéristiques ont été abordées :

- la question des contraintes à appliquer à la procédure d'intégration numérique pour garantir la conservation des particules ; en particulier, lorsque la diffusion est anisotrope, des conditions nécessaires et suffisantes pour la quadrature de l'angle solide ont été dérivées ;
- la question du schéma d'intégration spatiale ; la problématique liée au formalisme d'intégration a été clairement exposée et trois schémas conservatifs dont un schéma nouvellement introduit dans ce travail ont été comparés sur des cas allant du problème 1D analytique au calcul multigroupe d'un assemblage réaliste ;
- la question de la stratégie d'intégration et la nécessité ou non d'un traitement asymptotique pour les faibles épaisseurs optiques ; ainsi, deux stratégies optimales ont été proposées, l'une avec ce traitement asymptotique par développements limités, l'autre sans. Au final, ce traitement asymptotique n'apparaît pas requis dans les cas pratiques.

L'ensemble de ces développements logiciels a été réalisé au sein du logiciel DRAGON et ont fait l'objet d'une procédure de validation par comparaison avec un code de calcul Monte-Carlo sur trois benchmarks. Deux études ont été menées en conjonction avec la validation de nouveaux modèles d'auto-protection dans le code DRAGON :

- Le cas d'assemblages BWR-MOX issus du programme expérimental BASALA a permis de montrer la capacité de la méthode des caractéristiques telle qu'implantée dans DRAGON à traiter des cas avec un grand nombre de régions. Par ailleurs, l'importance d'un modèle d'auto-protection pouvant représenter les effets de recouvrements des résonances a été soulignée dans ces cas avec du combustible MOX. L'utilisation de la méthode des caractéristiques s'est aussi révélée intéressante pour l'auto-protection avec une approche itérative de résolution des équations de sous-groupe ; dans ce cas, elle est deux fois plus rapide que la méthode des probabilités de collision.
- Le cas d'une cellule et d'un assemblage 2×2 de cellules CANDU NG a per-

mis la comparaison des différents modèles d'auto-protection pour l'estimation de la réactivité du vide pour différentes configurations de vidange. Pour l'auto-protection avec une méthode itérative de sous-groupes, la méthode des caractéristiques s'est montrée plus lente que la méthode des probabilités de collision sur le cas à une cellule et comparable sur le cas de l'assemblage. Ensuite, avec une approche par matrice de réponse telle qu'utilisée avec la méthode d'auto-protection de Ribon étendue, l'importante pénalisation que ce formalisme entraîne rend l'utilisation de la méthode des caractéristiques peu intéressante en pratique.

Une dernière étude de validation a été menée sur un assemblage PWR caractéristique des réacteurs commerciaux en fonctionnement. Cette fois, la validation a été orientée vers la mise en place d'un schéma de calculs à vocation industrielle. En ce sens, en plus de l'étude paramétrique telle présentée pour le cas BWR-MOX, on s'est intéressé ici à un schéma à deux niveaux où la méthode des caractéristiques est utilisée pour un calcul multigroupe de flux avec un nombre restreint de groupes suite à une condensation des propriétés de l'assemblage à l'aide d'un flux de pondération obtenu par un calcul avec une méthode de courants d'interfaces. Grâce à cette approche, en conjonction avec le préconditionnement multigroupe, on a mis en place un schéma de calcul précis à un coût faible qui pourrait directement être utilisé par l'industrie nucléaire pour le calcul d'assemblages PWR.

EXTENSIONS ET DÉVELOPPEMENTS FUTURS

Par delà la procédure de validation reportée dans ce document, cette implantation de la méthode des caractéristiques a aussi été étendue à des géométries 3D et a permis une étude concernant la modélisation des mécanismes de réactivité dans un réacteur CANDU par le biais de calculs de *supercellule*. Une supercellule consiste en une géométrie 3D qui représente deux grappes de combustible avec le mécanisme de réactivité inséré perpendiculairement entre les grappes. L'introduction du module NXT a permis le traitement exact de cette géométrie 3D et dans [Le Tellier et al., 2006], une étude préliminaire sur l'utilisation de la méthode des caractéristiques telle qu'implantée dans ce projet pour ce type de calculs a été menée. Pour compléter ce travail, une étude paramétrique complète de la discrétisation de la géométrie et des paramètres de tracking reste à faire.

Ensuite, pendant l'écriture de ce manuscrit, une première version d'une extension de la méthode des caractéristiques à des géométries 3D prismatiques a été mise en place. Il s'agit de traiter ce genre de géométries à l'aide d'une procédure de tracking qui reconstruit les lignes d'intégration 3D à partir de lignes d'intégration générées à l'avance dans le plan de l'assemblage et permet de diminuer le coût. Dans le contexte du développement du ACR, certaines propositions de géométrie permettent l'utilisation d'une telle modélisation contrairement au CANDU-6 traditionnel. Dans la même veine, ce genre de calculs 3D peut être accéléré en apportant certaines modifications au solveur. Une gamme intéressante de méthodes consiste à utiliser une méthode S_N en conjonction avec le formalisme MOC. Dans [Suslov, 1993], il s'agit dans chaque plan (\vec{T}, z) des différentes lignes d'intégration de faire un calcul S_N en géométrie cartésienne 2D ; dans [Lee & Cho, 2006], il s'agit de coupler des calculs MOC 2D plan avec des calculs S_N 1D à plaques par un terme de fuites transverses.

Par ailleurs, ce projet a été réalisé en se limitant à une approche séquentielle. Il serait intéressant de faire le lien avec le travail réalisé en environnement parallèle à mémoire distribuée dans [Dahmani & Roy, 2005]. En particulier, comme on l’a présenté au Chapitre 4, l’extension de ACA à cet environnement est a priori très intéressante.

Comme MOC est basée entièrement sur le formalisme de tracking, certains développements pourraient venir de cette étape amont. Dans le contexte de DRAGON, comme ce code est basé historiquement sur la méthode des probabilités de collision (avec diffusion isotrope), le format de stockage du tracking et le traitement des symétries ne permettent pas au traitement général de l’anisotropie disponible avec la méthode des caractéristiques d’être appliqué pour toutes les géométries. Avec l’introduction du module NXT, il serait souhaitable de repenser ces deux aspects pour s’affranchir de ces limitations.

Ensuite, comme on l’a clairement évoqué pour le benchmark PWR, la prochaine étape directe de validation est de faire des calculs avec évolution du combustible. Ceci est en cours pour le benchmark PWR.

Pour finir, au delà de la méthode des caractéristiques, on a pu observé au cours de la procédure de validation, sur les benchmarks BASALA-V et CANDU-NG, les limites de la modélisation proposée : des erreurs significatives sont apparentes. Comme on l’a mentionné, il y a fort à croire que c’est le traitement énergétique, soit la conjonction du maillage énergétique et des modèles d’auto-protection qui est responsable de cette dégradation des résultats. Dans la validation présentée ici (et de manière plus exhaustive dans [Karthikeyan, 2006]), c’est le choix du modèle d’auto-protection qui a été étudié. Pour la suite, c’est le maillage énergétique qui devrait être questionné ; en ce sens, le maillage SHEM et la méthodologie exposée dans [Hfaiedh & Santamarina, 2005] sont un très bon point de départ.

REFERENCES

- [Adams & Larsen, 2002] Adams, M. L. & Larsen, E. W. (2002). Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations. *Progress in Nuclear Energy*, 40:3–159.
- [AEN-NEA, 2003] AEN-NEA (2003). Physics of plutonium recycling, volume VII: BWR MOX benchmark - specification and results. Technical Report NEA#03038, OECD.
- [Alcouffe et al., 1979] Alcouffe, R. E., Larsen, E. W., Miller, W. F. J. & Wienke, B. R. (1979). Computational efficiency of numerical methods for the multigroup, discrete ordinates neutron transport equations: The slab geometry case. *Nuclear Science and Engineering*, 71:111–127.
- [Askew, 1972] Askew, J. R. (1972). A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries. Report AAEW-M 1108, United Kingdom Atomic Energy Establishment, Winfrith.
- [Bernard et al., 2006] Bernard, D., Hfaiedh, N., Le Tellier, R., Litaize, O., Mengelle, S., Santamarina, A., Sargeni, A., Vaglio-Gaudard, C. & Vidal, J. F. (2006). Nouveau schéma REL2005 pour le calcul des réacteurs à eau légère. Séminaire Neutronique, CEA/Cadarache/DER/SPRC, Cadarache (22 Sept).
- [Boczar, 2002] Boczar, P. G. (2002). ACR technology base: Fuel. Presented to US Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Reactor Regulation. [Online] <http://canteach.candu.org/library/20031209.pdf> (consulté le 04 août 2004).
- [Both & Penelieu, 1996] Both, J. P. & Penelieu, Y. (1996). The Monte Carlo code TRIPOLI-4 and its first benchmark interpretations. In *Proc. of Int. Conf. on the Physics of Reactors PHYSOR 1996*, Mito. ANS.

- [Bouras & Fraysse, 2000] Bouras, A. & Fraysse, V. (2000). A relaxation strategy for inexact matrix-vector products for Krylov methods. Technical Report TR/PA/00/15, CERFACS, Toulouse.
- [Carlson, 1971] Carlson, B. G. (1971). Tables of equal weight quadrature EQ_n over the unit sphere. Report LA-4734, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.
- [Cathalau et al., 2004] Cathalau, S., Blaise, P., Fougeras, P., Thiollay, N., Santamarina, A., Litaize, O., Yamamoto, T., Kanda, R., Sasagawa, M., Umamo, T., Kikuchi, T. & Nigon, J. L. (2004). High moderation boiling water reactors fully loaded with MOX fuel: The BASALA experimental program. In *Proc of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems PHYSOR 2004*, Chicago. ANS.
- [Chang & Adams, 2003] Chang, J. & Adams, M. L. (2003). Analysis of transport synthetic acceleration for highly heterogeneous problems. In *Proc. of Int. Conf. in Nuclear Mathematical and Computational Sciences M&C 2003*, Gatlinburg. ANS.
- [Cotton et al., 2005] Cotton, C. A., Lee, D., Kozlowski, T., Downar, T. J., Yang, W. S. & Carlson, D. E. (2005). Physics analysis of coolant voiding in the ACR-700 lattice. In *Transactions of the American Nuclear Society*, pages 685–687. ANS.
- [Dahmani et al., 2005] Dahmani, M., Le Tellier, R., Roy, R. & Hébert, A. (2005). An efficient preconditioning technique using krylov subspace methods for 3D characteristics solver. *Annals of Nuclear Energy*, 32:876–896.
- [Dahmani & Roy, 2005] Dahmani, M. & Roy, R. (2005). Parallel solver based on the three-dimensional characteristics method: Design and performance analysis. *Nuclear Science and Engineering*, 150:155–169.

- [Davison, 1957] Davison, B. (1957). *Neutron Transport Theory*. The International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, Oxford.
- [Goldberg, 1991] Goldberg, D. (1991). What every computer scientist should know about floating-point arithmetic. *Computing Surveys*, 23(1):91–124. an edited reprint available online at http://docs.sun.com/source/806-3568/ncg_goldberg.htm.
- [Goldberg et al., 1995] Goldberg, L., Vujic, J., Leonard, A. & Stachowski, R. (1995). The characteristics method in general geometry. In *Transactions of the American Nuclear Society*, volume 73, page 173. ANS.
- [Halsall, 1980] Halsall, M. J. (1980). CACTUS, a characteristics solution to the neutron transport equations in complicated geometries. Report AEEW-R 1291, United Kingdom Atomic Energy Establishment, Winfrith.
- [Hébert, 1993] Hébert, A. (1993). A consistent technique for the pin-by-pin homogenization of a pressurized water reactor assembly. *Nuclear Science and Engineering*, 113:227–238.
- [Hébert, 1997] Hébert, A. (1997). Application of transport methods to lattice calculations. Frédéric Joliot Summer School, Cadarache.
- [Hébert, 2001] Hébert, A. (2001). Isotropic streaming effects in thermal lattices. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactors Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications M&C 2001*, Salt Lake City. ANS.
- [Hébert, 2004] Hébert, A. (2004). Revisiting the Stamm’ler self-shielding model. In *Proc. of the 25th Annual Conf. of the Canadian Nuclear Society*, Toronto. CNS.

- [Hébert, 2005] Hébert, A. (2005). The Ribon extended self-shielding model. *Nuclear Science and Engineering*, 151:1–24.
- [Hébert, 2006a] Hébert, A. (2006a). The search for superconvergence in spherical harmonics approximations. *Nuclear Science and Engineering*, 154:134–173.
- [Hébert, 2006b] Hébert, A. (2006b). Towards version4. In *Workshop at Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Advances in Nuclear Analysis and Simulation PHYSOR 2006*, Vancouver. ANS.
- [Hébert & Karthikeyan, 2005] Hébert, A. & Karthikeyan, R. (2005). Interfacing NJOY with advanced lattice codes. In *Workshop on NJOY-2005 and User Group Meeting*, Issy les Moulineaux.
- [Hébert & Marleau, 1991] Hébert, A. & Marleau, G. (1991). Generalization of the Stamm'ler method for the self-shielding resonant isotopes in arbitrary geometries. *Nuclear Science and Engineering*, 108:230–239.
- [Hébert & Mathonnière, 1993] Hébert, A. & Mathonnière, G. (1993). Development of a third-generation *Superhomogénéisation* method for the homogenization of a pressurized water reactor assembly. *Nuclear Science and Engineering*, 115:129–141.
- [Hébert & Saygin, 1992] Hébert, A. & Saygin, H. (1992). Development of DRAGR for the formatting of DRAGON cross section libraries. In *Seminar on NJOY-91 and THEMIS for the Processing of Evaluated Nuclear Data Files*, Saclay.
- [Hfaiedh & Santamarina, 2005] Hfaiedh, N. & Santamarina, A. (2005). Determination of the optimized SHEM mesh for neutron transport calculations. In *Proc. of Int. Mtg. in Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications M&C 2005*, Avignon. ANS.

- [Hong & Cho, 1998] Hong, S. G. & Cho, N. Z. (1998). CRX: a code for rectangular and hexagonal lattices based on the method of characteristics. *Annals of Nuclear Energy*, 25:547–565.
- [Karthikeyan, 2006] Karthikeyan, R. (2006). *Development and Validation of Burnup Dependent Computational Schemes for the Analysis of Assemblies with Advanced Lattice Codes*. PhD thesis, Institut de Genie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [Karthikeyan et al., 2006] Karthikeyan, R., Le Tellier, R. & Hébert, A. (2006). Estimation of coolant void reactivity for CANDU-NG lattice using DRAGON and validation using MCNP5 and TRIPOLI-4.3. In *Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Advances in Nuclear Analysis and Simulation PHYSOR 2006*, Vancouver. ANS.
- [Khalil, 1988] Khalil, H. (1988). Effectiveness of a consistently formulated diffusion-synthetic acceleration differencing approach. *Nuclear Science and Engineering*, 98:226–243.
- [Lathrop & Carlson, 1964] Lathrop, K. D. & Carlson, B. G. (1964). Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation. Report LA-3186, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.
- [Le Tellier & Hébert, 2004] Le Tellier, R. & Hébert, A. (2004). Application of the DSA preconditioned GMRES formalism to the method of characteristics - first results. In *Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems PHYSOR 2004*, Chicago. ANS.
- [Le Tellier & Hébert, 2005] Le Tellier, R. & Hébert, A. (2005). Spectral analysis of an algebraic collapsing acceleration for the characteristics method. In *Proc. of Int. Mtg. in Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications M&C 2005*, Avignon. ANS.

- [Le Tellier & Hébert, 2006a] Le Tellier, R. & Hébert, A. (2006a). Anisotropy and particle conservation for trajectory-based deterministic methods. *Nuclear Science and Engineering*. (submitted).
- [Le Tellier & Hébert, 2006b] Le Tellier, R. & Hébert, A. (2006b). Benchmarking of the characteristics method combined with advanced self-shielding models on bwr-mox assemblies. In *Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Advances in Nuclear Analysis and Simulation PHYSOR 2006*, Vancouver. ANS.
- [Le Tellier & Hébert, 2006c] Le Tellier, R. & Hébert, A. (2006c). An improved algebraic collapsing acceleration with general boundary conditions for the characteristics method. *Nuclear Science and Engineering*. (accepted).
- [Le Tellier & Hébert, 2006d] Le Tellier, R. & Hébert, A. (2006d). On the integration scheme along a trajectory for the characteristics method. *Annals of Nuclear Energy*, 33:1260–1269.
- [Le Tellier et al., 2006] Le Tellier, R., Hébert, A. & Marleau, G. (2006). The implementation of a 3D characteristics solver for the generation of incremental cross sections for reactivity devices in a CANDU reactor. In *Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Advances in Nuclear Analysis and Simulation PHYSOR 2006*, Vancouver. ANS.
- [Le Tellier et al., 2004] Le Tellier, R., Hébert, A. & Roy, R. (2004). Algebraic collapsing acceleration of the characteristics method with anisotropic scattering. In *Proc. of the 6th Int. Conf. on Simulation Methods in Nuclear Engineering*, Montréal. CNS.
- [Lee & Cho, 2006] Lee, G. S. & Cho, N. Z. (2006). 2D/1D fusion method solutions of the three-dimensional transport OECD benchmark problem C5G7 MOX. *Progress in Nuclear Energy*, 48:410–423.

- [Leonard & McDaniel, 1995] Leonard, A. & McDaniel, C. T. (1995). Optimal polar angles and weights for the characteristics method. In *Transactions of the American Nuclear Society*, volume 73, pages 172–173. ANS.
- [Lewis & Miller, 1993] Lewis, E. E. & Miller, W. F. J. (1993). *Computational Methods of Neutron Transport*. ANS, La Grange Park.
- [Lewis et al., 2001] Lewis, E. E., Smith, M. A., Tsoulfanidis, N., Palmiotti, G., Taiwo, T. A. & Blomquist, R. N. (2001). Benchmark specification for deterministic 2-D/3-D MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenisation (C5G7 MOX). Technical Report NEA/NSC/DOC(2001)4, NEA.
- [Litaize et al., 2004] Litaize, O., Santamarina, A., Hervault, M., Cathalau, S., Fougeras, P., Blaise, P., Yamamoto, T., Kanda, R., Sasagawa, M. & Kikuchi, T. (2004). Monte carlo analysis of high moderation 100% MOX BWR cores using JEF2 and JENDL3 nuclear data. In *Proc of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems PHYSOR 2004*, Chicago. ANS.
- [MacFarlane & Muir, 2000] MacFarlane, R. E. & Muir, D. W. (2000). NJOY99.0 code system for producing pointwise and multigroup neutron and photon cross sections from ENDF/B data. Report PSR-480/NJOY99.0, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.
- [Marleau, 2001] Marleau, G. (2001). DRAGON theory manual part I: Collision probability calculations. Report IGE-236, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [Marleau et al., 2006a] Marleau, G., Hébert, A. & Roy, R. (2006a). A user guide for DRAGON Version4. Report IGE-294, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

- [Marleau et al., 2006b] Marleau, G., Hébert, A. & Roy, R. (2006b). A user's guide for DRAGON 3.05. Report IGE-174 Rev. 6, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [Meurant, 1999] Meurant, G. (1999). *Computer Solution of Large Linear Systems*, volume 28 of *Studies in Mathematics and its Applications*. North Holland.
- [Park & Cho, 2004] Park, Y. R. & Cho, N. Z. (2004). Coarse-mesh angular dependent rebalance acceleration of the discrete ordinates transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 148:355–373.
- [Patton, 1996] Patton, B. W. (1996). *Application of Krylov Subspace Iterative Techniques to the Numerical Solution of the Neutron Transport Equation*. PhD thesis, University of Michigan, Ann Arbor.
- [Roy, 1991] Roy, R. (1991). Anisotropic scattering for integral transport codes. Part2: Cyclic tracking and its application to XY lattices. *Annals of Nuclear Energy*, 18:511–524.
- [Roy, 1998] Roy, R. (1998). The cyclic characteristics method. In *Proc. of Int. Conf. in Physics of Nuclear Science and Technology PHYSOR 1998*, Long Island. ANS.
- [Roy, 1999] Roy, R. (1999). The cyclic characteristics method with anisotropic scattering. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactors Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications M&C 1999*, volume 2, pages 1225–1234, Madrid. ANS.
- [Roy & Hébert, 2000] Roy, R. & Hébert, A. (2000). The GAN generalized driver. Report IGE-158, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

- [Roy et al., 1989] Roy, R., Hébert, A. & Marleau, G. (1989). A transport method for treating three-dimensional lattices of heterogeneous cells. *Nuclear Science and Engineering*, 101:217–225.
- [Saad, 1996] Saad, Y. (1996). *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Series in Computer Science. PWS Publishing Company, 1st edition.
- [Saad & Schultz, 1986] Saad, Y. & Schultz, M. H. (1986). GMRES: A generalized minimal RESidual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7:856–869.
- [Saad & Wu, 1995] Saad, Y. & Wu, K. (1995). Design of an iterative solution module for a parallel sparse matrix library (P-SPARSLIB). *Applied Numerical Mathematics*, 19:343–357.
- [Sanchez, 2004] Sanchez, R. (2004). On the spectral analysis of iterative solutions of the discretized one-group transport equation. *Annals of Nuclear Energy*, 31:2059–2075.
- [Sanchez & Chetaine, 1999] Sanchez, R. & Chetaine, A. (1999). Synthetic acceleration for a 2D characteristic method in non regular meshes. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactors Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications M&C 1999*, volume 2, pages 1572–1586, Madrid. ANS.
- [Sanchez & Chetaine, 2000] Sanchez, R. & Chetaine, A. (2000). A synthetic acceleration for a two-dimensional characteristic method on unstructured meshes. *Nuclear Science and Engineering*, 136:122–139.
- [Sanchez & Mao, 1997] Sanchez, R. & Mao, L. (1997). New developments in the interface-current module TDT. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications SNA 1997*, Saratoga Springs. ANS.

- [Sanchez et al., 2002] Sanchez, R., Mao, L. & Santandrea, S. (2002). Treatment of boundary conditions in trajectory-based deterministic transport methods. *Nuclear Science and Engineering*, 140:23–50.
- [Sanchez et al., 1998] Sanchez, R., Mondot, J., Stankovski, Z., Cossic, A. & Zmijarevic, I. (1998). APOLLO II: a user-oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 100:352–362.
- [Santamarina et al., 2004] Santamarina, A., Collignon, C. & Garat, C. (2004). French calculation schemes for light water reactor analysis. In *Proc of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems PHYSOR 2004*, Chicago. ANS.
- [Santamarina et al., 2006] Santamarina, A., Hfaiedh, N., Le Tellier, R., Marotte, V., Misu, S., Sargeni, A., Vaglio-Gaudard, C. & Zmijarevic, I. (2006). Advanced neutronics tools for BWR design calculations. In *Proc. of Int. Conf. on Nuclear Engineering ICONE 14*, Miami. ASME.
- [Santandrea, 2005] Santandrea, S. (2005). A new multi-domain DPN technique to accelerate the method of characteristics in unstructured meshes. In *Proc. of Int. Mtg. in Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications M&C 2005*, Avignon. ANS.
- [Santandrea & Mosca, 2006] Santandrea, S. & Mosca, P. (2006). Linear surface characteristic scheme for the neutron transport equation In unstructured geometries. In *Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Advances in Nuclear Analysis and Simulation PHYSOR 2006*, Vancouver. ANS.

- [Santandrea & Sanchez, 2002a] Santandrea, S. & Sanchez, R. (2002a). Acceleration techniques for the characteristic method in unstructured meshes. *Annals of Nuclear Energy*, 29:323–352.
- [Santandrea & Sanchez, 2002b] Santandrea, S. & Sanchez, R. (2002b). Positive linear and nonlinear surface characteristic schemes for the neutron transport equation in unstructured geometries. In *Proc. of Int. Conf. on the New Frontiers of Nuclear Technology : Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing PHYSOR 2002*, Seoul. ANS.
- [Santandrea & Sanchez, 2005] Santandrea, S. & Sanchez, R. (2005). Analysis and improvements of the DPN acceleration technique for the method of characteristics in unstructured meshes. *Annals of Nuclear Energy*, 32:163–193.
- [Smith, 2000] Smith, K. S. (2000). CASMO-4 characteristics methods for two-dimensional PWR and BWR core calculations. In *Transactions of the American Nuclear Society*, volume 83, pages 294–296. ANS.
- [Stepanek et al., 1982] Stepanek, J., Auerbach, T. & Halg, W. (1982). Calculation of four thermal benchmarks in X-Y geometry. Technical Report EIR-Bericht Nr. 464, Federal Institute of Technology (ETH), Zürich.
- [Suslov, 1993] Suslov, I. R. (1993). Solution of transport equation in 2- and 3-dimensional irregular geometry by the method of characteristics. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications M&C 1993*, pages 752–763, Karlsruhe. ANS.
- [Suslov, 1997] Suslov, I. R. (1997). An improved transport theory scheme based on the quasi-stationary derivatives principle. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications SNA 1997*, Saratoga Springs. ANS.

- [Suslov, 2001] Suslov, I. R. (2001). An algebraic collapsing acceleration in long characteristics transport theory. In *Proc. of 11th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety*, pages 179–188, Csopak.
- [Suslov, 2003] Suslov, I. R. (2003). An algebraic collapsing acceleration method for acceleration of the inner (scattering) iterations in long characteristics transport theory. In *Proc. of Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Applications SNA 2003*, Paris. ANS.
- [Suslov, 2005] Suslov, I. R. (2005). Construction of extrapolated solution of the C5G7MOX benchmark with the MCCG3D characteristics code. In *Proc. of Int. Mtg. in Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications M&C 2005*, Avignon. ANS.
- [Tabuchi et al., 2005] Tabuchi, M., Yamamoto, A., Endo, T., Sugimura, N., Ushio, T. & Mori, M. (2005). Yet another optimum polar angle quadrature set for the method of characteristics. In *Transactions of the American Nuclear Society*, volume 92, pages 506–507. ANS.
- [Talebi, 2006] Talebi, F. (2006). Evaluating the coolant void reactivity for assemblies of CANDU lattices. Master’s thesis, Institut de Genie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [Trkov, 1998] Trkov, A. (1998). Analysis of the Rowlands uranium oxide pin-cell benchmark with an updated WIMS-D library. *Annals of Nuclear Energy*, 25(10):747–752.
- [Vaglio-Gaudard et al., 2006] Vaglio-Gaudard, C., Santamarina, A., Sargeni, A., Le Tellier, R. & Vidal, J. F. (2006). Qualification of APOLLO2 BWR calculation scheme on the BASALA mock-up. In *Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Advances in Nuclear Analysis and Simulation PHYSOR 2006*, Vancouver. ANS.

- [Van Der Vorst & Sleijpen, 1998] Van Der Vorst, H. A. & Sleijpen, G. L. G. (1998). *Iterative Bi-CG Type Methods and Implementation Aspects*, pages 217–253. Kluwer Academic Publishers, Netherlands.
- [Vladimirov, 1959] Vladimirov, V. S. (1959). PhD thesis, V.A. Stecklova Mathematics Institute.
- [Warsa et al., 2003a] Warsa, J. S., Wareing, T. A. & Morel, J. E. (2003a). Krylov iterative methods applied to multidimensional S_N calculations in the presence of material discontinuities. In *Proc. of Int. Conf. in Nuclear Mathematical and Computational Sciences M&C 2003*, Gatlinburg. ANS.
- [Warsa et al., 2003b] Warsa, J. S., Wareing, T. A. & Morel, J. E. (2003b). On the degraded effectiveness of diffusion synthetic acceleration for multidimensional S_N calculations in the presence of material discontinuities. In *Proc. of Int. Conf. in Nuclear Mathematical and Computational Sciences M&C 2003*, Gatlinburg. ANS.
- [Warsa et al., 2004] Warsa, J. S., Wareing, T. A., Morel, J. E., McGhee, J. M. & Lehoucq, R. B. (2004). Krylov subspace iterations for deterministic k -eigenvalue calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 147:26–42.
- [Wu & Roy, 1999] Wu, G. J. & Roy, R. (1999). Self-collision rebalancing technique for the MCI characteristics solver. In *Proc. of the 20th Annual Conf. of the Canadian Nuclear Society*, Montréal. CNS.
- [Wu & Roy, 2003a] Wu, G. J. & Roy, R. (2003a). Acceleration techniques for trajectory-based deterministic 3D transport solvers. *Annals of Nuclear Energy*, 30:1–16.
- [Wu & Roy, 2003b] Wu, G. J. & Roy, R. (2003b). A new characteristics algorithm for 3D transport calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 30:1–16.

- [X-5 Monte Carlo Team, 2003] X-5 Monte Carlo Team (2003). MCNP- a general Monte Carlo N-Particle transport code, version 5. Report LA-CP-03-0245, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.
- [Yamamoto et al., 2004] Yamamoto, A., Kitamura, Y. & Yamane, Y. (2004). Computational efficiencies of approximated exponential functions for transport calculations of the characteristics method. *Annals of Nuclear Energy*, 31:1027–1037.
- [Zika & Adams, 2000a] Zika, M. R. & Adams, M. L. (2000a). Transport synthetic acceleration for long-characteristics assembly-level problems. *Nuclear Science and Engineering*, 134:135–158.
- [Zika & Adams, 2000b] Zika, M. R. & Adams, M. L. (2000b). Transport synthetic acceleration with opposing boundary conditons. *Nuclear Science and Engineering*, 134:159–170.
- [Zika & Larsen, 1999] Zika, M. R. & Larsen, E. W. (1999). Fourier mode analysis of slab-geometry transport iterations in spatially periodic media. In *Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactors Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications M&C 1999*, Madrid. ANS.

ANNEXE I

CALCUL D'AUTO-PROTECTION DES RÉSONANCES

Comme on l'a évoqué au Chapitre 1, un modèle d'auto-protection est nécessaire pour le calcul de réseau lorsque l'approche multigroupe avec un nombre restreint de groupes (50 à 200) est utilisée, c'est à dire presque toujours dans le cadre des méthodes déterministes. Le but d'un tel modèle est de calculer des sections efficaces microscopiques par groupe dites auto-protégées pour chaque isotope pour les groupes qui présentent des résonances. Ces sections efficaces tiennent compte de l'effet d'auto-protection qui se traduit par des pics en directions opposées entre le flux et les sections efficaces au niveau des résonances. Ces sections efficaces seront alors utilisées dans l'étape de calcul principal de flux et de fuites. Il s'agit d'une procédure de condensation découplée du calcul principal par le biais d'hypothèses que l'on va expliciter.

Cette annexe est limitée aux *méthodes de sous-groupes* qui sont compatibles avec MOC pour la résolution de l'équation de transport et est basée sur [Hébert, 2005] auquel le lecteur est renvoyé pour plus de détails.

Pour la clarté de la présentation, on présente ici le calcul d'auto-protection comme fait sur une géométrie non-discrétisée où région et mélange sont des notions équivalentes (i.e. un mélange correspond à une et une seule région). En effet, en pratique, on calcule des sections efficaces auto-protégées par mélange et le flux est condensé par mélange.

Pour une réaction quelconque ρ , le groupe d'énergie g , la section efficace microscopique

rique auto-protégée est définie pour chaque région i , par

$$\tilde{\sigma}_{\rho i}^g = \mu_g \frac{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \sigma_{\rho}(u) \Phi_i(u)}{\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \Phi_i(u)} = \mu_g \frac{\langle \sigma_{\rho}(u) \Phi_i(u) \rangle_g}{\langle \Phi_i(u) \rangle_g}, \quad (\text{I.1})$$

où

- u est la léthargie définie par $u = \ln(E_0/E)$ (le groupe g correspond à l'intervalle de léthargie $[u_{g-1}, u_g]$),
- μ_g est le facteur d'équivalence multigroupe (analogue d'un facteur SPH),
- $\Phi_i(u)$ est le flux scalaire dans la région i ,
- $\sigma_{\rho}(u)$ est la section efficace microscopique pour la réaction ρ .

I.1 L'équation de transport pour l'auto-protection

On se limite ici à la présentation d'un modèle ne tenant pas compte de la corrélation des résonances entre deux isotopes différents. Ainsi, pour chaque isotope résonnant, le calcul d'autoprotection est découplé i.e est mené en considérant les autres isotopes comme non résonnant. Le flux $\Phi_i(u)$ est calculé à partir de l'équation de transport écrite pour la léthargie u ($\vec{r} \in V_i$)

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) + \Sigma_{ti}(u) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) = Q_i(u), \quad (\text{I.2})$$

où

$$\Sigma_{ti}(u) = \Sigma_{ti}^+(u) + N_i^* \sigma_t^*(u). \quad (\text{I.3})$$

se décompose en la section efficace macroscopique des isotopes non-résonnants et celle de l'isotope résonnant de densité N_i^* dans la région i .

Par ailleurs, pour la plage de léthargie qui présente des résonances, la source de

neutrons est considérée comme isotrope et s'écrit sous la forme

$$Q_i(\vec{r}, u) = \frac{1}{4\pi} (\mathbf{R}_i^+ (\Phi_i(u)) + N_i^* \mathbf{r}^* (\Phi_i(u))), \quad (\text{I.4})$$

où

- $\mathbf{R}_i^+ (\Phi_i(u))$ est l'opérateur macroscopique de ralentissement pour les réactions avec les isotopes non-résonnants,
- $\mathbf{r}^* (\Phi_i(u))$ est l'opérateur microscopique de ralentissement pour les réactions avec l'isotope résonnant considéré.

On fait l'hypothèse qu'aux énergies considérées pour l'auto-protection, les réactions (n,2n), (n,f) et la diffusion inélastique ne contribuent pas au terme de source et les opérateurs de ralentissement sont écrits en termes du moment fondamental de la section efficace différentielle de diffusion sous la forme ($\vec{r} \in V_i$)

$$\mathbf{R}_i^+ (\Phi(\vec{r}, u)) = \int_0^\infty du' \Sigma_{si}^+(u \leftarrow u') \Phi(\vec{r}, u'), \quad (\text{I.5})$$

$$\mathbf{r}^* (\Phi(\vec{r}, u)) = \int_0^\infty du' \sigma_s^*(u \leftarrow u') \Phi(\vec{r}, u'). \quad (\text{I.6})$$

Cette équation de ralentissement est simplifiée et découplée du calcul de flux multi-groupe en utilisant les hypothèses de Livolant-Jeanpierre. D'abord, le flux de neutrons est factorisé sous la forme

$$\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) = \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \Xi(\vec{r}, u), \quad (\text{I.7})$$

soit pour le flux scalaire,

$$\Phi(\vec{r}, u) = \Psi(\vec{r}, u) \Xi(\vec{r}, u), \quad (\text{I.8})$$

c'est à dire comme le produit d'une structure résonnante $\Psi(\vec{r}, u)$ et d'une structure

régulière $\Xi(\vec{r}, u)$. Ensuite, on applique les hypothèses suivantes : ($\vec{r} \in V_i$)

1. la structure régulière est appelée flux macroscopique dans le contexte de l'auto-protection et représente le comportement asymptotique du flux entre les résonances ; il est défini par

$$\Sigma_{si}^+(u)\Xi(\vec{r}, u) = \mathbf{R}_i^+(\Phi(\vec{r}, u)), \quad (\text{I.9})$$

2. comme l'opérateur $\mathbf{r}^*(\Phi(\vec{r}, u))$ agit sur un intervalle de léthargie limité, on considère que

$$\mathbf{r}^*(\Phi(\vec{r}, u)) = \Xi(\vec{r}, u)\mathbf{r}^*(\Psi(\vec{r}, u)), \quad (\text{I.10})$$

3. le flux macroscopique $\Xi(\vec{r}, u)$ est considéré comme constant sur le domaine spatial ; on le note $\Xi(u)$.

On aboutit alors à un terme de source sous la forme

$$Q_i(u) = \frac{\Xi(u)}{4\pi} (\Sigma_{si}^+(u) + N_i^*\mathbf{r}^*(\Psi_i(u))), \quad (\text{I.11})$$

et l'équation de transport s'écrit alors seulement en termes de la structure résonnante $\Psi_i(u)$ sous la forme ($\vec{r} \in V_i$)

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) + \Sigma_{ti}(u)\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) = \frac{1}{4\pi} (\Sigma_{si}^+(u) + N_i^*\mathbf{r}^*(\Psi_i(u))). \quad (\text{I.12})$$

De même, on considère que la section efficace auto-protégée s'écrit uniquement en fonction de la structure résonnante

$$\tilde{\sigma}_{\rho i}^g = \mu_g \frac{\langle \sigma_\rho(u)\Psi_i(u) \rangle_g}{\langle \Psi_i(u) \rangle_g}. \quad (\text{I.13})$$

En prenant la moyenne sur le groupe g de l'Eq. (I.12), on a

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \langle \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \rangle_g + \langle \Sigma_{ti}(u) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \rangle_g = \frac{1}{4\pi} \left(\Sigma_{si}^{g+} + N^* \langle \mathbf{r}^* (\Psi_i(u)) \rangle_g \right).$$

I.2 Traitement de l'opérateur de collision avec l'isotope résonnant

En utilisant un modèle de collisions isotropes dans le référentiel du centre de masse, l'opérateur microscopique de ralentissement $\mathbf{r}^* (\Psi_i(u))$ peut être réécrit sous la forme

$$\mathbf{r}^* (\Psi_i(u)) = \frac{1}{1 - \alpha} \int_{u-\epsilon}^u du' e^{u'-u} \sigma_s^*(u') \Psi_i(u'), \quad (\text{I.14})$$

où

- $\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2$ est la fraction maximale d'énergie qu'un neutron peut perdre lors d'une collision avec un noyau de l'isotope de masse A ,
- $\epsilon = \ln(1/\alpha)$ est le gain maximum en léthargie qu'un neutron peut connaître lors d'une collision avec ce même type de noyau,
- $\frac{e^{u'-u}}{1-\alpha} du'$ est la probabilité que le neutron passe d'une léthargie u' à du' près à la léthargie u lors d'une collision.

I.3 L'approche par sous-groupes : les tables de probabilités

On essaie ici, autant que faire se peut de présenter un formalisme général qui englobe les diverses approches, ainsi, aucun détail n'est donné à ce niveau sur le calcul des tables de probabilités introduites.

On considère que la dépendance de la structure résonnante à la léthargie est en fait une dépendance à la valeur de la section efficace microscopique totale de l'isotope résonnant, c'est à dire que $\Psi_i(u) = \Psi_i(\sigma_t^*(u))$.

Pour les méthodes de sous-groupes, dans ces conditions, les intégrales de Riemann en léthargie de la forme

$$\left\langle f(\sigma_t^*(u)) \right\rangle_g, \quad (\text{I.15})$$

sont remplacées par une intégrale de Lebesgue du type

$$\int_0^{\max(\sigma_t^*)} d\sigma_t^* \Pi(\sigma_t^*) f(\sigma_t^*). \quad (\text{I.16})$$

en utilisant la densité de probabilité $\Pi(\sigma_t^*)$. $\Pi(\sigma_t^*)d\sigma_t^*$ est la probabilité que la section efficace totale de l'isotope résonnant soit σ_t^* à $d\sigma_t^*$ près. Ces intégrales sont évaluées par une quadrature du type

$$\Pi(\sigma_t^*) = \sum_{k=1}^K \delta(\sigma_t^* - \sigma_k) w_k, \quad (\text{I.17})$$

avec $\sum_{k=1}^K w_k = 1$.

Cette quadrature $(\sigma_k, w_k)_{k \in [1, K]}$ est appelée une table de probabilités et chaque point σ_k de la quadrature est appelé le sous-groupe k .

Ainsi, on peut écrire

$$\left\langle f(\sigma_t^*(u)) \right\rangle_g = \sum_{k=1}^K w_k f(\sigma_k), \quad (\text{I.18})$$

soit, en revenant aux quantités qui apparaissent dans l'équation de transport,

$$\left\langle \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \right\rangle_g = \sum_{k=1}^K w_k \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (\text{I.19})$$

$$\left\langle \Sigma_{ti}(u) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \right\rangle_g = \sum_{k=1}^K w_k \Sigma_{ti,k} \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (\text{I.20})$$

où l'on a noté $\psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}, \sigma_k)$ et $\Sigma_{ti,k} = \Sigma_{ti}^{g+} + N_i^* \sigma_k$ en considérant que

$$\left\langle \Sigma_{ti}^+(u) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \right\rangle_g = \Sigma_{ti}^{g+} \left\langle \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, u) \right\rangle_g.$$

De même, on introduit une table de probabilité pour une réaction partielle ρ pour le calcul du taux de réaction

$$\left\langle f(\sigma_t^*(u), \sigma_\rho(u)) \right\rangle_g = \int_0^{\max(\sigma_t^*)} d\sigma_t^* \Pi(\sigma_t^*) \int_0^{\max(\sigma_\rho)} d\sigma_\rho \Pi(\sigma_t^*, \sigma_\rho) f(\sigma_t^*, \sigma_\rho). \quad (\text{I.21})$$

où la densité de probabilité conditionnelle $\Pi(\sigma_t^*, \sigma_\rho)$ s'interprète comme :

$\Pi(\sigma_t^*, \sigma_\rho) d\sigma_\rho$ est la probabilité que la section efficace relative à la réaction ρ soit égale à σ_ρ à $d\sigma_\rho$ près sachant que la section efficace totale est σ_t^* .

Cette densité est représentée par la quadrature $(w_{k,l}, \tilde{\sigma}_{\rho,l})_{l \in [1,L]}$

$$\Pi(\sigma_k, \sigma_\rho) = \sum_{l=1}^L w_{k,l} \delta(\sigma_\rho - \tilde{\sigma}_{\rho,l}), \quad (\text{I.22})$$

qui vérifie $\sum_{l=1}^L w_{k,l} = 1$.

Ainsi, pour le taux de réaction ρ , l'expression se simplifie sous la forme

$$\left\langle \sigma_\rho(u) \Psi_i(u) \right\rangle_g = \sum_{k=1}^K w_k \sigma_{\rho,k} \Psi_{i,k}, \quad (\text{I.23})$$

où $\sigma_{\rho,k} = \sum_{l=1}^L w_{k,l} \tilde{\sigma}_{\rho,l}$ est la seule quantité nouvelle qui apparaît.

Il reste alors le traitement de l'opérateur de collision avec l'isotope résonnant $\left\langle \mathbf{r}^* (\Psi_i(u)) \right\rangle_g$ à expliciter avant d'arriver à l'équation des sous-groupes à proprement dit. Dans ce cadre, l'intégrale de Riemann de la forme

$$\frac{1}{1-\alpha} \left\langle \int_{u-\epsilon}^u du' e^{u'-u} f(\sigma(u)) g(\sigma(u')) \right\rangle_g, \quad (\text{I.24})$$

est remplacée par une intégrale de Lebesgue sous la forme

$$\int_0^{\max(\sigma_t^*)} d\sigma_t^* \int_0^{\max(\sigma_t'^*)} d\sigma_t'^* \Pi_s(\sigma_t^*, \sigma_t'^*) f(\sigma_t^*) g(\sigma_t'^*),$$

où la densité de probabilité de collision conditionnelle $\Pi_s(\sigma_t^*, \sigma_t'^*)$ est évaluée par une quadrature du type

$$\Pi_s(\sigma_t^*, \sigma_t'^*) = \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^K \mathcal{W}_{k,l} \delta(\sigma_t^* - \sigma_k) \delta(\sigma_t'^* - \sigma_l), \quad (\text{I.25})$$

avec $\sum_{k=1}^K \mathcal{W}_{k,l} = w_l$.

Remarque : on devrait aussi imposer $\sum_{l=1}^K \mathcal{W}_{k,l} = w_k$ mais comme on impose des valeurs de σ_k dans le groupe g et que $u' \in [u - \epsilon, u]$ dans la seconde intégrale peut prendre des valeurs dans les groupes inférieurs à g , on ne peut satisfaire cette deuxième contrainte de normalisation.

$(\mathcal{W}_{k,l})_{k,l \in [1,K]}$ est appelée la matrice des poids de corrélation du ralentissement. Avec cette quadrature, on peut alors écrire

$$\left\langle \mathbf{r}^* (\Psi_i(u)) \right\rangle_g = \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^K \mathcal{W}_{k,l} \sigma_{w,l} \Psi_{i,l}, \quad (\text{I.26})$$

où $\sigma_{w,l}$ est appelée la section efficace de collision secondaire.

Ainsi, l'Eq. (I.12) s'écrit

$$\sum_{k=1}^K w_k \left(\hat{\Omega} \cdot \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma_{ti,k} \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) \right) = \frac{1}{4\pi} \sum_{k=1}^K w_k \left(\Sigma_{si}^{g+} + N_i^* \sum_{l=1}^K \frac{\mathcal{W}_{k,l}}{w_k} \sigma_{w,l} \Psi_{i,l} \right), \quad (\text{I.27})$$

et est satisfaite si $\forall k \in [1, K]$, l'équation du sous-groupe k est vérifiée

$$\hat{\Omega} \cdot \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma_{ti,k} \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left(\Sigma_{si}^{g+} + N_i^* \sum_{l=1}^K \frac{\mathcal{W}_{k,l}}{w_k} \sigma_{w,l} \Psi_{i,l} \right) \quad (\text{I.28})$$

On retrouve bien la résolution d'une équation de transport sous une forme mono-énergétique avec source fixe pour chaque sous-groupe.

La résolution de cette équation effectuée, les quantités $\langle \sigma_\rho(u) \Psi_i(u) \rangle_g$ et $\langle \Psi_i(u) \rangle_g$ nécessaires aux calculs de $\tilde{\sigma}_{\rho i}^g$ sont obtenues par $\sum_{k=1}^K w_k \sigma_{\rho,k} \Psi_{i,k}$ et $\sum_{k=1}^K w_k \Psi_{i,k}$ respectivement.

À ce stade, on peut passer par une équivalence entre notre problème et un milieu homogène, infini en calculant pour chaque région et chaque groupe, une section efficace équivalente pour interpoler les taux de réactions dans des tables d'intégrales de résonance générées aux préalables par le code NJOY et son module **Groupr** qui permet la résolution de l'Eq. (I.2) pour un isotope résonnant «dilué» dans un milieu homogène, infini, i.e.

$$c\sigma_e + \mathbf{r}^* (\Phi(u)) = \sigma_t(u)\Phi(u) + \sigma_e\Phi(u), \quad (\text{I.29})$$

où $c = \frac{\Sigma_s^+}{\Sigma_t^+}$, avec le paramètre de tabulation $\sigma_e = \frac{\Sigma_t^+}{N^*}$, la section efficace de dilution.

I.4 Les tables de probabilités

Comme on l'a vu au paragraphe précédent, pour chaque groupe g , une méthode des sous-groupes requiert l'obtention au préalable de :

- $(\sigma_k, w_k)_{k \in [1, K]}$,
- $(\sigma_{\rho,k})_{k \in [1, K]}$,

- $(\sigma_{w,l}, (\mathcal{W}_{k,l})_{k \in [1,K]})_{l \in [1,K]}$.

Pour le traitement de l'opérateur de collision avec l'isotope résonnant, des hypothèses simplificatrices peuvent être faites afin de réduire $(\sigma_{w,l}, (\mathcal{W}_{k,l})_{k \in [1,K]})_{l \in [1,K]}$ à d'autres quantités connues. Pour présenter ces hypothèses, revenons au cas d'un milieu infini, homogène. D'abord, si l'on considère qu'il n'y a pas d'absorption résonnante dans l'intervalle $]u - \epsilon, u[$, on a $\sigma_s^*(u) = \sigma_p^*$, la section efficace potentielle de l'isotope résonnant et $\mathbf{r}^*(\Phi(u)) = \sigma_p^* \Phi(u)$. Par ailleurs, en remplaçant dans l'Eq. (I.29), on voit que le flux dans ce cas est $\Phi_\infty(u) = c$.

À partir de là, les hypothèses les plus communes sont :

- le modèle de résonance étroite et isolée (NR) : le changement de léthargie dû à une collision avec l'isotope résonnant est grand comparé à la largeur de la résonance i.e. $\sigma_s^*(u') = \sigma_p^*$, $\Phi(u') = \Phi_\infty(u')$ et par conséquent, $\mathbf{r}^*(\Phi(u)) = c\sigma_p^*$;
- le modèle de résonance large (WR) pour lequel $\sigma_{w,k} = \sigma_{s,k}$, $\mathcal{W}_{k,l} = w_k \delta_{k,l}$: le changement de léthargie dû à une collision avec l'isotope résonnant est petit comparé à la largeur de la résonance et par conséquent, $\sigma_s^*(u')\Phi(u') \approx$ constante sur $]u - \epsilon, u[$ soit $\mathbf{r}^*(\Phi(u)) = \sigma_s^*(u)\Phi(u)$;
- le modèle statistique (ST) pour lequel $\sigma_{w,k} = \sigma_{s,k}$, $\mathcal{W}_{k,l} = w_k w_l$: les résonances sont étroites et nombreuses et par conséquent, $\mathbf{r}^*(\Phi(u)) = \left\langle \sigma_s^*(u')\Phi(u') \right\rangle_g$.

Ces hypothèses sont parfois combinées par l'introduction d'une combinaison linéaire de WR avec NR ou ST ; cette approximation intermédiaire est appelée *approximation de Goldstein-Cohen*.

Pour le calcul des tables de probabilités, on distingue deux approches : la première dite *physique* est une procédure de «curve fitting» à l'aide des tables générées par le code NJOY en fonction de la dilution et la seconde dite *mathématique* vise à préserver certains moments des sections efficaces préalablement calculés à partir des données Autolib. Dans ce second cas, la quadrature obtenue s'apparente à une quadrature de Gauss. On renvoie le lecteur à [Hébert, 2005] pour plus d'informations

à propos de l'obtention de ces tables.

I.5 Résolution des équations de sous-groupes

Comme expliqué au Chapitre 6, on a utilisé deux options parmi les méthodes de sous-groupes pour l'auto-protection :

1. le modèle statistique ST avec des tables de probabilités physiques ;
2. le modèle Ribon étendu avec des tables de probabilités mathématiques.

Si pour le premier modèle, la matrice des poids de corrélation du ralentissement est définie positive, par contre, avec l'approche de Ribon étendue, elle ne l'est pas forcément. Ainsi, les méthodes de résolution du système d'équations de sous-groupes diffèrent.

Pour le modèle ST, on a deux niveaux d'itérations imbriquées. Les itérations externes entre sous-groupes consistent en un schéma de Jacobi sous la forme

$$\hat{\Omega} \cdot \psi_k^{(m+1)}(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sum_{ti,k} \psi_k^{(m+1)}(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left(\sum_{si}^{g+} + N_i^* \left(\sum_{l \neq k} w_l \sigma_{s,l} \Psi_{i,l}^{(m)} + w_k \sigma_{s,k} \Psi_{i,k}^{(m+1)} \right) \right). \quad (\text{I.30})$$

On a alors une boucle interne, telle que présentée au Chapitre 1, pour chaque sous-groupe sous la forme

$$\hat{\Omega} \cdot \psi_k^{(n+1)}(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sum_{ti,k} \psi_k^{(n+1)}(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left(S_i + N_i^* w_k \sigma_{s,k} \Psi_{i,k}^{(n)} \right), \quad (\text{I.31})$$

avec $S_i = \sum_{si}^{g+} + N_i^* \sum_{l \neq k} w_l \sigma_{s,l} \Psi_{i,l}^{(m)}$.

Pour le modèle Ribon étendu, une approche par matrice de réponse a été adoptée dans [Hébert, 2005]. Par linéarité de l'équation de transport, elle consiste à construire

explicitement et résoudre le système de dimensions $(K \times I) \times (K \times I)$ suivant

$$\mathbb{M}\vec{\Psi} = \vec{S} \quad (\text{I.32})$$

pour obtenir $\vec{\Psi} = (\Psi_{i,k})_{k \in [1,K], i \in \mathcal{I}}$. \mathcal{I} est l'ensemble des indices de mélanges contenant l'isotope résonnant considéré; on note $I = \text{card}(\mathcal{I})$.

$\mathbb{M}_{(i,k),(l,j)} = \delta_{ij}\delta_{kl} - p_{ij,k}N_j^* \frac{\mathcal{W}_{k,l}}{w_k} \sigma_{w,l}$ est calculé à partir de la solution $(p_{ij,k})_{i \in [1,N]}$ de $(\vec{r} \in V_i)$

$$\hat{\Omega} \cdot \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma_{ti,k} \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{\delta_{ij}}{4\pi}, \quad (\text{I.33})$$

pour $j \in \mathcal{I}$. $p_{ij,k}$ n'est rien d'autre que la probabilité de collision réduite calculée avec les sections efficaces totales du sous-groupe k .

$S_{i,l}$ est la solution de $(\vec{r} \in V_i)$

$$\hat{\Omega} \cdot \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma_{ti,k} \psi_k(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{\Sigma_{si}^{g+}}{4\pi}. \quad (\text{I.34})$$

Cette approche n'est pas gênante avec la méthode CP car une fois que ces probabilités de collision sont obtenues, la construction des coefficients est directe; par contre, avec la MOC, on a $(I + 1) \times K$ équations de transport à résoudre et cette approche, comme montré au Chapitre 8, devient très coûteuse en comparaison de l'approche itérative précédente.

ANNEXE II

QUADRATURE ET ANISOTROPIE

Un point important lorsque l'on considère une réaction de diffusion anisotrope est le jeu de contraintes qui doivent être imposées aux trajectoires du tracking de manière à assurer la conservation des particules quel que soit l'ordre de quadrature choisi. Lorsque la diffusion est isotrope, la seule contrainte est la renormalisation des longueurs des segments qui composent les trajectoires de manière à intégrer correctement les volumes ; par contre, lorsque la diffusion est anisotrope, des contraintes sur la quadrature de l'angle solide doivent être introduites. Assez étrangement, cette question n'est pas vraiment traitée dans la littérature. Dans [Sanchez et al., 2002], des conditions nécessaires pour la quadrature de l'angle solide ont été dérivées dans le cas d'une quadrature produit en imposant la conservation des particules dans un milieu infini, homogène. Cependant, ces contraintes ne sont pas suffisantes en général comme observé à l'Annexe IV.

On se propose ici de dériver des conditions nécessaires et suffisantes pour une quadrature produit de manière à assurer cette conservation pour une géométrie quelconque.

En application de ces résultats, une discussion sur le choix de la quadrature polaire pour MOC dans le cas de géométries 2D cartésiennes est donnée. Dans [Leonard & McDaniel, 1995], Leonard et McDaniel ont introduit des quadratures polaires dites optimisées, en se basant sur l'équivalence entre CP et MOC lorsque la diffusion est isotrope. Ils ont proposé deux manières d'obtenir des quadratures qui optimisent l'intégration des fonctions de Bickley-Naylor. L'approche qu'ils ont favorisée ne tient pas compte de la conservation des particules étant donné que leurs calculs

sont limités à la diffusion isotrope. Par la suite, ces quadratures ont été utilisées dans des configurations avec diffusion anisotrope conduisant à de très mauvais résultats comme dans [Roy, 1999]. Dans [Sanchez et al., 2002], il a été montré que ces quadratures intègrent très mal les polynômes et ne sont pas conservatives lorsque la diffusion est anisotrope.

Dans cette étude, nous revoyons les deux approches proposées dans [Leonard & McDaniel, 1995] du point de vue des critères de conservation établis et proposons une extension de leur procédure d’optimisation qui prend en compte ces contraintes. Les différentes quadratures sont testées sur deux benchmarks 2D construits à partir du 2^{ème} benchmark de l’Annexe IX.

Pour finir, on précise ce qu’il en est vis à vis de la conservation pour les quadratures disponibles dans DRAGON pour les calculs en 3D qui ne sont pas des quadratures produit.

II.1 La conservation des particules

On a vu au Chapitre 1 que le traitement de l’anisotropie de diffusion repose sur un développement en polynômes de Legendre de la section efficace de diffusion. De cette expansion, on en déduit, par le théorème d’addition des harmoniques sphériques, que le problème peut être traité en utilisant les projections du flux sur une base d’harmoniques sphériques qui vérifient la propriété d’orthogonalité de l’Eq. (1.10) c’est à dire

$$\int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\psi \mathcal{R}_{l'}^{m'}(\mu, \psi) \mathcal{R}_l^m(\mu, \psi) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (\text{II.1})$$

Cette relation découle directement des relations d'orthogonalités suivantes

$$I_{m,m'}^\psi = \int_0^{2\pi} d\psi \mathcal{T}_m(\psi) \mathcal{T}_{m'}(\psi) = \pi(1 + \delta_{m,0}) \delta_{m,m'}, \quad (\text{II.2})$$

et

$$I_{l,l'}^{\mu,m} = \int_{-1}^1 d\mu P_l^m(\mu) P_{l'}^m(\mu) = \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \delta_{l,l'}. \quad (\text{II.3})$$

Le problème qui peut se poser alors est d'avoir une quadrature numérique de l'angle solide qui respecte ces propriétés pour le degré d'anisotropie du problème considéré, c'est à dire pour $0 \leq m \leq l \leq L$. Ceci est nécessaire pour garantir que la conservation des neutrons soit numériquement respectée. En effet, si l'on considère un schéma d'intégration qui respecte l'Eq. (2.17), l'Eq. (2.16) de conservation peut être réécrite sous la forme, $\forall l \in [0, L], \forall m \in [-l, l]$,

$$\sum_{l'=0}^L \frac{(2l'+1)}{4\pi} \sum_{m'=-l'}^{l'} Q_{l'(j)}^{m'} \int d^2\Omega \mathcal{R}_{l'}^{m'}(\hat{\Omega}) \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \left(\int_{\pi\hat{\Omega}} d^2p \sum_{k=1}^K \delta_{j,N_k} L_k(\vec{T}) \right) = V_j Q_{l(j)}^m. \quad (\text{II.4})$$

Si l'on considère maintenant que, par renormalisation par angle des lignes d'intégration, $\tilde{V}_j(\hat{\Omega}) = \int_{\pi\hat{\Omega}} d^2p \sum_{k=1}^K \delta_{j,N_k} L_k(\vec{T}) \stackrel{\text{ren.}}{=} V_j$, on retrouve simplement la condition d'orthogonalité des harmoniques sphériques qui précède.

Il faut insister sur le fait que ce lien direct entre l'orthogonalité des harmoniques sphériques et la conservation des neutrons n'est vrai que pour un schéma d'intégration qui respecte l'Eq. (2.17). C'est le cas des schémas SC, DD, SLC utilisés dans ce projet (c.f. Annexe III). Par ailleurs, la renormalisation par angle est nécessaire pour obtenir cette relation.

Dans cette annexe, on s'intéresse à dériver des conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une quadrature de l'angle solide vérifie ces propriétés. On se place dans

le cadre d'une quadrature produit c'est à dire que l'angle azimuthal ψ et l'angle polaire $\theta = \cos^{-1} \mu$ font l'objet de deux quadratures séparées. On considère, pour

l'angle azimuthal, une quadrature sur $]0, 2\pi[$ construite par symétrie à partir

d'une quadrature à N_a points $(\psi_i, w_i^\psi)_{i \in [1, N_a]}$ sur $]0, \pi/2[$;

le cosinus de l'angle polaire, une quadrature sur $] -1, 1[$ construite par symétrie

à partir d'une quadrature à N_p points $(\mu_i, w_i^\mu)_{i \in [1, N_p]}$ sur $]0, 1[$.

II.1.1 Quadrature azimuthale

On commence par réécrire l'Eq. (II.2) en se ramenant à une intégrale sur $]0, \pi/2[$ sous la forme

$$I_{m, m'}^\psi = \int_0^{\pi/2} d\psi (f(\psi) + f(-\psi) + f(\pi - \psi) + f(-(\pi - \psi))), \quad (\text{II.5})$$

où $f(\psi) = \mathcal{T}_m(\psi)\mathcal{T}_{m'}(\psi)$ sont des fonctions 2π -périodiques. Cette manipulation est cohérente avec la quadrature numérique étant donnée sa construction par symétrie à partir de l'intervalle $]0, \pi/2[$.

On distingue alors trois cas :

- si $f(\psi) = \cos m\psi \cos m'\psi$ alors $f(\pi - \psi) = (-1)^{m+m'} f(\psi)$, $f(-\psi) = f(\psi)$

et on obtient

$$I_{m, m'}^\psi = 2(1 + (-1)^{m+m'}) \int_0^{\pi/2} d\psi f(\psi), \quad (\text{II.6})$$

- si $f(\psi) = \cos m\psi \sin m'\psi$ alors $f(\pi - \psi) = (-1)^{m+m'+1} f(\psi)$, $f(-\psi) = -f(\psi)$

et on obtient

$$I_{m, m'}^\psi = (1 - 1)(1 + (-1)^{m+m'}) \int_0^{\pi/2} d\psi f(\psi), \quad (\text{II.7})$$

- si $f(\psi) = \sin m\psi \sin m'\psi$ alors $f(\pi - \psi) = (-1)^{m+m'} f(\psi)$, $f(-\psi) = f(\psi)$

et on obtient

$$I_{m,m'}^\psi = 2(1 + (-1)^{m+m'}) \int_0^{\pi/2} d\psi f(\psi). \quad (\text{II.8})$$

On voit que, quelle que soit la quadrature choisie, l'Eq. (II.7) est vérifiée $\forall m, m' \in [0, L]$ tandis que les Eqs. (II.6) et (II.8) sont vérifiées $\forall m, m' \in [0, L]$ si $(m + m')$ est impair. Par conséquent, les intégrales que la quadrature azimuthale doit préserver sont celles des Eqs. (II.6) et (II.8) pour $(m + m')$ pair. Ceci est équivalent à préserver

$$\int_0^{\pi/2} d\psi \cos(m + m')\psi \quad 0 \leq m' \leq m \leq L, \quad (\text{II.9})$$

$$\int_0^{\pi/2} d\psi \cos(m - m')\psi \quad 0 < m' \leq m \leq L. \quad (\text{II.10})$$

Ainsi, au final, la condition sur la quadrature azimuthale est la préservation des intégrales

$$I_n^\psi = \int_0^{\pi/2} d\psi \cos 2n\psi = \frac{\pi}{2} \delta_{n0}, \quad (\text{II.11})$$

pour $n \in [0, L]$ soit un ensemble de $L + 1$ contraintes. Notons que cette condition contient la condition de normalisation des poids ($n = 0$) invariablement imposée à une quadrature. Ce jeu de contraintes est similaire à celui dérivé dans [Sanchez et al., 2002] pour un milieu infini, homogène mais jusqu'à l'ordre L au lieu de $L/2$.

Par exemple, une quadrature sur $]0, \pi/2[$ construite à partir d'une quadrature de Gauss-Tchebychev sur $] - \pi/2, \pi/2[$ i.e.

$$\left(\psi_i = \frac{\pi}{2N_a} \left(i - \frac{1}{2} \right), w_i^\psi = \frac{\pi}{2N_a} \right)_{i \in [1, N_a]},$$

permet d'intégrer correctement I_n^ψ pour $n \in [0, 2N_a - 1]$. Ainsi, une telle quadrature est conservative si $N_a \geq \frac{L + 1}{2}$.

II.1.2 Quadrature polaire

D'abord, en utilisant la définition des fonctions de Legendre associées de l'Eq. (1.13), on obtient

$$\int_{-1}^1 d\mu P_l^m(\mu) P_{l'}^m(\mu) = \int_{-1}^1 d\mu (1 - \mu^2)^m \frac{d^m P_l}{d\mu^m}(\mu) \frac{d^m P_{l'}}{d\mu^m}(\mu). \quad (\text{II.12})$$

c'est à dire l'intégrale d'un polynôme de degré $0 \leq (l + l') \leq 2L$. Comme les polynômes de Legendre $(P_l)_{l \in [0, 2L]}$ forment une base des polynômes de degré inférieur ou égal à $2L$, la condition sur l'intégrale précédente revient à préserver les intégrales suivantes

$$\int_{-1}^1 d\mu P_l(\mu), \quad (\text{II.13})$$

pour $l \in [0, 2L]$. En se ramenant à une intégrale sur $]0, 1[$, on obtient

$$(1 + (-1)^l) \int_0^1 d\mu P_l(\mu). \quad (\text{II.14})$$

Cette manipulation est cohérente avec la quadrature numérique étant donnée sa construction par symétrie à partir de l'intervalle $]0, 1[$.

Ainsi, au final, la condition sur la quadrature polaire est de préserver les intégrales

$$I_k^\mu = \int_0^1 d\mu P_{2k}(\mu) = \delta_{k0}, \quad (\text{II.15})$$

pour $k \in [0, L]$ soit un ensemble de $L + 1$ contraintes. Comme dans le cas de l'angle azimuthal, cette condition contient la condition de normalisation des poids. Encore une fois, ce jeu de contraintes est similaire à celui dérivé dans [Sanchez et al., 2002] pour un milieu infini, homogène mais jusqu'à l'ordre L au lieu de $L/2$.

Par exemple, une quadrature sur $]0, 1[$ construite à partir d'une quadrature de

Gauss-Legendre (G-L) $(\mu_i^G, w_i^G)_{i \in [1, N_p]}$ sur $] -1, 1[$ i.e.

$$\left(\mu_i = \frac{1}{2}(\mu_i^G - 1), w_i^\mu = \frac{1}{2}w_i^G \right)_{i \in [1, N_p]},$$

permet d'intégrer correctement I_k^μ pour $k \in [0, N_p - 1]$. Ainsi, une telle quadrature est conservative si $N_p \geq L + 1$.

II.2 Une application : quadrature polaire optimisée pour MOC en 2D

Pour des calculs 2D, il y a un fort intérêt à trouver des quadratures polaires «optimales» qui permettent de limiter le nombre d'angles nécessaires pour avoir des résultats convergés. Des quadratures de ce type sont basées sur le lien qui existe entre CP et MOC (basée sur le schéma SC) dans le cadre de la diffusion isotrope et ont été introduites dans [Leonard & McDaniel, 1995]. On peut montrer qu'avec la méthode des caractéristiques, l'intégration du flux scalaire sur le tracking revient, lorsque la diffusion est isotrope, à la sommation de quantités proportionnelles à

$$q_j^k = \frac{1}{\tau_k} (Ki_{A3}(\tau_j^{k-1}) - Ki_{A3}(\tau_j^{k-1} + \tau_k)), \quad (\text{II.16})$$

où

$$Ki_{An}(\tau) = \sum_{i=1}^{N_p} w_i^\mu \eta_i^{n-2} e^{\frac{-\tau}{\eta_i}}, \quad (\text{II.17})$$

avec $\eta_i = \sqrt{1 - \mu_i^2}$.

On voit que Ki_{An} n'est rien d'autre qu'une évaluation par quadrature de la fonction de Bickley-Naylor [Lewis & Miller, 1993]

$$Ki_n(\tau) = \int_0^1 d\eta \frac{\eta^{n-1}}{\sqrt{1 - \eta^2}} e^{\frac{-\tau}{\eta}} = \int_0^1 d\mu (1 - \mu^2)^{\frac{n-2}{2}} e^{\frac{-\tau}{\sqrt{1 - \mu^2}}}. \quad (\text{II.18})$$

Ainsi, l'erreur d'évaluation par une quadrature des quantités q_j^k s'écrit

$$\delta q_j^k = \frac{1}{\tau_k} (E_3(\tau_j^{k-1}) - E_3(\tau_j^{k-1} + \tau_k)), \quad (\text{II.19})$$

où $E_n(\tau) = Ki_{An}(\tau) - Ki_n(\tau)$.

L'approche introduite dans [Leonard & McDaniel, 1995] consiste à construire une quadrature polaire de manière à minimiser cette erreur.

Avant de discuter de la question de la minimisation, il faut d'abord choisir la quantité à minimiser. On peut bien sûr chercher à minimiser directement E_3 en remarquant que

$$|\delta q_j^k| \leq \frac{2}{\tau_k} \|E_3\|_\infty, \quad (\text{II.20})$$

où $\|E_3\|_\infty = \max_{\tau \in [0, \tau_{\max}]} (E_3(\tau))$.

En fait, comme mentionné dans [Leonard & McDaniel, 1995], il est préférable a priori de minimiser E_2 car

$$|\delta q_j^k| \leq \|E_2\|_\infty. \quad (\text{II.21})$$

Pour de faibles parcours optiques τ_k , cela se voit facilement en écrivant le développement de Taylor à l'ordre 1 de Ki_{A3} en τ_j^{k-1} i.e.

$$Ki_{A3}(\tau_j^{k-1} + \tau_k) = Ki_{A3}(\tau_j^{k-1}) + \tau_k \frac{dKi_{A3}}{d\tau}(\tau_j^{k-1}). \quad (\text{II.22})$$

Comme $\frac{dKi_{A3}}{d\tau} = -Ki_{A2}$, on a

$$q_j^k = -\frac{dKi_{A3}}{d\tau}(\tau_j^{k-1}) = Ki_{A2}(\tau_j^{k-1}). \quad (\text{II.23})$$

Les Figures II.1 et II.2 présentent $\delta_{ij} = \left| \frac{E_3(\tau_j) - E_3(\tau_i)}{\tau_j - \tau_i} \right|$ en fonction de τ_j et

τ_i pour deux quadratures différentes avec $N_p = 2$. À la Fig. II.1 (resp. II.2), la quadrature minimise E_2 (resp. E_3) par la procédure décrite au § II.2.2. Le maximum est localisé sur la ligne $\tau_j = \tau_i$ où $\delta_{ij} = |E_2(\tau_i)|$. On voit que l'erreur maximale pour $|\delta q_j^k|$ est plus faible lorsque E_2 est minimisée. Ainsi, de ce point de vue, il est plus avantageux, non pas de minimiser l'erreur dans l'évaluation de Ki_3 mais l'amplitude de variation de cette erreur. Remarquons que la minimisation de E_3 a été préférée dans [Tabuchi et al., 2005].

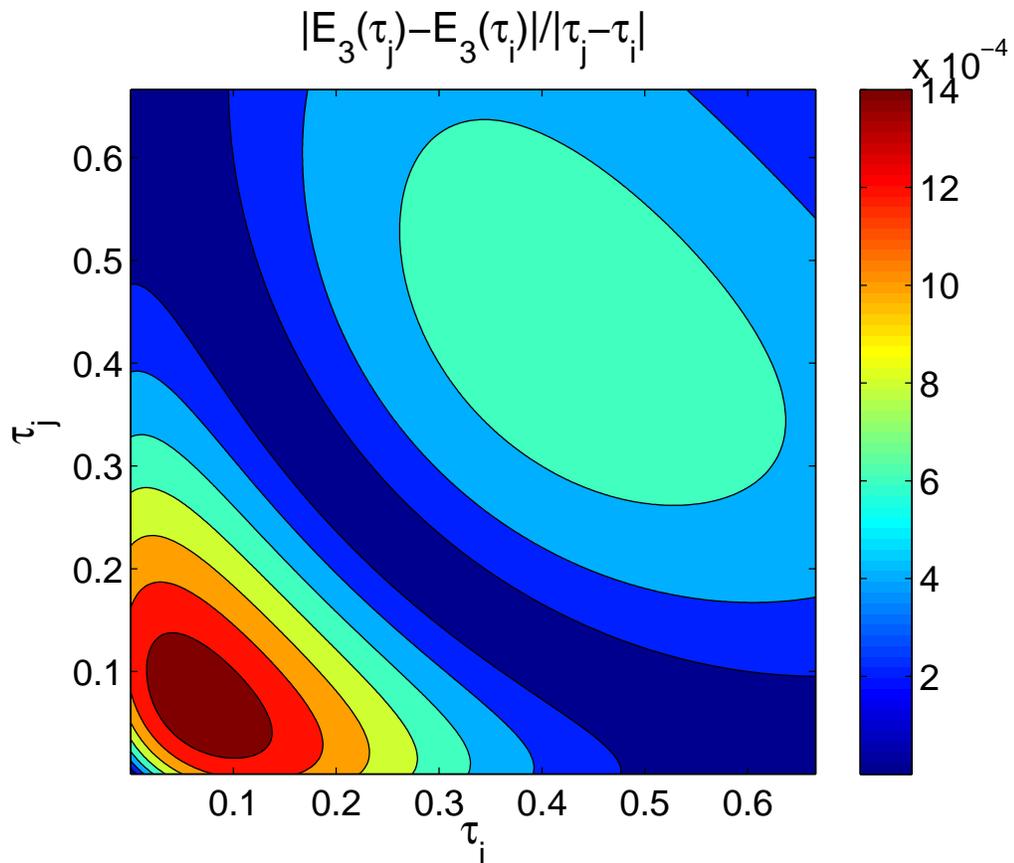


FIG. II.1 $|\delta_{ij}|$ pour une quadrature par minimisation de E_2 à $N_p = 2$ angles

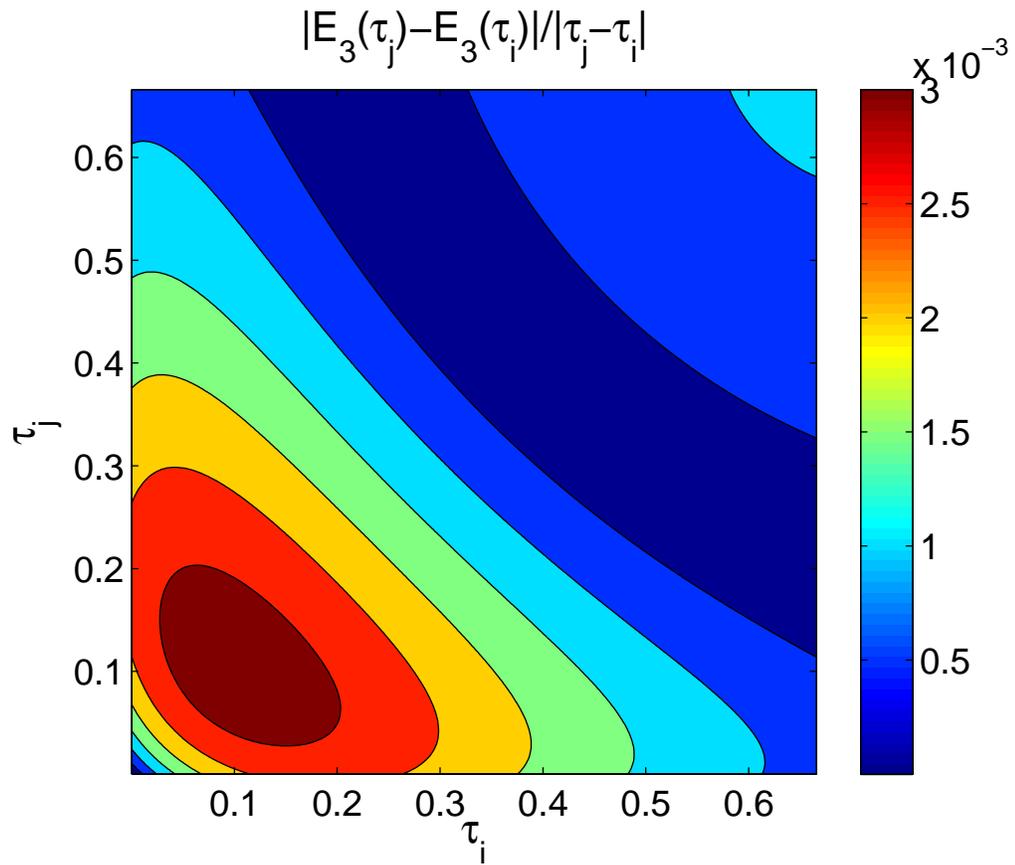


FIG. II.2 $|\delta_{ij}|$ pour une quadrature par minimisation de E_3 à $N_p = 2$ angles

Pour la minimisation de E_n , deux approches sont proposées dans [Leonard & McDaniel, 1995] bien que seule la seconde soit utilisée.

II.2.1 Première approche : quadrature de Gauss optimisée (G-O)

On dérive une quadrature de Gauss avec comme fonction de poids $W(\eta) = \frac{\eta^{n-1}}{\sqrt{1-\eta^2}}$ qui apparaît dans la définition de Ki_n . C'est à dire que l'on dérive une quadrature

qui vérifie

$$\sum_{i=1}^{N_p} w_i^\mu \eta_i^{k+n-2} = I_k \text{ pour } k \in [1, 2N - 1], \quad (\text{II.24})$$

$$\text{et } \sum_{i=1}^{N_p} w_i^\mu = 1, \quad (\text{II.25})$$

$$\text{où } I_k = \int_0^1 d\eta \eta^k \frac{\eta^{n-1}}{\sqrt{1-\eta^2}}.$$

De plus, comme $I_k = \int_0^1 d\mu (1 - \mu^2)^{\frac{n-2+k}{2}}$ est préservée pour $k \in [1, 2N - 1]$,

pour $n = 1$ **ou** $n = 2$, une telle quadrature préserve l'intégrale des polynômes τ^{2k} et donc P_{2k} où $k \in [0, N_p - 1]$. Ainsi, cette quadrature est conservative pour $N_p \geq L + 1$;

pour $n = 3$, une telle quadrature préserve l'intégrale des polynômes P_{2k} où $k \in [0, N_p]$. Ainsi, cette quadrature est conservative pour $N_p \geq L$;

pour $n \geq 4$, une telle quadrature n'est pas conservative car a priori, elle ne conserve pas l'intégrale du polynôme P_2 .

Dans [Lee & Cho, 2006], cette quadrature, optimisée pour $n = 2$, a été utilisée et a donné de meilleurs résultats que la seconde approche proposée dans [Leonard & McDaniel, 1995] dans les cas hétérogènes (présence de mécanismes de contrôle).

II.2.2 Seconde approche : quadrature optimisée par minimisation (OP_L)

Soit n fixé, il s'agit de minimiser directement E_n ce que l'on peut exprimer formellement comme la minimisation de la fonctionnelle [Sanchez et al., 2002]

$$F((w_i^\mu, \eta_i)_{i \in [1, N_p]}) = \int_0^{\tau_{\max}} d\tau (E_n(\tau))^2. \quad (\text{II.26})$$

sur le domaine $]0, 1[^{2N_p}$ sous la contrainte $\sum_{i=1}^{N_p} w_i^\mu = 1$, avec τ_{\max} fixé. En pratique, la minimisation peut être réalisée sans contrainte sur un espace de dimension $(2N_p - 1)$; en effet, w_1^μ peut être exprimé par $w_1^\mu = 1 - \sum_{i=2}^{N_p} w_i^\mu$.

Cette approche peut être raffinée en gardant à l'esprit la question de la conservation lorsque la diffusion est anisotrope.

II.2.2.1 Minimisation avec contraintes P_L

Dans ce projet, on propose pour résoudre ce problème de minimiser la fonctionnelle précédente mais en ajoutant les contraintes de conservation pour un ordre L d'anisotropie fixé, c'est à dire les $L + 1$ contraintes de l'Eq. (II.15). Cela suppose donc un ordre de quadrature $N_p > \frac{L + 1}{2}$. Remarquons qu'à l'ordre P_0 , on retrouve uniquement la contrainte de normalisation des poids.

À l'ordre P_1 , on peut simplifier ces contraintes en exprimant w_1^μ et η_1 en fonction des autres poids et points sous la forme

$$w_1^\mu = s_0, \quad (\text{II.27})$$

$$\eta_1 = \sqrt{\frac{s_2}{w_1^\mu}}, \quad (\text{II.28})$$

où $s_0 = 1 - \sum_{i=2}^{N_p} w_i^\mu$, $s_2 = \left(\frac{2}{3} - \sum_{i=2}^{N_p} w_i^\mu \eta_i^2 \right)$. La minimisation est alors faite sur un espace de dimension $(2N_p - 2)$.

À l'ordre P_2 , de la même manière, on peut exprimer η_1 , w_1^μ et w_2^μ en fonction des

autres poids et points sous la forme

$$\eta_1 = \eta_2 \sqrt{\frac{s_2 - s_4}{s_0 - s_2}}, \quad (\text{II.29})$$

$$w_1^\mu = \frac{s_0 - s_2}{1 - \left(\frac{\eta_1}{\eta_2}\right)^2}, \quad (\text{II.30})$$

$$w_2^\mu = s_0 - w_1^\mu, \quad (\text{II.31})$$

$$\text{où } s_0 = 1 - \sum_{i=3}^{N_p} w_i^\mu, \quad s_2 = \frac{1}{\eta_2^2} \left(\frac{2}{3} - \sum_{i=3}^{N_p} w_i^\mu \eta_i^2 \right), \quad s_4 = \frac{1}{\eta_2^4} \left(\frac{8}{15} - \sum_{i=3}^{N_p} w_i^\mu \eta_i^4 \right).$$

Pour un ordre général P_L , une minimisation sous contraintes devient nécessaire.

II.2.3 Comparaison des quadratures

Pour $n = 2$, les caractéristiques des différentes quadratures proposées sont présentées au Tableau II.1 tandis que les points et poids correspondant à ces quadratures pour $N_p = 2$ et $N_p = 3$ sont donnés au Tableau II.2. τ_{\max} est fixé à 2.0 pour la procédure de minimisation. Notons que OP₀ n'est pas exactement la quadrature proposée dans [Leonard & McDaniel, 1995] étant donné que la procédure de minimisation est différente.

Quadrature	P_L autorisé	Description
OP ₀	0	Minimisation sans contrainte
OP ₁	1	Minimisation avec contrainte P_1
OP ₂	2	Minimisation avec contrainte P_2
G-O	$N_p - 1$	Gauss optimisée ($W(\eta) = \frac{\eta^{n-1}}{\sqrt{1-\eta^2}}$)
G-L	$N_p - 1$	Gauss-Legendre ($W(\eta) = 1$)

TAB. II.1 Résumé des différentes quadratures polaires

	w_i^μ	η_i
OP ₀	0.133934	0.273889
	0.866066	0.859707
OP ₁	0.194406	0.340183
	0.805594	0.894215
OP ₂	0.260968	0.406136
	0.739032	0.918605
G-O	0.250547	0.399374
	0.749453	0.914448

$N_p = 2$

	w_i^μ	η_i
OP ₀	0.017620	0.099812
	0.188561	0.395534
	0.793819	0.891439
OP ₁	0.029991	0.131209
	0.250860	0.478170
	0.719149	0.920079
OP ₂	0.300851	0.549375
	0.046524	0.165302
	0.652625	0.938315
G-O	0.085302	0.231156
	0.341456	0.639973
	0.573242	0.954497

$N_p = 3$

TAB. II.2 Les différentes quadratures comparées

II.2.3.1 Comparaison par rapport à E_2

D'abord, nous présentons une comparaison des différentes quadratures du point de vue de l'évaluation des fonctions de Bickley-Naylor. Les Figures II.3 et II.4 présentent $E_2(\tau)$ pour les différentes quadratures optimisées à $N_p = 2$ et 3 points respectivement en comparaison des quadratures de Gauss-Legendre à $2N_p$ et $3N_p$ points.

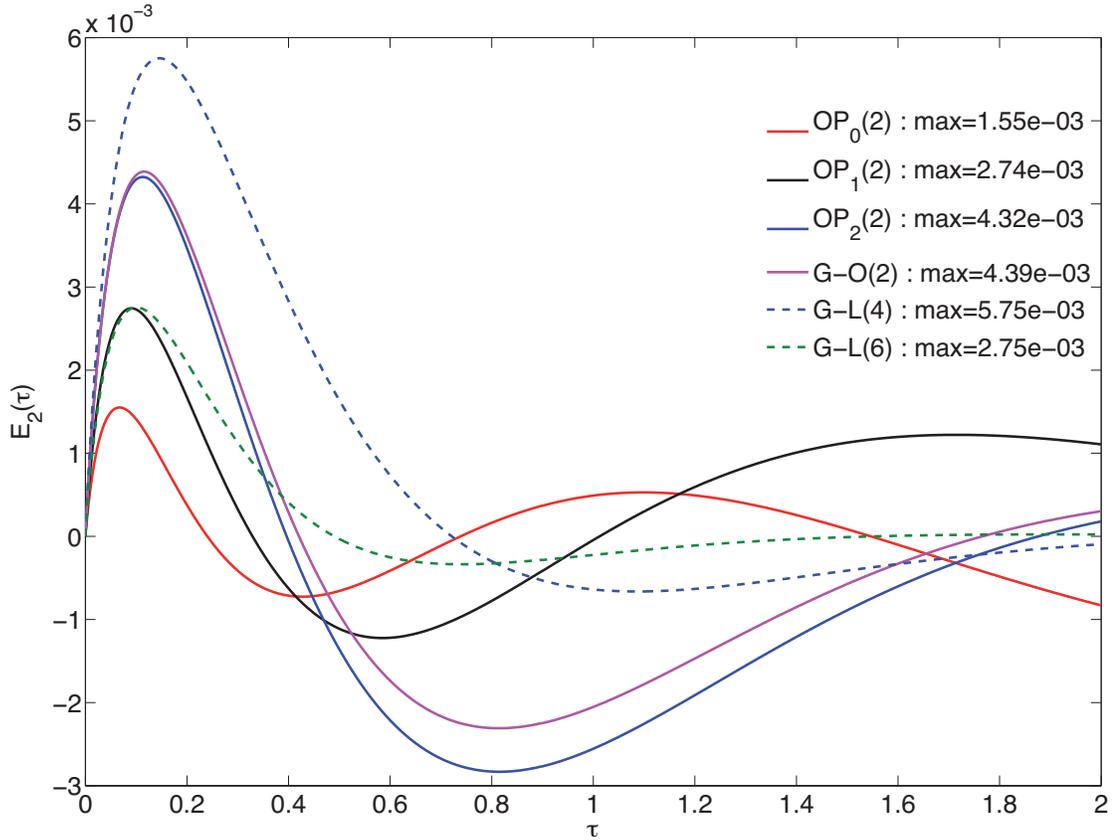


FIG. II.3 Comparaison des diverses quadratures pour $N_p = 2$

Sur leur domaine d'optimisation $[0, \tau_{\max}]$, les quadratures OP_0 sont logiquement les meilleures de ce point de vue et les contraintes ajoutées pour les quadratures $OP_{L \in \{1,2\}}$ dégradent la minimisation de l'erreur. Cependant, pour $N_p = 2$, la quadrature $OP_2(2)$ offre tout de même une bonne minimisation ; avec un seul degré de liberté, elle est aussi performante que la quadrature $G-O(2)$ qui n'est conservative que jusqu'à l'ordre d'anisotropie $L = 1$. Remarquons que toutes ces quadratures optimales, tout en réduisant l'erreur maximale sur $|E_2(\tau)|$ ont tendance à créer de plus grandes oscillations (vis à vis du maximum) pour $\tau > 0.6$ contrairement aux quadratures $G-L$ pour lesquelles l'erreur est largement concentrée dans la région $\tau < 0.6$.

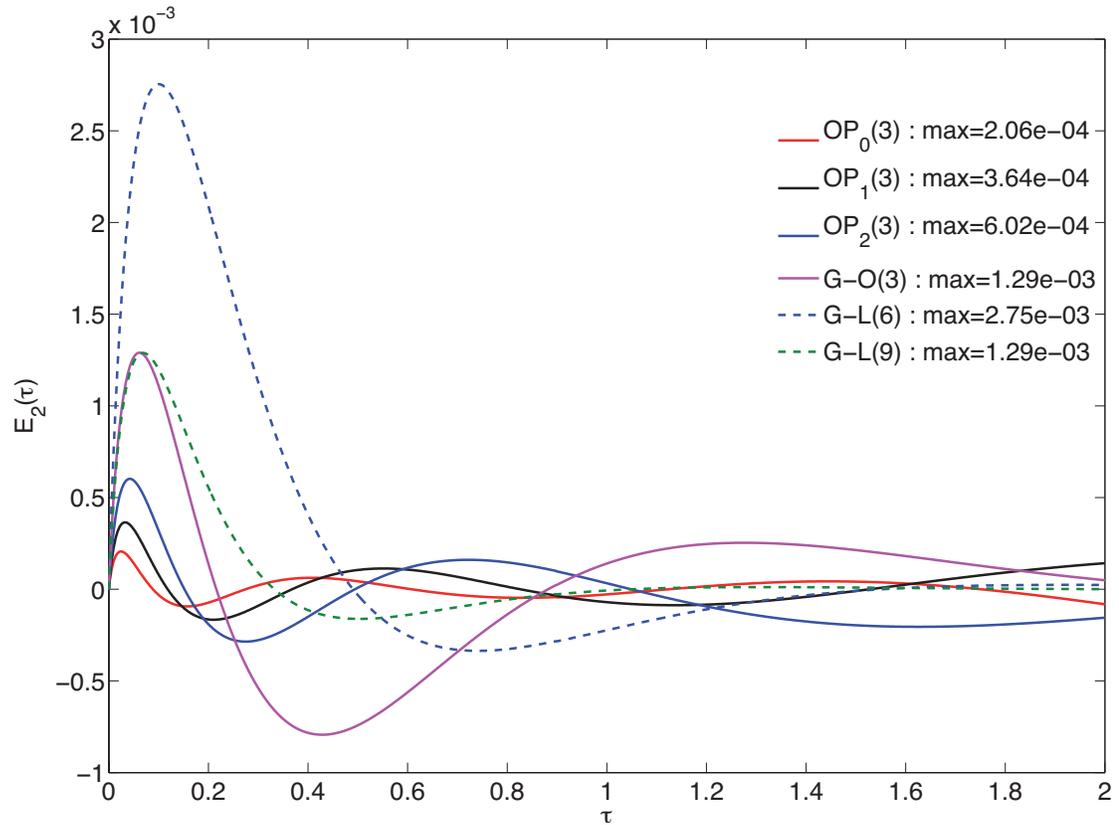


FIG. II.4 Comparaison des diverses quadratures pour $N_p = 3$

II.2.3.2 Comparaison sur un benchmark 2D

Pour terminer cette discussion sur la question de la quadrature polaire pour la méthode des caractéristiques en 2D, on présente une comparaison de ces différentes quadratures pour le calcul à valeur propre du 2^{ème} benchmark de l'Annexe IX. La discrétisation consiste en un maillage 12×12 dans chaque maille de la géométrie i.e. $n_{\text{split}} = 12$. Les paramètres fixes du tracking 2D sont une densité uniforme de 5 cm^{-1} et 8 angles uniformément répartis dans $[0, \pi/2]$ (tels que présentés au § II.1.1). Le critère de convergence sur les flux est fixé à 10^{-6} . Les cas avec diffusion isotrope et linéairement anisotrope sont traités.

Quadrature(N_p)	cas P_1			cas P_0		
	δk_{eff}	$\bar{\epsilon}$	(ϵ_{max})	δk_{eff}	$\bar{\epsilon}$	(ϵ_{max})
OP ₀ (2)	+151.2	0.3498	(0.5210)	+122.6	0.2854	(0.4532)
OP ₀ (3)	+91.4	0.1931	(0.3186)	+74.5	0.1568	(0.2782)
OP ₀ (4)	+40.3	0.0791	(0.1243)	+33.1	0.0632	(0.1060)
OP ₁ (2)	-52.6	0.1451	(0.3543)	-43.0	0.1343	(0.3326)
OP ₁ (3)	-9.9	0.0357	(0.0775)	-7.9	0.0320	(0.0732)
OP ₁ (4)	-3.4	0.0134	(0.0283)	-3.0	0.0121	(0.0265)
G-O(2)	+19.4	0.0612	(0.0909)	+16.1	0.0553	(0.0848)
G-O(3)	-0.1	0.0007	(0.0010)	+0.1	0.0008	(0.0014)
G-O(4)	-0.1	0.0003	(0.0006)	-0.2	0.0003	(0.0007)
G-L(2)	-175.7	0.4622	(0.7431)	-147.2	0.4383	(0.6805)
G-L(4)	-10.1	0.0205	(0.0492)	-8.5	0.0204	(0.0453)
G-L(8)	-0.9	0.0030	(0.0055)	-0.8	0.0023	(0.0056)
G-L(12)	-0.4	0.0010	(0.0018)	-0.1	0.0008	(0.0014)

G-L(64) est prise comme référence.

TAB. II.3 Résultats pour la première configuration du benchmark 2D

La différence en k_{eff} ainsi que les écarts relatifs moyens et maximaux sur le taux d'absorption par maille sont présentés au Tableau II.3 pour les différentes quadratures, à différents ordres, en comparaison de G-L(64).

On voit clairement dans ce cas que la quadrature OP₀ donne de mauvais résultats, non seulement dans le cas anisotrope mais aussi dans le cas isotrope. Ceci est dû à l'importante dimension optique de cette géométrie; en effet, le chemin optique entre deux régions τ_i^k le long d'une trajectoire peut largement sortir de l'intervalle d'optimisation $[0, \tau_{\text{max}} = 2.0]$ utilisé pour générer cette quadrature. Ainsi, si l'on

gène une telle quadrature avec $\tau_{\max} = 20.0$, on améliore grandement les résultats ; les erreurs sur le k_{eff} et le taux d'absorption sont divisées par deux environ. La situation est meilleure avec la quadrature OP_1 ; la contrainte ajoutée favorise cette quadrature pour de larges parcours optiques. Finalement, dans ce cas, la meilleure quadrature est la quadrature G-O qui présente une convergence très rapide.

Quadrature(N_p)	cas P_1			cas P_0		
	δk_{eff}	$\bar{\epsilon}$	(ϵ_{\max})	δk_{eff}	$\bar{\epsilon}$	(ϵ_{\max})
OP ₀ (2)	+4.0	0.2765	(0.4638)	+3.9	0.2684	(0.4472)
OP ₀ (3)	+20.8	0.1307	(0.1375)	+20.6	0.1277	(0.1375)
OP ₀ (4)	+9.7	0.0574	(0.0592)	+9.5	0.0557	(0.0580)
OP ₁ (2)	-135.9	0.2789	(0.7029)	-134.6	0.2734	(0.6787)
OP ₁ (3)	-7.1	0.0199	(0.0374)	-7.1	0.0196	(0.0358)
OP ₁ (4)	-0.8	0.0052	(0.0061)	-0.9	0.0051	(0.0059)
G-O(2)	-199.8	0.5529	(1.0336)	-198.0	0.5443	(0.9975)
G-O(3)	-43.6	0.1497	(0.2258)	-43.2	0.1454	(0.2180)
G-O(4)	-8.8	0.0533	(0.0782)	-8.8	0.0518	(0.0753)
G-L(2)	-894.3	2.2737	(4.6261)	-886.0	2.2054	(4.4639)
G-L(4)	-290.6	0.5811	(1.5033)	-288.0	0.5675	(1.4511)
G-L(8)	-72.8	0.1736	(0.3768)	-72.1	0.1700	(0.3637)
G-L(12)	-27.0	0.0699	(0.1396)	-26.7	0.0684	(0.1347)

G-L(64) est prise comme référence.

TAB. II.4 Résultats pour la deuxième configuration du benchmark 2D

Dans un second exemple, on réduit la taille de la maille de l'assemblage de 40.0 à 4.0 cm tout en augmentant la densité du tracking de 5 à 50 cm^{-1} de manière à conserver un même niveau de raffinement du tracking. En réduisant la taille de la

géométrie, on augmente largement les fuites et on obtient un problème plus lent à converger du point de vue de la quadrature polaire. Au Tableau II.4, on présente les résultats dans cette deuxième configuration. Les performances de la quadrature OP_0 sont meilleures dans le cas de cette géométrie plus petite, spécialement si l'on observe la convergence lente de la quadrature G-L. La quadrature G-O donne une convergence légèrement plus lente que OP_0 . Dans ce cas, la meilleure quadrature est OP_1 .

Il est intéressant de remarquer que dans ces deux configurations, les cas avec diffusion isotrope et anisotrope se comportent de la même manière vis à vis des différentes quadratures polaires. Bien que la conservation des particules ne soit pas exactement assurée par la quadrature OP_0 , le bilan n'est pas sérieusement biaisé sur ce benchmark linéairement anisotrope. En effet, de larges écarts n'apparaissent généralement que pour de plus hauts ordres d'expansion. Par exemple, dans [Vaglio-Gaudard et al., 2006] qui traite d'assemblages ABWR, le biais dans la balance neutronique avec la quadrature OP_0 n'apparaît que pour une diffusion $P_{L \geq 4}$. Cependant, on observe que l'intégration exacte de certains polynômes pairs imposée par les contraintes pour la conservation des particules améliore grandement la convergence des quadratures pour de larges chemins optiques. Quoi qu'il en soit, la contrainte de conservation des particules est un critère intéressant pour la définition d'une quadrature.

Avec ces deux exemples, on a couvert la gamme des performances observées et consignées dans la littérature avec la quadrature OP_0 , allant de très bonnes performances [Goldberg et al., 1995] à des résultats largement biaisés (§ 4.2 de [Roy, 1999]). Comme on l'a vu, la quadrature G-O proposée dans [Leonard & McDaniel, 1995] et la quadrature OP_L introduite ici semble être des alternatives intéressantes qui assurent la conservation des particules lorsque la diffusion est anisotrope. En pratique, il pourrait être intéressant de faire le calcul d'optimisation pour obtenir

les quadratures OP_L au sein du code de réseau de manière à ajuster τ_{\max} à la valeur maximale de la dimension optique du cas à traiter.

II.3 Les quadratures 3D

On se place ici dans le cadre des quadratures «level-symmetric» [Lathrop & Carlson, 1964] et celles qui en dérivent. Par level-symmetric, on fait référence aux quadratures qui sont invariantes par permutation des axes de coordonnées. Une telle quadrature d'ordre n compte $\frac{n(n+2)}{8}$ angles par octant de la sphère unité. On note $(\mu_i)_{i \in [1, n/2]}$ les $n/2$ valeurs que peuvent prendre les projections de ces directions sur les axes. Les conditions de symétrie réduisent largement le nombre de degrés de liberté dans le choix de la quadrature. Comme montré dans [Lathrop & Carlson, 1964], on a uniquement $m = n/2$ degré de liberté :

- μ_1 , dont le choix impose par là même les autres $(\mu_i)_{i \in [2, m]}$,
- $m - 1$ poids car, étant donné les symétries, les différentes directions obtenues par permutations de (μ_i, μ_j, μ_k) pour $i + j + k = m + 2$ ont le même poids associé.

Au sein de DRAGON, on a accès à une telle quadrature [Marleau et al., 2006a] notée LS_n où tous les degrés de libertés ont été utilisés pour intégrer exactement les $n/2 + 1$ premiers polynômes de Legendre d'ordre pair. Remarque : il est possible de conserver $n/2 + 1$ intégrales avec seulement $n/2$ degrés de liberté car par symétrie, la normalisation des poids garantit l'intégration exacte de P_2 .

Par ailleurs, de nombreuses quadratures sont dérivées en relaxant les contraintes de symétrie. Une telle quadrature où les poids sont tous égaux est donnée dans [Carlson, 1971] ; c'est la quadrature EQ_n disponible dans DRAGON.

En pratique, on a observé que ces deux quadratures sont conservatives pour $n \geq L/2$.

ANNEXE III

SCHÉMAS D'INTÉGRATION SPATIALE LE LONG D'UNE TRAJECTOIRE

Dans cette annexe, on s'attache à la question du schéma d'intégration spatiale le long d'une trajectoire pour la méthode des caractéristiques. Comme on l'a vu au Chapitre 2, le flux angulaire doit être intégré le long de chaque caractéristique du tracking. Dans ce cadre, MOC est invariablement basée sur une hypothèse de source plate telle que décrite au Chapitre 2 lors de la présentation de cette méthode ; on parle alors du schéma SC. Une exception intéressante est le code MCG3D [Suslov, 1993]. De nombreux benchmarks, y compris le benchmark C5G7 MOX ont été calculés avec une méthode d'intégration basée sur le schéma «Diamond Differencing» (DD) avec une technique de «fix-up» pour remédier au problème de positivité d'un tel schéma. Ce fix-up est basé sur le principe des dérivées quasi-stationnaires (QSD) [Suslov, 1997, Suslov, 2005] ; le problème est qu'il est inconsistant avec les méthodes d'accélération et dégrade largement les performances en temps de calcul.

L'équation de transport dans sa forme caractéristique de l'Eq. (2.14) est analogue à la formulation de la méthode aux ordonnées discrètes en géométrie 1D à plaques. Il est donc naturel de penser utiliser un des nombreux schémas d'intégration introduit dans ce contexte [Alcouffe et al., 1979]. En pratique, une approche directe comme celle-là est limitée par le fait que l'équation de transport doit être résolue pour toutes les lignes d'intégration du tracking ; ainsi, tout stockage supplémentaire induit par un schéma d'intégration le long d'une trajectoire conduit à un stockage supplémentaire proportionnel à la taille du tracking. Par conséquent, un schéma doit être adapté au contexte MOC pour limiter ce surcoût.

Une telle tentative a été réalisée dans [Santandrea & Sanchez, 2002b] ; un schéma basé sur une représentation linéaire de la source (LC) à l'intérieur de chaque région, le long de chaque trajectoire, a été dérivé. Il est basé sur des sources surfaciques construites à partir des moments du flux évalués aux interfaces entre les différentes régions ; le stockage est proportionnel au nombre d'interfaces fois le nombre de moments du flux. Ce schéma «Linear Surface» (LS) n'est pas conservatif mais à donner de bons résultats sur le benchmark de Stepanek présenté à l'Annexe IX (c.f. 1er benchmark). Dans ce même article, de manière à assurer la conservation, une renormalisation a été testée avec le schéma «NonLinear Surface» (NLS) ; si ce schéma a donné de très bons résultats en terme de convergence spatiale, sa nature non-linéaire empêche l'utilisation efficace des méthodes d'accélération synthétiques et par la même limite son intérêt pratique. Récemment, dans [Santandrea & Mosca, 2006], en suivant un raisonnement analogue à celui exposé dans cette annexe*, le schéma «Conservative Linear Surface» (CLS) a été testé ; il reproduit les propriétés de convergence spatiale du schéma NLS tout en étant linéaire. Son utilisation pour des applications pratiques semble prometteuse mais aucune discussion sur les coûts de calcul n'est donnée dans [Santandrea & Mosca, 2006]. Notons qu'une telle discussion est présente dans [Santandrea & Sanchez, 2002b] pour les schémas LS et NLS ; le surcoût induit par ces schémas est grand, de l'ordre de 150% pour LS pour un nombre comparable d'itérations à SC. Par ailleurs, le stockage proportionnel au nombre d'interfaces du domaine peut être important et comme pour les méthodes d'accélération DP_I , ces schémas dépendent de la procédure d'analyse de la géométrie étant donné qu'ils se basent sur des données d'interfaces.

Dans cette annexe, on présente une comparaison de trois schémas, SC, DD et un schéma introduit dans ce projet, le schéma «Simplified Linear Characteristic»

*Les travaux reportés dans [Santandrea & Mosca, 2006] et [Le Tellier & Hébert, 2006d] ont été menés en parallèle ; bien que la présentation faite dans [Santandrea & Mosca, 2006] soit bien différente de celle faite ici, la conservation est imposée de la même manière.

(SLC). Par ailleurs, on s'attache à faire le lien avec les autres travaux précédemment mentionnés. Remarquons qu'aucun fix-up n'est employé pour les schémas DD et SLC de manière à ne pas perturber leurs propriétés de convergence. Les tests incluent un cas analytique 1D, deux benchmarks mono-énergétiques 2D et finalement, un des assemblages BWR du Chapitre 7.

III.1 Présentation des schémas DD et LC

On présente ici le schéma DD puis les différents schémas dérivés de l'approximation linéaire de la source LC, en particulier, le schéma SLC introduit dans ce projet.

III.1.1 Schéma DD

Le schéma DD est très utilisé avec les méthodes aux ordonnées discrètes depuis leur apparition. Il est basé sur la balance de l'Eq. (2.15) et la relation de fermeture suivante

$$\bar{\phi}_k = \frac{\phi_{k+1} + \phi_k}{2}. \quad (\text{III.1})$$

On obtient alors des solutions pour ϕ_{k+1} et $\bar{\phi}_k$ qui ont la même forme que celles présentées aux Eqs. (2.19) et (2.20) mais avec

$$A_k^{\text{DD}} = \frac{2 - \tau_k}{2 + \tau_k}, \quad (\text{III.2})$$

$$B_k^{\text{DD}} = \frac{2L_k}{2 + \tau_k}, \quad (\text{III.3})$$

$$C_k^{\text{DD}} = \frac{L_k^2}{2 + \tau_k}. \quad (\text{III.4})$$

Le schéma DD est directement applicable avec la MOC. Comme mentionné dans

[Suslov, 1997], ce schéma peut être dérivé du schéma SC par une approximation de Padé(1,1) de la fonction exponentielle. De ce point de vue, ce schéma apparaît comme une simplification du schéma SC. Cependant, cette façon de voir n'est pas satisfaisante car le schéma DD s'est montré plus précis que le schéma SC pour une large gamme d'applications avec les méthodes S_N . Cela va être clarifié dans la section suivante.

III.1.2 Schémas linéaires

Une autre classe de schémas est basée sur une représentation linéaire de la source à l'intérieur d'une région. La source est ainsi écrite comme

$$q_k(s) = \bar{q}_k + \left(s - \frac{L}{2}\right)q_k^1. \quad (\text{III.5})$$

De là, l'intégration analytique de l'Eq. (2.14) donne

$$\phi_{k+1}(\vec{T}) = \phi_k(\vec{T})A_k^{\text{SC}} + (Q_{N_k} + q_k^1 B_k^{\text{LC}}) B_k^{\text{SC}}, \quad (\text{III.6})$$

$$L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) = \phi_k(\vec{T})B_k^{\text{SC}} + Q_{N_k} C_k^{\text{SC}} + q_k^1 C_k^{\text{LC}}, \quad (\text{III.7})$$

où

$$B_k^{\text{LC}} = L_k \left(\frac{1}{1 - A_k^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau_k} - \frac{1}{2} \right), \quad (\text{III.8})$$

$$C_k^{\text{LC}} = \frac{1}{\Sigma_{tN_k}} \left(\frac{L_k B_k^{\text{SC}}}{2} - C_k^{\text{SC}} \right), \quad (\text{III.9})$$

sont des fonctions continues sur $]0, +\infty[$ qui peuvent être prolongées par continuité sur $[0, +\infty[$ (c.f. les développements de Taylor de l'Annexe V lorsque $\tau \rightarrow 0$).

Dans ce cadre, le schéma LS, introduit dans [Santandrea & Sanchez, 2002b], est

totalement basé sur des sources surfaciques pour la représentation linéaire de la source dans une région. Avec ce schéma, on a

$$\bar{q}_k(\vec{T}) = \frac{1}{V_{N_k}} \int_{\pi_{\hat{\Omega}}} d^2p \sum_h \delta_{N_k, N_h} L_h(\vec{T}) \frac{q(\vec{r}_h, \hat{\Omega}) + q(\vec{r}_h + L_h \hat{\Omega}, \hat{\Omega})}{2}. \quad (\text{III.10})$$

Ce schéma ne satisfait pas l'Eq. (2.17) et n'est pas conservatif. Par contre, la positivité du schéma est garantie. Le schéma NLS est dérivé du schéma LS par renormalisation de manière à imposer l'Eq. (2.17) ; par là même, il perd le caractère linéaire du schéma LS. Plus récemment, Santandrea est revenu sur ce schéma en imposant la conservation par l'Eq. (2.17) et en utilisant les sources surfaciques pour le calcul de la pente q_k^1 par

$$q_k^1(\vec{T}) = \frac{1}{V_{N_k}} \int_{\pi_{\hat{\Omega}}} d^2p \sum_h \delta_{N_k, N_h} L_h(\vec{T}) \frac{q(\vec{r}_h + L_h \hat{\Omega}, \hat{\Omega}) - q(\vec{r}_h, \hat{\Omega})}{2}. \quad (\text{III.11})$$

Par rapport au schéma LS précédent, on a un degré de liberté supplémentaire qui permet d'imposer l'Eq. (2.17) : on permet une discontinuité des flux aux interfaces des segments des diverses trajectoires qui servent au calcul de la source. De cette manière, on obtient un schéma conservatif et linéaire. Remarquons tout de même qu'au passage on a perdu la positivité que garantissait le schéma LS.

Cette manière d'assurer la conservativité est justement ce que l'on a exposée dans [Le Tellier & Hébert, 2006d] et dans ce qui suit, on a choisi d'imposer l'Eq. (2.17) i.e. $\bar{q}_k = Q_{N_k}$. Les différents schémas viennent alors des différents choix pour q_k^1 .

Dans le schéma LC standard des méthodes S_N , q_k^1 est défini par

$$q_k^1 = \frac{q_k(L_k) - q_k(0)}{L_k}. \quad (\text{III.12})$$

Dans le contexte de la méthode des caractéristiques pour des géométries complexes,

un tel schéma requiert le stockage de tous les flux aux interfaces des segments $\phi_k(\vec{T})$ de manière à évaluer les sources $q_k(\vec{r}_k, \hat{\Omega})$ et $q_k(\vec{r}_{k+1}, \hat{\Omega})$ et à calculer q_k^1 . Comme on l'a déjà mentionné, une telle approche directe est inapplicable.

Comme montré dans [Suslov, 1997], si l'on considère une pente de la source proportionnelle à la pente du flux en écrivant

$$q_k^1 = \frac{\Sigma_{tN_k}}{L_k}(\phi_{k+1} - \phi_k), \quad (\text{III.13})$$

le schéma LC se réduit au schéma DD. Cette propriété est en fait reliée au principe général des dérivées quasi-stationnaires appliqué à la dérivée seconde du flux. Cette approximation linéaire intrinsèque de la source explique pourquoi ce schéma est, de manière générale, plus précis que le schéma SC (qui correspond à $q_k^1 = 0$). Cette remarque est le point de départ du fix-up proposé par Suslov pour le schéma DD.

Dans cette annexe, on introduit un nouveau schéma linéaire construit sur une représentation très simple de la pente de la source à l'intérieur d'une région. Ce schéma SLC est basé sur la continuité de la source à l'intérieur d'une région matérielle qui peut contenir plusieurs régions de calcul. Il utilise uniquement les sources moyennes par région $Q_j(\hat{\Omega})$ et ne requiert donc aucun stockage supplémentaire par rapport aux schémas SC ou DD.

On note $\Delta_k = \frac{L_{k-1} + L_k}{2}$ la distance entre les points milieux des segments $k - 1$ et k de \vec{T} . Le fait que les segments $k - 1$ et k appartiennent à une même région matérielle est noté $(k - 1) \parallel (k)$.

Dans ces conditions, si $(k - 1) \parallel (k)$, une expansion en série de Taylor du second ordre permet d'écrire

$$q_{k-1} \left(\frac{L_{k-1}}{2} \right) = q_k \left(\frac{L_k}{2} \right) - \Delta_k \frac{dq}{ds} + \frac{\Delta_k^2}{2} \frac{d^2q}{ds^2}. \quad (\text{III.14})$$

En gardant à l'esprit la représentation linéaire de la source que l'on veut utiliser, on peut donc réécrire cette relation sous la forme

$$\bar{q}_{k-1} = \bar{q}_k - \Delta_k q_k^1 + \frac{\Delta_k^2}{2} \frac{d^2 q}{ds^2}. \quad (\text{III.15})$$

De la même manière, si $(k) \parallel (k+1)$, on peut écrire

$$\bar{q}_{k+1} = \bar{q}_k + \Delta_{k+1} q_k^1 + \frac{\Delta_{k+1}^2}{2} \frac{d^2 q}{ds^2}. \quad (\text{III.16})$$

Partant de ces deux équations, le schéma SLC proposé procède en distinguant les quatre cas suivants :

- **si $(\mathbf{k} - 1) \parallel (\mathbf{k})$,**
 - **si $(\mathbf{k}) \parallel (\mathbf{k} + 1)$,** les Eqs. (III.15) et (III.16) peuvent être combinées de manière à éliminer le terme du second ordre, on obtient

$$q_k^1 = \frac{\Delta_k^2 \bar{q}_{k+1} + (\Delta_{k+1}^2 - \Delta_k^2) \bar{q}_k - \Delta_{k+1}^2 \bar{q}_{k-1}}{\Delta_{k+1} \Delta_k (\Delta_{k+1} + \Delta_k)}, \quad (\text{III.17})$$

c'est à dire une approximation du second ordre pour q_k^1 .

- **sinon,** seule l'Eq. (III.15) est valide et, en négligeant le terme d'ordre 2, on a

$$q_k^1 = \frac{\bar{q}_k - \bar{q}_{k-1}}{\Delta_k}, \quad (\text{III.18})$$

c'est à dire une approximation du premier ordre pour q_k^1 .

- **sinon,**
 - **si $(\mathbf{k}) \parallel (\mathbf{k} + 1)$,** seule l'Eq. (III.16) est valide et, en négligeant le terme d'ordre 2, on a

$$q_k^1 = \frac{\bar{q}_{k+1} - \bar{q}_k}{\Delta_{k+1}}, \quad (\text{III.19})$$

c'est à dire une approximation du premier ordre pour q_k^1 .

- **sinon**, on ne peut dériver une expression pour q_k^1 par cette approche et q_k^1 est mis à 0 (schéma SC) ou à la valeur intrinsèque du schéma DD.

III.2 Comparaison des schémas

III.2.1 Cas analytique 1D à plaques

On s'intéresse ici à un cas analytique simple en géométrie homogène 1D à plaques de manière à montrer les propriétés asymptotiques de convergence des différents schémas. On ne considère qu'une seule direction pour laquelle $s \in [0, 1]$. Le matériau est un absorbant pur avec $\Sigma_t = 10.0$ et la condition initiale pour cette équation aux dérivées ordinaires est $\phi(0) = 0.9$. La source et la solution exacte sont présentées à la Fig. III.1.

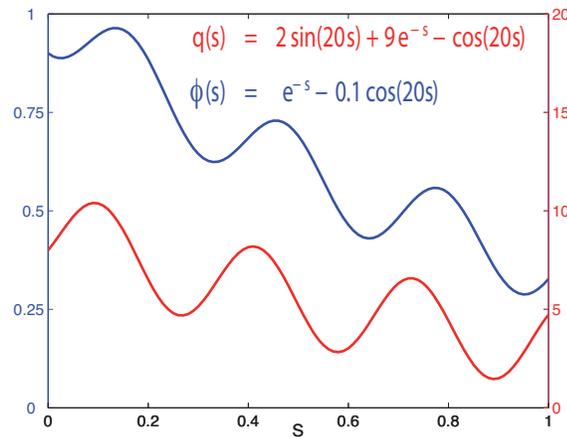


FIG. III.1 Source et solution exacte pour le flux dans le cas analytique 1D

Un maillage régulier est défini par $\Delta s = \frac{1}{K}$ où $K = N$ est le nombre de régions de calcul. On a vu que tous les schémas que l'on se propose de comparer peuvent être reliés au schéma LC avec différentes représentations de la pente de la source q_k^1 . Par

conséquent, il est intéressant de regarder le comportement de la source par région tel que modélisé par les différents schémas ; la Fig. III.2 en est un exemple pour $K = 18$. On remarque que le schéma SLC conduit à une représentation de la source proche de la formulation LC originale, même pour un discrétisation grossière. La pente intrinsèque du schéma DD, quant à elle, est une meilleure approximation que la source plate du schéma SC à l'exception des régions qui suivent un changement de signe de la dérivée de la source. Cet exemple, avec des oscillations, désavantage le schéma DD ; clairement, il n'est pas représentatif de ce que l'on rencontre dans une modélisation d'un assemblage de réacteur mais c'est un test intéressant pour les différents schémas d'intégration.

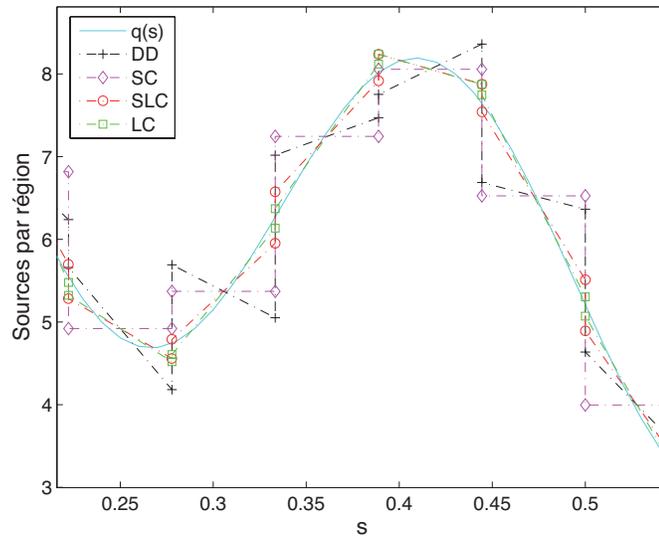


FIG. III.2 Représentation de la source par région pour les différents schémas ($N = 18$)

Les Figures III.3 et III.4 présentent la convergence spatiale des différents schémas en termes des erreurs relatives sur les flux d'interfaces ϕ_k et les flux moyens $\bar{\phi}_k$ respectivement, en normes 1 et infinie. De manière asymptotique, on parle d'ordre de convergence à l'ordre N_{sch} pour un schéma pour lequel multiplier le nombre de

régions par α permet de réduire l'erreur d'un facteur $\alpha^{-N_{sch}}$.

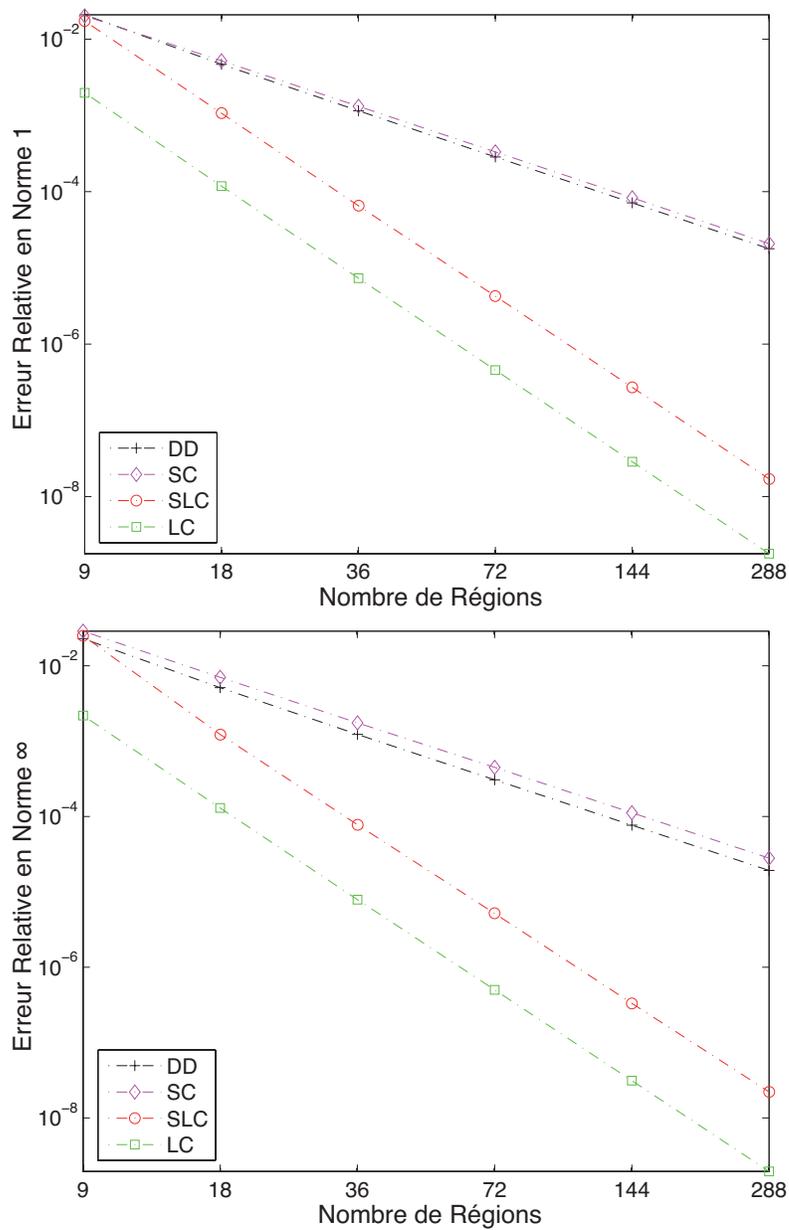


FIG. III.3 Erreurs relatives sur les flux aux interfaces des régions

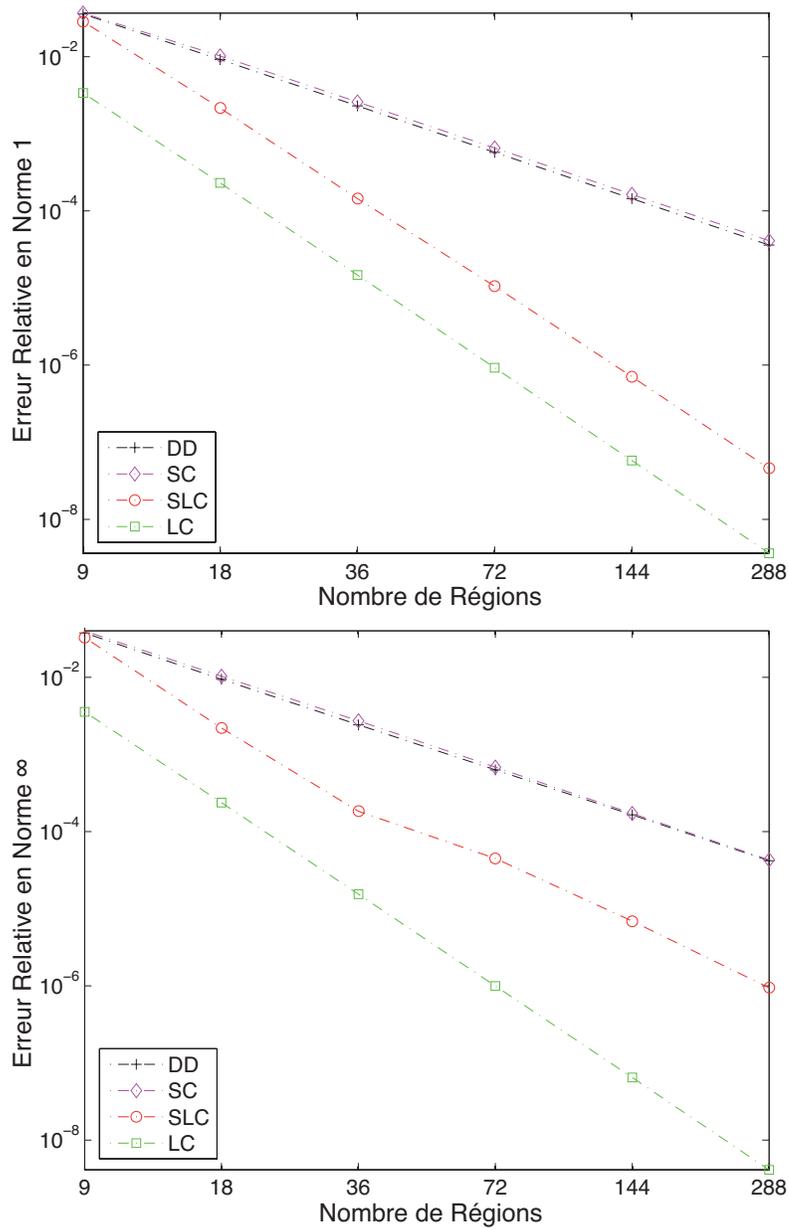


FIG. III.4 Erreurs relatives sur les flux moyens par région

Malgré les oscillations de la source, le schéma DD est encore légèrement meilleur que le schéma SC. Les deux schémas présentent une vitesse de convergence d'ordre 2 sur les flux d'interfaces et les flux moyens en normes 1 et infinie.

En ce qui concerne le schéma SLC, on voit que pour peu de régions, ses performances sont proches de celles de DD ou SC. Lorsque K augmente, il présente rapidement une vitesse de convergence asymptotique proche de celle du schéma LC, c'est à dire d'ordre 4 sur les flux d'interfaces en normes 1 et infinie et sur les flux moyens en norme 1. Il est intéressant de noter que, en ce qui concerne la norme infinie de l'erreur sur les flux moyens, la vitesse de convergence est la même que pour LC pour K plus petit que 36 mais entre 36 et 72, il y a un changement dans la pente de l'erreur.

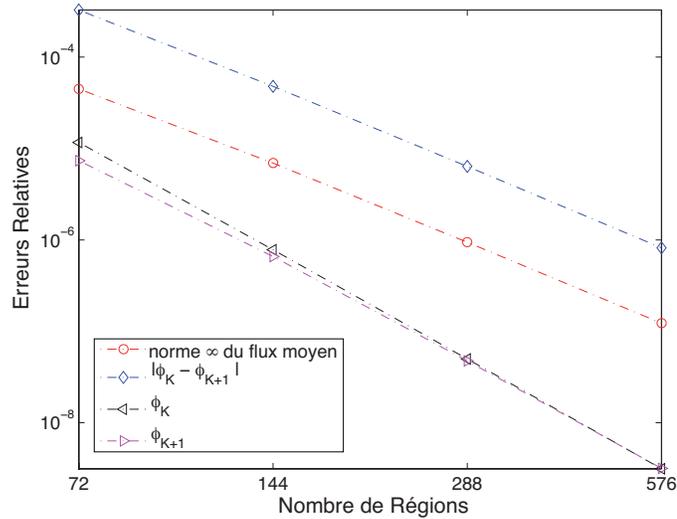


FIG. III.5 Convergence du flux moyen dans la région K pour le schéma SLC

La convergence est dégradée et asymptotiquement est proche de l'ordre 3. Asymptotiquement, cette erreur maximum sur les flux moyens est localisée dans la région K ; par conséquent, comme le flux moyen peut être exprimé à partir de la balance de l'Eq. (2.15) sous la forme

$$\bar{\phi}_k = \frac{1}{\tau_k} (\phi_k - \phi_{k+1} + L_k \bar{q}_k), \quad (\text{III.20})$$

la convergence plus lente dans la région K est directement liée à la convergence du

terme $\frac{\phi_K - \phi_{K+1}}{\tau_K}$. En fait, on observe que la vitesse de convergence de ϕ_{K+1} est légèrement moindre que celle de ϕ_K car dans la région K , le schéma SLC utilise l'Eq. (III.19), une approximation du premier ordre de q_K^1 pour calculer ϕ_{K+1} . Cet écart en vitesses de convergence est faible mais cause une convergence plus lente du terme de différence comme montré à la Fig. III.5. Le même genre d'effet est observé dans la première région pour ϕ_2 .

III.2.2 Benchmarks mono-énergétiques en géométrie 2D structurée

Ces trois schémas ont été intégrés dans une version de développement et ont été testés. Dans cette étude, les schémas SC et DD sont basés sur la première stratégie d'intégration du flux présentée à l'Annexe IV tandis que le schéma SLC n'utilise pas cette décomposition du termes de source. Un traitement asymptotique est utilisé pour les schémas SC et SLC dans cette étude. Lorsque l'on compare, le coût en tant de calcul de ces trois schémas, il ne faut pas perdre de vue que ces différences d'implantation jouent un rôle.

III.2.2.1 Problème à source

La description de ce benchmark est donnée à l'Annexe IX (c.f. 1er benchmark). Comme nous ne sommes intéressés qu'à la convergence spatiale vis à vis de l'intégration du flux le long de chaque trajectoire, des paramètres de tracking sont fixés pour toute l'étude : un pas de 0.1 cm, 8 angles azimuthaux $\in [0, \pi/2]$ et 4 angles polaires $\in [0, \pi/2]$ uniformément répartis.

Les résultats sont présentés au Tableau III.1 lorsque l'on raffine le maillage de 16×16 à 128×128 pour les trois schémas.

Flux mix 1	16×16	32×32	64×64	128×128
SC	-9.37	-4.57	-1.67	-0.47
DD	-6.42	-2.65	-0.91	-0.24
SLC	-3.30	-1.65	-0.64	-0.17
Flux mix 2	16×16	32×32	64×64	128×128
SC	39.72	21.52	8.38	2.52
DD	31.01	13.59	4.89	1.42
SLC	3.71	3.15	1.61	0.48
Flux mix 3	16×16	32×32	64×64	128×128
SC	-16.04	-8.12	-3.03	-0.86
DD	-11.03	-4.69	-1.62	-0.43
SLC	-5.35	-2.77	-1.10	-0.29
Flux mix 4	16×16	32×32	64×64	128×128
SC	47.82	26.05	10.13	2.96
DD	38.67	17.09	6.05	1.66
SLC	14.39	8.02	3.38	0.93
Flux mix 5	16×16	32×32	64×64	128×128
SC	27.31	16.33	6.29	1.63
DD	19.71	8.85	2.91	0.57
SLC	27.18	13.06	4.67	1.16
Taux de fuite	16×16	32×32	64×64	128×128
SC	445.41	151.11	42.25	10.27
DD	185.66	56.07	16.05	3.52
SLC	135.39	52.50	16.71	3.95

La référence est le maillage 256×256 avec le schéma SLC.

TAB. III.1 Erreurs relatives (%) sur les flux scalaires et le taux de fuite pour le benchmark de Stepanek

Les flux scalaires moyens par médium et le taux de fuite par la frontière externe sont comparés. Les erreurs relatives sont calculées par rapport à la configuration 256×256 avec le schéma SLC.

On voit que les schémas DD et SLC donnent de meilleurs résultats que le schéma standard SC. Dans les régions matérielles de 1 à 4, SLC donne les meilleurs résultats. Par contre, pour le flux dans le médium 5 et le taux de fuite, le schéma DD est plus précis. Cette dégradation des résultats avec SLC près de la frontière externe du domaine est cohérente avec ce qui a été observé dans le cas 1D précédent.

Il est intéressant de noter que le schéma SLC donne des résultats comparables à ceux du schéma LS tels que reportés dans [Santandrea & Sanchez, 2002b] tout en étant conservatif et en ne demandant aucun stockage supplémentaire.

La comparaison des différents schémas en termes de temps de calcul est reportée aux cas suivants. En effet, sur ce benchmark avec un maillage grossier, le temps CPU est trop faible pour pouvoir faire des comparaisons intéressantes.

III.2.2.2 Problème à valeur propre

On s'intéresse ici à l'étude du second benchmark de l'Annexe IX. Les paramètres fixes du tracking sont : un pas de 0.2 cm, 8 angles azimuthaux $\in [0, \pi/2]$ uniformément répartis et 4 angles polaires de type Gauss-Legendre.

Les résultats lorsque l'on raffine le maillage de chaque cellule de l'assemblage sont présentés au Tableau III.2 pour les trois schémas en termes de la différence sur le k_{eff} et les écarts moyen $\bar{\epsilon}$ et maximum ϵ_{max} sur le taux d'absorption par région matérielle en prenant le maillage 30×30 par cellule avec le schéma SLC comme référence.

Les comportements en convergence vis à vis du k_{eff} sont proches de ce qui a été

observé dans le cas précédent. Asymptotiquement, les résultats avec le schéma SC pour un maillage $2n \times 2n$ sont proches de ceux du schéma SLC pour un maillage $n \times n$; le schéma DD donne des résultats intermédiaires. En ce qui concerne le taux d'absorption, les conclusions sont similaires si ce n'est que les résultats du schéma DD sont très proches de ceux du schéma SC.

Maillage	Δk_{eff} (pcm)			$\bar{\epsilon}$ (%)			ϵ_{max} (%)		
	SC	DD	SLC	SC	DD	SLC	SC	DD	SLC
2×2	1380.7	1123.1	747.5	3.38	3.36	2.11	5.84	5.81	3.05
6×6	178.7	145.9	104.2	0.44	0.44	0.29	0.75	0.76	0.41
10×10	66.1	54.2	39.1	0.16	0.16	0.11	0.28	0.28	0.15
14×14	32.6	26.5	18.8	0.08	0.08	0.05	0.14	0.14	0.08
18×18	20.1	16.4	11.7	0.05	0.05	0.03	0.09	0.09	0.05
22×22	12.3	9.8	6.7	0.03	0.03	0.02	0.05	0.05	0.03
26×26	7.0	5.2	3.0	0.02	0.02	0.01	0.03	0.03	0.01
30×30	3.0	1.7	-	0.01	0.01	-	0.01	0.01	-

La référence est le maillage 30×30 avec le schéma SLC.

TAB. III.2 Analyse de la convergence pour le problème à valeur propre

En termes de temps de calcul, comme montré au Tableau III.3, le surcoût du schéma SLC en comparaison du schéma SC décroît de 78 % à 36 % lorsque l'on raffine le maillage. Le schéma DD est légèrement plus rapide que le schéma SC avec un gain d'environ 5 %. De ce point de vue, le schéma DD est une bonne alternative au schéma SC standard car il est plus rapide et plus précis; par contre, le schéma SLC est handicapé par son surcoût de calcul dans cette exemple. Il est intéressant de noter que la méthode ACA pour l'accélération des itérations fonctionne aussi bien pour les trois schémas : le nombre de calculs de flux du Tableau III.3 est presque le même pour les trois schémas à un maillage donné. Comme le schéma SLC est

basé sur l'Eq. (2.17) et est donc conservatif, **ACA** (basé sur le schéma SC) donne une accélération aussi bonne qu'avec le schéma SC. Il n'apparaît pas nécessaire de dériver une version de **ACA** basée sur le schéma SLC bien que cela soit possible.

Maillage	N_{calc}^a			Temps CPU (s.)			δ_t^b (%)	
	SC	DD	SLC	SC	DD	SLC	DD	SLC
2×2	35	35	37	9	9	16	0.0	77.8
6×6	51	51	51	35	32	61	-8.6	74.3
10×10	52	52	52	59	55	105	-6.8	78.0
14×14	52	52	52	92	85	157	-7.6	70.7
18×18	52	52	52	138	131	220	-5.1	59.4
22×22	52	52	52	198	186	295	-6.1	49.0
26×26	52	52	52	276	261	386	-5.4	39.9
30×30	52	52	52	370	355	504	-4.1	36.2

^a Nombre total de calculs de flux,

^b Différence relative en temps CPU par rapport au schéma SC.

TAB. III.3 Nombre d'itérations et temps de calcul pour le problème à valeur propre

III.2.3 Assemblage BWR-MOX en géométrie 2D non-structurée

On s'intéresse maintenant à l'assemblage BASALA-H du Chapitre 7 dans le cadre du calcul du flux multigroupe sur un assemblage réaliste. Dans l'étude paramétrique du Chapitre 7, les résultats se sont montrés assez sensibles à la discrétisation du caloporteur. Par conséquent, on se propose ici de faire l'étude de convergence par rapport à ce paramètre avec les trois schémas d'intégration. On reprend les quatre configurations de la Fig. 7.2. Par ailleurs, le traitement de l'assemblage reprend les paramètres de la configuration de base du Chapitre 7 mais avec des conditions

blanches aux frontières et un tracking non-cyclique.

Lorsque l'on s'intéresse à des maillages non-structurés comme ceux de cet assemblage, la comparaison entre divers schémas d'intégration n'est pas directe. Dans cette étude, les différents schémas ne convergent pas exactement vers les mêmes résultats étant donné que le raffinement n'est pas uniforme sur la géométrie et n'affecte que le caloporteur. Par conséquent, dans un tel cas, l'indicateur des performances d'un schéma d'intégration est sa vitesse de convergence et la référence pour chaque schéma est le résultat dans la configuration \mathcal{C}_4 avec ce même schéma. Dans cette configuration, remarquons que SC, DD, SLC donnent des k_{eff} en dedans de 45 pcm, un écart lié à la discrétisation du combustible.

Les résultats de convergence par rapport au k_{eff} sont donnés au Tableau III.4. Les tendances observées dans les cas simples précédents sont reproduites sur cet assemblage réaliste. Le schéma SLC donne les meilleurs résultats, le schéma DD est proche et le schéma SC est le plus lent à converger. On s'est aussi intéressé aux taux de fission thermique ; dans la configuration \mathcal{C}_1 , les écart relatifs moyens par rapport à la configuration \mathcal{C}_4 sont de 0.11%, 0.09%, 0.05% pour SC, DD et SLC respectivement. Dans les configurations \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_3 , ces écarts sont inférieurs à 0.05% pour les trois schémas.

Le Tableau III.4 présente aussi le coût de ces différentes configurations en termes du ratio en temps CPU en comparaison du calcul avec le schéma SC dans la configuration \mathcal{C}_4 . Pour un maillage donné, le schéma DD est le moins coûteux. Pour ces gros tests, le surcoût induit par le schéma SLC est plutôt limité, 22 % dans la configuration \mathcal{C}_1 et 15 % dans la configuration \mathcal{C}_4 .

Config.	Δk_{eff}^a (pcm)			t^b ($N_{\text{track}}^c - N_{\text{calc}}^d$)		
	SC	DD	SLC	SC	DD	SLC
\mathcal{C}_1	120.3	63.1	41.4	0.41 (23-3956)	0.40 (23-3956)	0.50 (23-3956)
\mathcal{C}_2	28.1	8.6	3.5	0.70 (26-4472)	0.62 (24-4128)	0.81 (26-4472)
\mathcal{C}_3	6.7	-1.9	-3.2	0.74 (23-3956)	0.72 (23-3956)	0.78 (21-3612)
\mathcal{C}_4	0.0	0.0	0.0	1.00 (23-3956)	0.98 (23-3956)	1.15 (23-3956)

^a La référence est la configuration 4 pour chaque schéma,

^b Ratio en temps CPU en comparaison de \mathcal{C}_4 avec le schéma SC (148 min),

^c Nombre de lecture du tracking,

^d Nombre total d'intégrations de flux,

TAB. III.4 Analyse de convergence pour l'assemblage BASALA-H

Dans les configurations \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_3 , le nombre total de calculs de flux varient légèrement d'un schéma à l'autre et SC est désavantagé. Si l'on considère une convergence à 50 pcm, SLC dans la configuration \mathcal{C}_1 est la meilleure option et induit un gain de 29 % en temps en comparaison de SC dans la configuration \mathcal{C}_2 . Pour une convergence à 10 pcm, DD dans la configuration \mathcal{C}_2 est un bon choix; il est 16 % plus rapide que SC dans la configuration \mathcal{C}_3 .

En conclusion, les schémas SLC et DD sont des alternatives intéressantes au schéma SC pour ces calculs sur des assemblages réalistes.

ANNEXE IV

STRATÉGIES D'INTÉGRATION DU FLUX

Dans cette annexe, on s'intéresse à la manière optimale en pratique de mener l'intégration des moments du flux sur le tracking. À ce niveau, se pose la question du traitement asymptotique pour de faibles parcours optiques. En ce sens, deux approches sont proposées : la première est une stratégie d'intégration optimisée compatible avec un tel traitement tandis que la deuxième est optimisée en faisant fi du cas du vide et repose entièrement sur la précision numérique de la machine pour traiter les faibles parcours optiques. La nécessité d'un traitement asymptotique est discutée.

IV.1 Première approche

Un processus d'intégration direct basé sur les Eqs. (2.19) et (2.20) est coûteux. Il peut être raffiné de manière à réduire son coût en temps de calcul et d'améliorer la stabilité numérique tout en conservant un traitement asymptotique.

Si l'on remplace l'Eq. (2.20) et la définition de la source de l'Eq. (2.18) dans l'Eq. (2.6), on obtient

$$\Phi_{l(j)}^m = \sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{l'} (2l'+1) Q_{l'(j)}^{m'} p_{jj}^{l \leftarrow l', m \leftarrow m'} + \check{\Phi}_{l(j)}^m, \quad (\text{IV.1})$$

où

$$p_{jj}^{l \leftarrow l', m \leftarrow m'} = \frac{1}{V_j} \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j, N_k} C_k^{\text{SC}} \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \mathcal{R}_{l'}^{m'}(\hat{\Omega}), \quad (\text{IV.2})$$

$$\check{\Phi}_{l(j)}^m = \frac{1}{V_j} \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j, N_k} \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) B_k^{\text{SC}} \phi_k(\vec{T}). \quad (\text{IV.3})$$

On a décomposé les moments angulaires du flux de la région j en deux termes : la contribution de la source interne à la région et la contribution des neutrons entrant à la frontière de la région. Dans le cas de la diffusion isotrope, cette décomposition est présentée dans [Wu & Roy, 2003a] comme point de départ pour la dérivation de la méthode d'accélération SCR présentée au § 4.5.1.

Pour une région convexe, les quantités $p_{jj}^{l \leftarrow l', m \leftarrow m'}$ ne sont rien d'autres que les probabilités de collision d'une région dans elle-même, exprimées dans le formalisme de la méthode des caractéristiques.

Avec une telle décomposition, on peut calculer à l'avance ces quantités. Ainsi, durant chaque balayage du tracking pour l'intégration du flux, on ne calcule que $\check{\Phi}_{l(j)}^m$ par sommation sur les lignes d'intégration ; à la fin, la contribution de la source est ajoutée en utilisant la relation de l'Eq. (IV.1). Par conséquent, durant la sommation sur le tracking, pour chaque segment, on a à évaluer uniquement les coefficients A_k^{SC} et B_k^{SC} . Cette décomposition est proposée par [Sanchez & Chetaine, 2000] mais dans cette implémentation, la contribution de la source est présentée sous la forme

$$\sum_n \Pi_i(\hat{\Omega}_n) Q_i(\hat{\Omega}_n),$$

où $\hat{\Omega}_n$ sont les directions correspondant à la quadrature angulaire du tracking. Cette approche n'utilise pas le fait que la dépendance angulaire de la source est représentée à l'aide d'une décomposition en harmoniques sphériques. Par conséquent,

dans cette formulation, les coefficients Π_i doivent être stockés pour chaque angle de la quadrature.

Pour un ordre d'anisotropie limité, notre approche par modes angulaires est moins coûteuse en termes de stockage. En effet, on n'a pas à stocker les probabilités pour tous les modes $(l, m) \leftarrow (l', m')$; on peut utiliser les propriétés suivantes :

- $p_{jj}^{l' \leftarrow l, m' \leftarrow m} = p_{jj}^{l \leftarrow l', m \leftarrow m'}$;
- $p_{jj}^{l' \leftarrow l, m' \leftarrow m} \neq 0$ ssi. $(l + l')$ est pair.

En effet, la sommation est faite dans les directions $+\hat{\Omega}$ et $-\hat{\Omega}$ et les harmoniques sphériques vérifient $\mathcal{R}_l^m(-\hat{\Omega}) = (-1)^l \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega})$ [Roy, 1991].

Ainsi, la connection entre les modes dépend directement de la parité de l i.e. un mode n'est connecté qu'avec des modes qui ont la même parité en l . On notera N_p (resp. N_i) le nombre de modes pairs (resp. impairs) pour un ordre d'anisotropie L donné. Par symétrie, le nombre N_{pjj} de probabilités à calculer par région est donc

$$N_{pjj} = \frac{N_p(N_p + 1)}{2} + \frac{N_i(N_i + 1)}{2}. \quad (\text{IV.4})$$

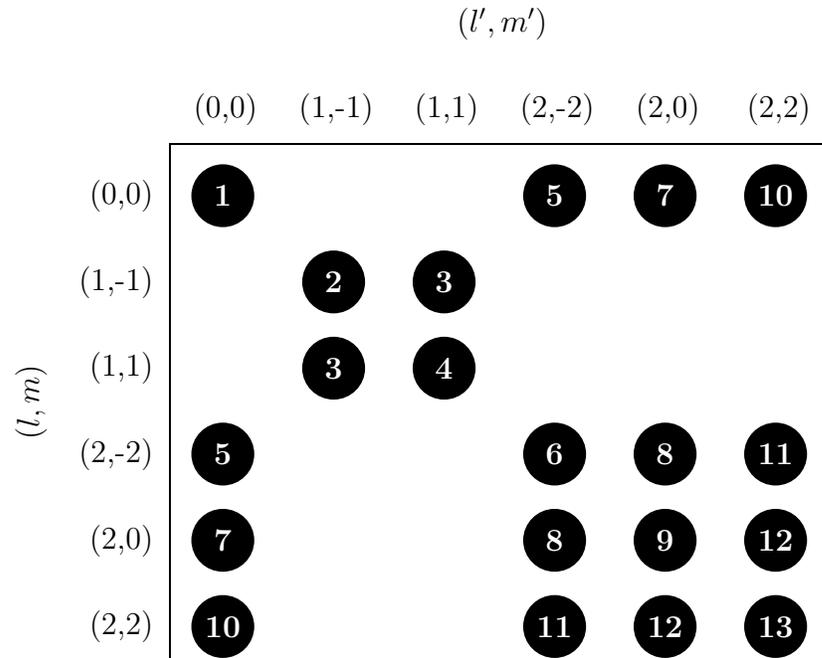
En décomposant L sous la forme $L = 2L_2 + \delta$ au sens de la division euclidienne, on obtient pour N_p et N_i les expressions données au Tableau IV.1.

	2D	3D
N_p	$(L_2 + 1)^2$	$(L + 1 - \delta)(L_2 + 1)$
N_i	$(L_2 + 1)(L_2 + 2\delta)$	$(L + 1 + \delta)(L_2 + \delta)$
total	$(L + 1)(L + 2)/2$	$(L + 1)^2$

TAB. IV.1 Nombre de modes par parité de l en géométries 2D et 3D

Pour la diffusion isotrope, on a uniquement une probabilité par région à calculer. Pour $L = 1$, on a à stocker 7 probabilités en 3D et 4 en 2D. On comprend bien

l'intérêt par rapport à un stockage proportionnel à l'ordre de la quadrature angulaire. Pourtant, à mesure que l'ordre d'anisotropie augmente, le nombre de modes interconnectés augmente rapidement et cette décomposition n'est pas adaptée pour $L > 3$.



TAB. IV.2 Diagramme des modes interconnectés ($L \leq 2$) pour une géométrie 2D

Le Tableau IV.2 donne l'exemple des modes interconnectés dans le cas d'une géométrie 2D pour $L \leq 2$. Les nombres encadrés donnent l'ordre de numérotation des modes.

IV.2 Seconde approche

Par ailleurs, une autre stratégie a été implémentée et testée. En effet, dans certaines implantations de la méthode des caractéristiques, le processus d'intégration

est simplifié par l'absence de traitement asymptotique pour des parcours optiques proches de zéro. Ainsi, si l'on considère que la section efficace totale ne s'annule pas et que la précision numérique est suffisante, le processus d'intégration peut être simplifié [Roy, 1999]. Les Eqs. (2.20) et (2.19) peuvent être réécrites sous la forme

$$\Delta_k(\vec{T}) = \tilde{A}_k^{\text{SC}} \left(\phi_k(\vec{T}) - \frac{Q_{N_k}(\hat{\Omega})}{\Sigma_{tN_k}} \right), \quad (\text{IV.5})$$

$$\phi_{k+1}(\vec{T}) = \phi_k(\vec{T}) - \Delta_k(\vec{T}). \quad (\text{IV.6})$$

avec $\tilde{A}_k^{\text{SC}} = 1 - e^{-\tau_k}$.

Les moment du flux sont alors calculés à partir de $\Delta_k(\vec{T})$ par

$$V_j \Phi_{l(j)}^m = V_j \frac{Q_{l(j)}^m}{\Sigma_j} + \frac{1}{\Sigma_j} \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j,N_k} \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \Delta_k(\vec{T}), \quad (\text{IV.7})$$

en supposant que par renormalisation par angle, $\tilde{V}_j(\hat{\Omega}) = V_j$ et en utilisant l'orthogonalité des harmoniques sphériques de l'Eq. (1.10).

Une remarque importante doit être faite ici vis à vis de l'intégration numérique des harmoniques sphériques. En effet, à l'Eq. (IV.7), on a considéré que la quadrature numérique introduite par la procédure de tracking pour le traitement de l'angle solide vérifie l'Eq. (1.10). Dans le contexte de la diffusion anisotrope, si l'on utilise une quadrature qui n'intègre pas correctement les harmoniques sphériques, cette stratégie d'intégration est directement biaisée et ses résultats peuvent dévier de manière significative de ceux obtenus avec la stratégie de décomposition présentée plus haut à l'Eq. (IV.1). Dans le cas d'une quadrature produit, des contraintes générales sont dérivées à l'Annexe II. Par exemple, dans une configuration 2D avec un développement à l'ordre 1 de la section efficace de diffusion (c.f. 2^{ème} benchmark de l'Annexe IX), une quadrature polaire qui n'intègre pas correctement la partie

polaire de l'intégrale de l'Eq. (1.10) pour $l = 1$ c'est à dire $\int_0^1 d\mu(1 - \mu^2) = \frac{2}{3}$ introduit une erreur dans l'évaluation de $\int_{4\pi} d^2\Omega \mathcal{R}_1^m(\hat{\Omega})^2 = \frac{4\pi}{3}$ et conduit à une différence appréciable entre les valeurs propres calculées par les deux stratégies d'intégration.

On voit que du point de vue coût, ce traitement est optimum car il ne requiert le calcul que d'un seul coefficient par segment du tracking (comparé à deux avec l'approche précédente) mais sa stabilité numérique est a priori discutable, même en arithmétique à double précision. En pratique, pour des calculs sans vide, cette approche a largement été utilisée [Roy, 1999, Wu & Roy, 2003b]. Pour des calculs 3D impliquant un fichier de tracking assez gros, tel que ceux présentés dans [Le Tellier et al., 2006], cette stratégie représente un gain d'environ 20 à 25% du temps de calcul du flux multigroupe en comparaison de la stratégie d'intégration précédente.

Dans le cas de régions vides, avec cette approche, il est commun de remplacer la section efficace totale qui est nulle par une valeur faible mais non nulle. Cette approche est a priori sujette à des instabilités numériques mais en pratique, seules des situations non physiques se sont révélées problématiques avec cette approche *directe* en double précision. En effet, le seul cas rencontré qui mette en défaut cette stratégie est le cas d'une source externe localisée dans une région avec une section efficace totale relativement faible. Si l'on considère une telle région j , une erreur numérique importante peut être introduite lors du calcul des moments du flux par addition de $\frac{1}{V_j \Sigma_j} \int_{\Upsilon} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{j, N_k} \mathcal{R}_l^m(\hat{\Omega}) \Delta_k(\vec{T})$ et $\frac{Q_{l(j)}^m}{\Sigma_j}$, deux quantités inversement proportionnelles à Σ_j qui deviennent, au fur et à mesure que Σ_j diminue, de signes opposés, du même ordre de grandeur. Par conséquent, on a affaire au cas le plus dommageable en matière d'arithmétique à virgule flottante, la soustraction de deux nombres très proches [Goldberg, 1991]; lorsque Σ_j est réduit, la perte de précision peut devenir très sévère. En double précision, on a observé des cas avec $\Sigma_j = 10^{-5}$

où l'erreur introduite sur le flux était de l'ordre de 10^4 fois le critère de convergence (en l'occurrence 10^{-6}). Mise à part cette situation extrême, les cas d'intérêt pratique peuvent être traités correctement avec cette approche. En effet, en double précision, un écart commence à apparaître pour le flux dans une région quasiment vide sans source pour $\Sigma_t < 10^{-14}$; pour des assemblages réalistes, le vide est correctement simulé avec une section efficace totale bien plus grande e.g. 10^{-8} .

En conclusion, dans ce projet, deux stratégies d'intégration, avec ou sans traitement asymptotique, ont été implantées. La stratégie directe a été favorisée pour les situations réalistes du processus de validation étant donné le gain en temps de calcul qu'elle apporte.

IV.3 Le calcul des coefficients d'intégration

Quelque soit la stratégie adoptée, la méthode des caractéristiques requiert le calcul de nombreuses exponentielles ce qui demande beaucoup de temps de calcul. Un moyen simple mais efficace est d'avoir recours à l'utilisation d'approximations pour ce calcul [Yamamoto et al., 2004]. La technique la plus efficace est l'utilisation de tables d'exponentielles précalculées. Différentes approches ont été testées par Yamamoto :

1. l'utilisation d'une table avec interpolation à l'ordre n : les exponentielles sont approchées par des polynômes d'ordre n (en pratique, $n \in [0, 1, 2]$);
2. l'utilisation de deux tables sans interpolation : on tire partie de la nature des fonctions exponentielles ($e^{x+y} = e^x \times e^y$); on construit deux tables, une pour les valeurs très petites avec un pas fin (e.g. sur $[-10^{-2}, 0]$ avec un pas de 10^{-5}) et une pour les autres valeurs avec un pas plus grossier (e.g. sur $[-10, -10^{-2}]$ avec un pas de 10^{-2}).

Les résultats de leur étude montrent que l'interpolation à l'ordre 1 ou 2 dans une table précalculée offre le meilleur compromis entre précision et temps de calcul. Nous avons retenu par conséquent une interpolation linéaire.

Par contre, il est avantageux de ne pas tabuler $e^{-\tau}$. Dépendamment de la stratégie adoptée, il est plus avantageux de tabuler $(1 - e^{-\tau})$ ou $(1 - e^{-\tau})/\tau$. Dans le cadre de la stratégie d'intégration sans traitement asymptotique de l'Eq. (IV.7), comme proposé dans [Wu & Roy, 2003b], une table pour $(1 - e^{-\tau})$ permet de calculer de manière optimale \tilde{A}_k^{SC} , le seul coefficient qui soit à calculer pour chaque segment du tracking. Par contre, lorsque l'on utilise la stratégie d'intégration présentée à l'Eq. (IV.1), on a à calculer les coefficients A_k^{SC} et B_k^{SC} pour chaque segment de trajectoire. Avec cette stratégie, on considère un traitement asymptotique et par conséquent, pour ne pas avoir à faire le développement de Taylor de B_k^{SC} (tel que présenté à l'Annexe V) lorsque τ est proche de 0 à chaque intégration du flux, on peut tabuler directement $(1 - e^{-\tau})/\tau$ et ainsi n'avoir recours aux développements de Taylor qu'une fois, à la construction de la table. Cette stratégie est celle recommandée dans [Sanchez & Chetaine, 2000].

ANNEXE V

DÉVELOPPEMENTS DE TAYLOR

Dans cette annexe, on présente les développements en série de Taylor en 0 de toutes les fonctions de la variable τ (chemin optique), continues sur $]0, +\infty[$ et prolongeable par continuité sur $[0, \infty[$.

V.1 Coefficients du schéma SC

(c.f. § 2.1.4)

$$\begin{aligned} A^{\text{SC}} &= e^{-\tau} &= 1 - \tau + \frac{1}{2}\tau^2 - \frac{1}{6}\tau^3 + O(\tau^4), \\ B^{\text{SC}} &= \frac{1 - e^{-\tau}}{\Sigma_t} &= L \left(1 - \frac{1}{2}\tau + \frac{1}{6}\tau^2 - \frac{1}{24}\tau^3 + O(\tau^4) \right), \\ C^{\text{SC}} &= \frac{L}{\Sigma_t} \left(1 - \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} \right) &= \frac{L^2}{2} \left(1 - \frac{1}{3}\tau + \frac{1}{12}\tau^2 - \frac{1}{60}\tau^3 + O(\tau^4) \right). \end{aligned}$$

V.2 Coefficients de l'accélération ACA

(c.f. § 4.1.5)

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 \left(\frac{1}{1 - A^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau} - \frac{1}{2} \right) &= \frac{1}{6}\tau - \frac{1}{360}\tau^3 + O(\tau^5), \\ \frac{1}{d} &= \frac{\tau}{2 + \tau\alpha} &= \frac{1}{2} \left(\tau - \frac{\tau^3}{12} + O(\tau^5) \right), \\ b &= \frac{L}{2} \left(\frac{1}{d} - \alpha \right) &= \frac{L}{6} \left(\tau - \frac{7}{60}\tau^3 + O(\tau^5) \right), \\ a &= 1 - (1 - c)\Sigma b &= 1 - \frac{1}{6}(1 - c) \left(\tau^2 - \frac{7}{60}\tau^3 + O(\tau^5) \right). \end{aligned}$$

Si l'on considère maintenant deux régions j et k consécutives le long d'une tra-

jectoire, on doit alors s'intéresser au cas où τ_j et τ_k sont proches de 0. On doit considérer alors les développements de Taylor multivariables suivant

$$\begin{aligned}\frac{a_j}{d_k} &= \frac{1}{2} \left(\tau_k - \frac{1}{6}(1 - c_j)\tau_k\tau_j^2 - \frac{1}{12}\tau_k^3 + O(\tau^5) \right), \\ \frac{b_j}{d_k} &= \frac{L_j}{12} \left(\tau_k\tau_j - \frac{7}{60}\tau_k\tau_j^3 - \frac{1}{12}\tau_k^3\tau_j + O(\tau^5) \right).\end{aligned}$$

D'un point de vue efficacité algorithmique, il est intéressant de limiter ces expansions à un ordre tel que le développement de Taylor de $\frac{a_j}{d_k}$ (resp. $\frac{b_j}{d_k}$) soit égal au produit des développements de Taylor de a_j (resp. b_j) et $\frac{1}{d_k}$ à l'ordre considéré. Ceci est valide jusqu'en $O(\tau^2)$ et en pratique, on travaille avec les développements

suivants

$$\begin{aligned}\frac{1}{d} &= \frac{\tau}{2 + \tau\alpha} = \frac{1}{2} (\tau + O(\tau^2)), \\ b &= \frac{L}{2} \left(\frac{1}{d} - \alpha \right) = \frac{L}{6} (\tau + O(\tau^2)), \\ a &= 1 - (1 - c)\Sigma b = 1 - \frac{1}{6}(1 - c) (\tau^2 + O(\tau^2)),\end{aligned}$$

qui sont compatibles avec la multiplication.

V.3 Coefficients du schéma LC

(c.f. § III.1.2)

$$\begin{aligned}B^{\text{LC}} &= L \left(\frac{1}{1 - A^{\text{SC}}} - \frac{1}{\tau} - \frac{1}{2} \right) = \frac{L}{12} \left(\tau - \frac{1}{60}\tau^3 + O(\tau^5) \right) \\ C^{\text{LC}} &= \frac{1}{\Sigma_t} \left(\frac{LB^{\text{SC}}}{2} - C^{\text{SC}} \right) = -\frac{L^3}{12} \left(1 - \frac{1}{2}\tau + \frac{3}{20}\tau^2 - \frac{1}{30}\tau^3 + \frac{1}{168}\tau^4 \right. \\ &\quad \left. + O(\tau^5) \right)\end{aligned}$$

ANNEXE VI

LES MÉTHODES DE KRYLOV

Cette annexe présente de manière succincte un panorama des différentes méthodes que recouvre le dénominateur *méthode de Krylov* afin d'éclairer le choix qui a été fait à la fois pour l'accélération de la boucle interne de MOC (c.f. § 3.2) mais aussi pour la résolution du système ACA (c.f. § 4.3). La structure de cette présentation emprunte celle de [Van Der Vorst & Sleijpen, 1998] et le contenu est basé sur les livres [Saad, 1996] et [Meurant, 1999].

Dans cette annexe, on se place dans des espaces vectoriels de type \mathbb{R}^n munis du produit scalaire standard $\langle \vec{u} = (u_i)_{i \in [1, n]} | \vec{v} = (v_i)_{i \in [1, n]} \rangle = \sum_{i=1}^n u_i v_i$ et de la norme euclidienne induite.

VI.1 Les méthodes de Ritz-Galerkin et de résidu minimum

VI.1.1 Une base orthonormale de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$

Le point de départ de ces méthodes est la construction d'une base orthonormale de l'espace $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$. D'abord, on suppose que $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ est de dimension m . En effet, si l'on suppose que $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ n'est pas une famille libre, en supposant par ailleurs que $\mathcal{K}_{m-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ est une famille libre, on a $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}) = \mathcal{K}_{m-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ et par conséquent $\vec{r}_{(m-1)} \in \mathcal{K}_{m-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$. Comme $\vec{r}_{(m-1)} \perp \mathcal{L}_{m-1}$, on a

1. dans la cas des méthodes de *Ritz-Galerkin* que $\mathcal{L}_{m-1} = \mathcal{K}_{m-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$,
2. dans la cas des méthodes de *résidu minimum* que $\mathcal{L}_{m-1} = \mathbb{A}\mathcal{K}_{m-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}) =$

$$\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}) = \mathcal{K}_{m-1}(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}),$$

il est clair que $\vec{r}_{(m-1)} = \vec{0}$.

Si l'on introduit $\mathbb{V}_m = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_m]$ la matrice dont les colonnes sont les vecteurs orthonormaux d'une base de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$, la projection sur l'espace de Krylov s'écrit

$$\vec{\Phi}_{(m)} = \vec{\Phi}^{(o)} + \mathbb{V}_m y_m \text{ où } y_m \in \mathbb{R}^m. \quad (\text{VI.1})$$

La construction de \mathbb{V}_m est basé sur l'*algorithme d'Arnoldi* (et ses variantes). Cet algorithme est basé sur le procédé d'orthonormalisation de Graam-Schmidt et est présenté à l'Algorithme VI.1

Algorithme VI.1 Algorithme d'Arnoldi

ARNOLDI()

```

1   $v_1 \leftarrow \frac{\vec{r}_{(o)}}{\|\vec{r}_{(o)}\|}$ 
2  for  $j \leftarrow 1$  to  $m$  do
3       $\hat{v}_{j+1} \leftarrow \mathbb{A}v_j$ 
4      for  $i \leftarrow 1$  to  $j$  do
5           $h_{ij} \leftarrow \langle \hat{v}_{j+1} | v_i \rangle$ 
6           $\hat{v}_{j+1} \leftarrow \hat{v}_{j+1} - h_{ij}v_i$ 
7      endfor
8       $h_{j+1j} \leftarrow \|\hat{v}_{j+1}\|$ 
9       $v_{j+1} \leftarrow \frac{\hat{v}_{j+1}}{h_{j+1j}}$ 
10 endfor
```

Ce processus peut être résumé par ($j \in [1, m]$)

$$\mathbb{A}v_j = h_{j+1 j} v_{j+1} + \sum_{i=1}^j h_{ij} v_i, \quad (\text{VI.2})$$

où les coefficients h_{ij} peuvent être réunis sous la forme d'une matrice de Hessenberg supérieure

$$\mathbb{H}_{e_j} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1j} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2j} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & h_{j j-1} & h_{j j} \end{bmatrix}.$$

Cette matrice est la projection orthogonale de \mathbb{A} sur $\mathcal{K}_j(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ i.e. $\mathbb{H}_{e_j} = \mathbb{V}_j^T \mathbb{A} \mathbb{V}_j$. Notons que lorsque m augmente, le coût de la construction de la base augmente rapidement. Dans ces conditions, il est intéressant de noter que si \mathbb{A} est symétrique, \mathbb{H}_{e_j} l'est aussi et par conséquent, \mathbb{H}_{e_j} est tridiagonale. Ainsi, chaque nouveau vecteur ne doit être orthogonalisé qu'avec les deux précédents car il est automatiquement perpendiculaire aux autres ; on parle alors d'une récurrence à trois termes ; l'algorithme d'Arnoldi est grandement simplifié.

Avec ces notations, on peut réécrire l'Eq. (VI.2) sous la forme

$$\mathbb{A} \mathbb{V}_j = \mathbb{V}_j \mathbb{H}_{e_j} + h_{j+1 j} v_{j+1} e_j^T, \quad (\text{VI.3})$$

où e_j est le $j^{\text{ème}}$ vecteur de la base canonique. Ce processus d'orthogonalisation peut s'écrire

$$\mathbb{A} \mathbb{V}_j = \mathbb{V}_{j+1} \bar{\mathbb{H}}_{e_j}, \quad (\text{VI.4})$$

$$\text{où } \bar{\mathbb{H}}_{e_j} = \begin{bmatrix} \mathbb{H}_{e_j} \\ 0 \cdots 0 \ h_{j+1 j} \end{bmatrix}.$$

VI.1.2 Les méthodes de Ritz-Galerkin

Pour ces méthodes, l'orthogonalisation du résidu se fait par rapport à $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$, c'est à dire que l'on a

$$\mathbb{V}_m^T \vec{r}_{(m)} = \vec{0}, \quad (\text{VI.5})$$

soit

$$\mathbb{V}_m^T (\vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m y_m) = \vec{0}, \quad (\text{VI.6})$$

comme

$$\vec{r}_{(m)} = \vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m y_m. \quad (\text{VI.7})$$

Ainsi, grâce à l'Eq. (VI.2), comme $\vec{r}_{(o)} = \|\vec{r}_{(o)}\| v_1$, on arrive au système suivant à résoudre

$$\mathbb{H}_{em} y_m = \vec{r}_{(o)}. \quad (\text{VI.8})$$

Par ailleurs, en utilisant l'Eq. (VI.3), on obtient

$$\vec{r}_{(m)} = -h_{m+1} v_{m+1} e_m^T y_m. \quad (\text{VI.9})$$

En notant y_m^m , la $m^{\text{ème}}$ composante de y_m , on obtient pour la norme euclidienne du résidu

$$\|\vec{r}_{(m)}\| = h_{m+1} |y_m^m|. \quad (\text{VI.10})$$

Dans le cas général, la résolution de ce système conduit à la méthode dite «Full Orthogonalization Method» (FOM). Si \mathbb{A} est symétrique, cette méthode devient la *méthode de Lanczos* et grâce à la structure tridiagonale de \mathbb{H}_{em} , on peut éviter de stocker \mathbb{V}_m . Si de plus, \mathbb{A} est définie positive, \mathbb{H}_{em} est directement construite sous forme d'une décomposition LU ($\mathbb{H}_{em} = \mathbb{L}_m \mathbb{M}_m$) ce qui donne des relations de récurrence simples pour $\mathbb{V}_m y_m$ et $\vec{r}_{(m)}$. Cette méthode est alors appelée *Gradient*

Conjugué (CG). La formulation classique de cet algorithme se dérive directement des propriétés suivantes d'orthogonalité et de conjugaison

$$\langle \vec{r}_{(i)} | \vec{r}_{(j)} \rangle = 0 \text{ si } i \neq j, \quad (\text{VI.11})$$

$$\langle p_i | \mathbb{A}p_j \rangle = 0 \text{ si } i \neq j, \quad (\text{VI.12})$$

où $(p_i)_{i \in [1, m]}$ sont les colonnes de la matrice $\mathbb{P}_m = \mathbb{V}_m \mathbb{U}_m^{-1}$.

À partir de la décomposition LU de \mathbb{H}_{em} , les solutions construites par CG et les vecteurs p_i peuvent s'exprimer par des relations de récurrence de la forme

$$\vec{\Phi}_{(j+1)} = \vec{\Phi}_{(j)} + \alpha_j p_j, \quad (\text{VI.13})$$

$$p_{j+1} = \vec{r}_{(j+1)} + \beta_j p_j. \quad (\text{VI.14})$$

De l'Eq. (VI.13), on déduit

$$\vec{r}_{(j+1)} = \vec{r}_{(j)} - \alpha_j \mathbb{A}p_j. \quad (\text{VI.15})$$

Comme $\langle \vec{r}_{(j+1)} | \vec{r}_{(j)} \rangle = 0$, on a

$$\alpha_j = \frac{\langle \vec{r}_{(j)} | \vec{r}_{(j)} \rangle}{\langle \vec{r}_{(j)} | \mathbb{A}p_j \rangle}. \quad (\text{VI.16})$$

Par ailleurs, de l'Eq. (VI.14) on tire d'une part que $\langle \vec{r}_{(j)} | \mathbb{A}p_j \rangle = \langle p_j | \mathbb{A}p_j \rangle$ comme p_j est orthogonal à $\mathbb{A}p_{j-1}$ et donc

$$\alpha_j = \frac{\langle \vec{r}_{(j)} | \vec{r}_{(j)} \rangle}{\langle p_j | \mathbb{A}p_j \rangle}, \quad (\text{VI.17})$$

et d'autre part, en écrivant que p_{j+1} est orthogonal à $\mathbb{A}p_j$, on obtient

$$\beta_j = -\frac{\langle \mathbb{A}p_j | \vec{r}_{(j+1)} \rangle}{\langle \mathbb{A}p_j | p_j \rangle} = \frac{\langle \vec{r}_{(j+1)} | \vec{r}_{(j+1)} \rangle}{\langle \vec{r}_{(j)} | \vec{r}_{(j)} \rangle}. \quad (\text{VI.18})$$

Ce raisonnement conduit à l'Algorithme VI.2.

Algorithme VI.2 Algorithme du Gradient Conjugué

CG()

```

1  choix de  $\vec{\Phi}^{(o)}$ 
2   $\vec{r}^{(o)} \leftarrow \vec{b} - \mathbb{A}\vec{\Phi}^{(o)}$ 
3   $p_o \leftarrow \vec{r}^{(o)}$ 
4  for  $j \leftarrow 0$  to  $N_{\max}$  do
5      while  $\|\vec{r}^{(j)}\| \geq \varepsilon \|\vec{\Phi}^{(j)}\|$  do  $j$ 
6           $\alpha_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}^{(j)} | \vec{r}^{(j)} \rangle}{\langle p_j | \mathbb{A}p_j \rangle}$ 
7           $\vec{\Phi}^{(j+1)} \leftarrow \vec{\Phi}^{(j)} + \alpha_j p_j$ 
8           $\vec{r}^{(j+1)} \leftarrow \vec{r}^{(j)} - \alpha_j \mathbb{A}p_j$ 
9           $\beta_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}^{(j+1)} | \vec{r}^{(j+1)} \rangle}{\langle \vec{r}^{(j)} | \vec{r}^{(j)} \rangle}$ 
10          $p_{j+1} \leftarrow \vec{r}^{(j+1)} + \beta_j p_j$ 
11     endwhile
12 endfor

```

VI.1.3 Les méthodes de résidu minimum

Cette fois, l'idée est de minimiser la norme euclidienne de $\vec{r}^{(m)}$ qui peut s'écrire comme

$$\begin{aligned}
 \vec{r}^{(m)} &= \vec{r}^{(o)} - \mathbb{A}\mathbb{V}_m y_m \\
 &= \vec{r}^{(o)} - \mathbb{V}_{m+1} \bar{\mathbb{H}}_e m y_m \\
 &= \|\vec{r}^{(o)}\| v_1 - \mathbb{V}_{m+1} \bar{\mathbb{H}}_e m y_m \\
 &= \mathbb{V}_{m+1} (\|\vec{r}^{(o)}\| e_1 - \bar{\mathbb{H}}_e m y_m).
 \end{aligned} \tag{VI.19}$$

Comme \mathbb{V}_{m+1} est orthonormale, pour trouver y_m on doit résoudre le problème des moindres carrés suivant

$$\min_{\tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m} \left\| \|\vec{r}_{(o)}\| e_1 - \bar{\mathbb{H}}_{em} \tilde{y}_m \right\|.$$

Pour résoudre au mieux ce problème en utilisant la structure de Hessenberg de la matrice $\bar{\mathbb{H}}_{em}$ de dimensions $((m+1) \times m)$, on utilise une factorisation QR de la matrice de Hessenberg supérieure

$$\check{\mathbb{H}}_{em} = \begin{bmatrix} & \|\vec{r}_{(o)}\| \\ \bar{\mathbb{H}}_{em} & 0 \\ & \vdots \\ & 0 \end{bmatrix},$$

en écrivant le problème de moindre carrés sous la forme

$$\min_{\tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m} \left\| \check{\mathbb{H}}_{em} \begin{bmatrix} \tilde{y}_m \\ -1 \end{bmatrix} \right\|. \quad (\text{VI.20})$$

Pour l'algorithme GMRES, la méthode utilisée est celle des rotations de Givens qui permet de se servir de la transformation de $\check{\mathbb{H}}_{ej}$ pour réaliser celle de $\check{\mathbb{H}}_{ej+1}$. Par cette transformation, on obtient $\mathbb{Q}_m \check{\mathbb{H}}_{em} = \mathbb{R}_m$ où \mathbb{Q}_m est une matrice orthonormale et \mathbb{R}_m une matrice triangulaire supérieure $(m+1) \times (m+1)$.

On notera $\mathbb{R}_m^{[i_1, i_2] \times [j_1, j_2]}$ la sous-matrice des lignes i_1 à i_2 , des colonnes j_1 à j_2 de la matrice \mathbb{R}_m .

Comme \mathbb{Q}_m est une matrice orthonormale, le problème aux moindres carrés précédent peut se réécrire comme

$$\min_{\tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m} \left\| \mathbb{R}_m^{[1, m+1] \times [m+1, m+1]} - \mathbb{R}_m^{[1, m+1] \times [1, m]} \tilde{y}_m \right\|.$$

Ainsi, la solution est $y_m = (\mathbb{R}_m^{[1, m] \times [1, m]})^{-1} \mathbb{R}_m^{[1, m] \times [m+1, m+1]}$.

De plus, si l'on s'intéresse au résidu, on a

$$\begin{aligned}
\|\vec{r}_{(m)}\| &= \left\| \mathbb{R}_m^{[1,m+1] \times [m+1,m+1]} - \mathbb{R}_m^{[1,m+1] \times [1,m]} y_m \right\| \\
&= \left\| \mathbb{R}_m^{[1,m+1] \times [m+1,m+1]} - \mathbb{R}_m^{[1,m+1] \times [1,m]} (\mathbb{R}_m^{[1,m] \times [1,m]})^{-1} \mathbb{R}_m^{[1,m] \times [m+1,m+1]} \right\| \\
&= \left\| \mathbb{R}_m^{[1,m+1] \times [m+1,m+1]} - \begin{bmatrix} \mathbb{I}_m & \\ \mathbb{O}_{1 \times m} & \end{bmatrix} \mathbb{R}_m^{[1,m] \times [m+1,m+1]} \right\| \\
&= \left\| \mathbb{R}_m^{[1,m+1] \times [m+1,m+1]} - \begin{bmatrix} \mathbb{R}_m^{[1,m] \times [m+1,m+1]} \\ 0 \end{bmatrix} \right\| \\
&= \left| \mathbb{R}_m^{[m+1,m+1] \times [m+1,m+1]} \right|.
\end{aligned}$$

Si \mathbb{A} est symétrique, cette méthode devient la méthode MINRES et grâce à la structure tridiagonale de \mathbb{H}_{em} , comme dans le cas de FOM, on obtient alors un algorithme à récurrence courte.

Le théorème suivant montre en quoi ces méthodes de minimisation du résidu sont des méthodes de projection/orthogonalisation.

Théorème VI.1 *La minimisation du résidu*

$$\left\| \vec{b} - \mathbb{A} \vec{\Phi}_{(m)} \right\| = \min_{\tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m} \left\| \vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m \tilde{y}_m \right\|,$$

est équivalente à une orthogonalisation du résidu par rapport à $\mathcal{L}_m = \mathbb{A} \mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$.

Preuve :

Supposons que $\vec{\Phi}_{(m)} = \vec{\Phi}^{(o)} + \mathbb{V}_m y_m$ vérifie $\left\| \vec{b} - \mathbb{A} \vec{\Phi}_{(m)} \right\| = \min_{\tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m} \left\| \vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m \tilde{y}_m \right\|$.

Considérons la fonction f définie ainsi

$$f : \begin{cases} \mathbb{R}^m & \rightarrow \mathbb{R} \\ \tilde{y}_m & \rightarrow \left\| \vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m \tilde{y}_m \right\|^2 = \langle \vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m \tilde{y}_m | \vec{r}_{(o)} - \mathbb{A} \mathbb{V}_m \tilde{y}_m \rangle \end{cases},$$

Alors, y_m correspond à un minimum de f , autrement dit (c'est une équivalence car f ne possède pas de maximum) $\forall \tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m, \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (f(y_m + \epsilon \tilde{y}_m) - f(y_m)) = 0$.

Soit, $\forall \tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m$,

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (f(y_m + \epsilon \tilde{y}_m) - f(y_m)) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \{-\epsilon (\langle \vec{r}_{(0)} - \mathbb{A}V_m y_m | \mathbb{A}V_m \tilde{y}_m \rangle + \langle \mathbb{A}V_m \tilde{y}_m | \vec{r}_{(0)} - \mathbb{A}V_m y_m \rangle) + \epsilon^2 \|\mathbb{A}V_m \tilde{y}_m\|^2\} \\ &= -2 \langle \vec{r}_{(0)} - \mathbb{A}V_m y_m | \mathbb{A}V_m \tilde{y}_m \rangle \end{aligned}$$

Par conséquent, $\forall \tilde{y}_m \in \mathbb{R}^m, \langle \vec{r}_{(0)} - \mathbb{A}V_m y_m | \mathbb{A}V_m \tilde{y}_m \rangle = 0$ soit,

$\forall \Psi \in \mathbb{A}\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(0)}, \mathbb{A}), \langle \vec{r}_{(m)} | \Psi \rangle = 0$ c'est à dire que $\vec{r}_{(m)} \perp \mathcal{L}_m = \mathbb{A}\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(0)}, \mathbb{A})$ c.q.f.d.

La réciproque suit le même raisonnement qui en fait ne procède que par équivalences.

Pour finir, il faut noter le lien étroit entre GMRES et FOM. Dans le cas où une méthode de décomposition QR par rotations de Givens est utilisée pour résoudre le système de FOM, les résidus de GMRES (indice G) et FOM (indice F) vérifient

$$\left\| r_{(m)}^{\vec{F}} \right\| = \left\| r_{(m)}^{\vec{G}} \right\| \left(1 - \frac{\left\| r_{(m)}^{\vec{G}} \right\|}{\left\| r_{(m-1)}^{\vec{G}} \right\|} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{VI.21})$$

Ainsi, on voit que si GMRES stagne, FOM diverge.

Que ce soit pour FOM ou GMRES, il existe deux variantes fréquemment employées pour limiter le coût d'une orthogonalisation complète au fur et à mesure que l'espace de projection grandit. Les méthodes FOM(m) et GMRES(m) consistent à limiter la taille de l'espace à m et à redémarrer le processus d'orthogonalisation à partir du dernier résidu lorsque le nombre d'itérations dépasse m . Pour les méthodes DIOM(m) et DQGMRES(m), il s'agit de ne faire qu'une orthogonalisation incomplète à chaque itération, c'est à dire de n'orthogonaliser le vecteur $\mathbb{A}v_j$ que par rapport au $m - 1$ vecteurs $(v_j)_{j \in [\max(1, j-m+1), j-1]}$.

VI.2 Les méthodes de Petrov-Galerkin

Dans les méthodes présentées précédemment, dans le cas général d'une matrice non-symétrique, le processus d'orthogonalisation ne se réduit pas à un processus court de récurrence à trois termes et est par conséquent coûteux.

Ainsi, une autre classe de méthodes part de l'idée de construire une base de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ non-orthogonale mais qui permet de se ramener à une récurrence courte.

On considère une base $\mathbb{V}_m = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_m]$ quelconque de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ construite par l'Eq. (VI.4) i.e.

$$\mathbb{A}\mathbb{V}_m = \mathbb{V}_{m+1}\bar{\mathbb{H}}_{em}, \quad (\text{VI.22})$$

où $\bar{\mathbb{H}}_m = \begin{bmatrix} \mathbb{H}_{em} \\ 0 \dots 0 \ h_{m+1 \ m} \end{bmatrix}$ avec \mathbb{V}_m qui n'est plus orthonormale.

L'idée est alors d'introduire une base $\mathbb{W}_m = [w_1 \ w_2 \ \dots \ w_m]$ telle que \mathbb{V}_m et \mathbb{W}_m soient bi-orthonormales i.e.

$$\mathbb{W}_m^T \mathbb{V}_m = \mathbb{I}_m, \quad (\text{VI.23})$$

et que $\mathbb{W}_m^T v_{m+1} = 0$.

Dans ces conditions, on a

$$\mathbb{W}_m^T \mathbb{A} \mathbb{V}_m = \mathbb{H}_{em}. \quad (\text{VI.24})$$

Le but est alors de choisir \mathbb{W}_m telle que \mathbb{H}_{em} soit tridiagonale.

Pour ce faire, on considère \mathbb{W}_m , une base de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}^T)$ construite par le *processus Bi-Lanzcos* présentée à l'Algorithme VI.3. On peut alors facilement montrer par récurrence que \mathbb{V}_m et \mathbb{W}_m ainsi construites, sont des bases bi-orthonormales de $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A})$ et $\mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}^T)$ respectivement qui vérifient $\mathbb{W}_m^T \mathbb{A} \mathbb{V}_m = \mathbb{V}_m^T \mathbb{A}^T \mathbb{W}_m = \mathbb{H}_{em}$ i.e. \mathbb{H}_{em} est tridiagonale.

Algorithme VI.3 Algorithme Bi-Lanczos

BI-LANZCOS()

```

1   $v_1 \leftarrow \frac{\vec{r}_{(o)}}{\|\vec{r}_{(o)}\|}$ 
2   $w_1$  tel que  $\langle w_1 | v_1 \rangle = 1$ 
3   $h_{10} = h_{01} \leftarrow 0$ 
4  for  $j \leftarrow 1$  to  $m$  do
5     $\hat{v}_{j+1} \leftarrow \mathbb{A}v_j - h_{j,j}v_j - h_{j-1,j}v_{j-1}$ 
6     $\hat{w}_{j+1} \leftarrow \mathbb{A}^T w_j - h_{j,j}w_j - h_{j,j-1}w_{j-1}$ 
7     $h_{j-1,j} = h_{j,j-1}$  tel que  $h_{j-1,j}h_{j,j-1} = \langle \hat{w}_{j+1} | \hat{v}_{j+1} \rangle$ 
8     $v_{j+1} \leftarrow \frac{\hat{v}_{j+1}}{h_{j+1,j}}$ 
9     $w_{j+1} \leftarrow \frac{\hat{w}_{j+1}}{h_{j,j+1}}$ 
10 endfor
```

Ainsi, si l'on utilise $\mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m(\vec{r}_{(o)}, \mathbb{A}^T)$ pour l'orthogonalisation du résidu, on termine avec la résolution du système tridiagonal suivant

$$\mathbb{H}_{em} y_m = \vec{r}_{(o)}. \quad (\text{VI.25})$$

C'est la méthode Bi-Lanczos ou encore Bi-CG. La formulation classique de cette méthode est dérivée à partir de l'algorithme Bi-Lanczos de la même manière que CG a été dérivé de l'algorithme de Lanczos. Le point de départ est cette fois les propriétés suivantes

$$\langle \vec{r}_{(i)}^* | \vec{r}_{(j)} \rangle = 0 \text{ si } i \neq j, \quad (\text{VI.26})$$

$$\langle p_i^* | \mathbb{A} p_j \rangle = 0 \text{ si } i \neq j, \quad (\text{VI.27})$$

où $\vec{r}_{(i)}^*$ est le vecteur résidu associé à un problème dual $\mathbb{A}^T \vec{\Phi}^* = \vec{b}^*$ et $(p_i^*)_{i \in [1, m]}$ sont

les colonnes de la matrice $\mathbb{P}_m^* = \mathbb{W}_m \mathbb{L}_m^{-T}$. L'Algorithme VI.4 présente la formulation ainsi obtenue.

Algorithme VI.4 Algorithme Bi-CG

Bi-CG()

```

1  choix de  $\vec{\Phi}^{(o)}, \vec{r}^{*(o)}$ 
2   $\vec{r}_{(o)} \leftarrow \vec{b} - \mathbb{A}\vec{\Phi}^{(o)}$ 
3   $p_o \leftarrow \vec{r}_{(o)}$ 
4  for  $j \leftarrow 0$  to  $N_{\max}$  do
5      while  $\|\vec{r}_{(j)}\| \geq \varepsilon \|\vec{\Phi}^{(j)}\|$  do  $j$ 
6           $\alpha_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}^{*(j)} | \vec{r}_{(j)} \rangle}{\langle p_j^* | \mathbb{A}p_j \rangle}$ 
7           $\vec{\Phi}_{(j+1)} \leftarrow \vec{\Phi}_{(j)} + \alpha_j p_j$ 
8           $\vec{r}_{(j+1)} \leftarrow \vec{r}_{(j)} - \alpha_j \mathbb{A}p_j$ 
9           $\vec{r}^{*(j+1)} \leftarrow \vec{r}^{*(j)} - \alpha_j \mathbb{A}^T p_j^*$ 
10          $\beta_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}_{(j+1)} | \vec{r}^{*(j+1)} \rangle}{\langle \vec{r}_{(j)} | \vec{r}^{*(j)} \rangle}$ 
11          $p_{j+1} \leftarrow \vec{r}_{(j+1)} + \beta_j p_j$ 
12          $p_{j+1}^* \leftarrow \vec{r}^{*(j+1)} + \beta_j p_j^*$ 
13     endwhile
14 endfor
```

D'autre part, le cheminement qui a mené de CG à GMRES peut-être répété ici. Si au lieu d'orthogonaliser le résidu par rapport à \mathbb{W}_m , on s'intéresse à la norme euclidienne du résidu, on obtient comme précédemment à l'Eq. (VI.19)

$$\|\vec{r}_{(m)}\| = \|\mathbb{V}_{m+1}(\|\vec{r}_{(o)}\| e_1 - \bar{\mathbb{H}}_{em} y_m)\|. \quad (\text{VI.28})$$

Mais cette fois, \mathbb{V}_{m+1} n'est pas orthonormale. La méthode de *Résidu Quasi-Minimum* (QMR) consiste alors à ignorer ce fait et à minimiser $\|\|\vec{r}_{(o)}\| e_1 - \bar{\mathbb{H}}_{em} y_m\|$.

Par ailleurs, à partir de Bi-Lanzcos, il est possible de dériver des méthodes qui ne requiert pas \mathbb{A}^T . La méthode du «Conjugate Gradient Squared» (CGS) est celle qui a reçu le plus d'attention. Cette méthode est dérivée de Bi-Lanzcos en remarquant que l'on peut écrire les résidus sous la forme

$$\vec{r}_{(j)} = \varpi_j(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}. \quad (\text{VI.29})$$

où ϖ_j est un polynôme d'ordre j qui vérifie $\varpi_o = 1$. De même, en introduisant un autre polynôme π_j d'ordre j , les vecteurs p_j peuvent s'écrire comme

$$p_j = \pi_j(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}. \quad (\text{VI.30})$$

Dans ces conditions, on voit que

$$\vec{r}_{(j)}^* = \varpi_j(\mathbb{A}^T)\vec{r}_{(o)}^*, \quad (\text{VI.31})$$

$$p_j^* = \pi_j(\mathbb{A}^T)\vec{r}_{(o)}^*. \quad (\text{VI.32})$$

Ainsi, le coefficient α_j peut être écrit

$$\alpha_j = \frac{\langle \varpi_j(\mathbb{A}^T)\vec{r}_{(o)}^* | \varpi_j(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)} \rangle}{\langle \pi_j(\mathbb{A}^T)\vec{r}_{(o)}^* | \mathbb{A}\pi_j(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)} \rangle} = \frac{\langle \vec{r}_{(o)}^* | \varpi_j^2(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)} \rangle}{\langle \vec{r}_{(o)}^* | \mathbb{A}\pi_j^2(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)} \rangle}. \quad (\text{VI.33})$$

Il est donc possible de trouver un algorithme basé sur une récurrence pour les vecteurs $\vec{r}_{(j)} = \varpi_j^2(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}$ et $p_j = \pi_j^2(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}$. Une telle méthode est présentée à l'Algorithme VI.5. Outre le fait que cette méthode ne requiert pas l'utilisation de la matrice transposée, par sa formulation de résidu «au carré», elle donne souvent une meilleure vitesse de convergence. Par contre, dans le même temps, cette méthode est plus sensible aux erreurs d'arrondis numériques et présente parfois un comportement erratique.

Algorithme VI.5 Algorithme CGS

CGS()

```

1  choix de  $\vec{\Phi}^{(o)}, \vec{r}^{*(o)}$ 
2   $\vec{r}_{(o)} \leftarrow \vec{b} - \mathbb{A}\vec{\Phi}^{(o)}$ 
3   $p_o = u_o \leftarrow \vec{r}_{(o)}$ 
4  for  $j \leftarrow 0$  to  $N_{\max}$  do
5      while  $\|\vec{r}_{(j)}\| \geq \varepsilon \|\vec{\Phi}^{(j)}\|$  do  $j$ 
6           $\alpha_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}^{*(o)} | \vec{r}_{(j)} \rangle}{\langle \vec{r}^{*(o)} | \mathbb{A}p_j \rangle}$ 
7           $q_j \leftarrow u_j - \alpha_j \mathbb{A}p_j$ 
8           $\vec{\Phi}_{(j+1)} \leftarrow \vec{\Phi}_{(j)} + \alpha_j(u_j + q_j)$ 
9           $\vec{r}_{(j+1)} \leftarrow \vec{r}_{(j)} - \alpha_j \mathbb{A}(u_j + q_j)$ 
10          $\beta_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}_{(j+1)} | \vec{r}^{*(o)} \rangle}{\langle \vec{r}_{(j)} | \vec{r}^{*(o)} \rangle}$ 
11          $u_{j+1} \leftarrow \vec{r}_{(j+1)} + \beta_j q_j$ 
12          $p_{j+1} \leftarrow \vec{r}_{(j+1)} + \beta_j(q_j + \beta_j p_j)$ 
13     endwhile
14 endfor

```

VI.3 Les méthodes hybrides

Dans cette dernière classe de méthode, il s'agit d'essayer d'améliorer une méthode existante à l'aide d'une méthode d'un autre type. Cela peut être fait de manière imbriquée, c'est à dire que deux méthodes sont utilisées dans un schéma d'itérations à deux niveaux, la méthode la plus interne étant utilisée pour préconditionner les itérations externes. Une autre manière de procéder est de combiner deux méthodes en une seule. Un bel exemple est la classe des méthodes dénommées Bi-CGSTAB(l) qui correspondent à la combinaison de l'algorithme Bi-CG avec GMRES(l). On

présente dans ce cadre la méthode la plus simple Bi-CGSTAB(1) ou Bi-CGSTAB qui est avec GMRES la méthode qui s'est le plus répandue au sein de la communauté scientifique. C'est cette méthode qui a été choisie pour la résolution du système ACA. Il s'agit ici de reprendre le raisonnement suivi pour l'algorithme CGS mais cette fois, au lieu de prendre le carré des polynômes ϖ_j et π_j , on introduit un autre polynôme ϑ_j . On dérive ensuite l'algorithme dont les résidus s'écrivent

$$\vec{r}_{(j)} = \vartheta_j(\mathbb{A})\varpi_j(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)}. \quad (\text{VI.34})$$

Dans le cas de Bi-CGSTAB, ϑ est écrit sous la forme $\vartheta_j(t) = \prod_{i=1}^{j-1} (1 - w_i t)$. La dérivation de l'algorithme procède de la même manière que pour CGS. Reste ensuite le choix des coefficients w_j et c'est là que le lien avec GMRES(1) apparaît car l'idée est de choisir w_j de manière à minimiser le résidu $\vec{r}_{(j+1)}$ en norme 2 c'est à dire

$$\vec{r}_{(j+1)} = (\mathbb{I} - w_j \mathbb{A})\vartheta_j(\mathbb{A})\varpi_{j+1}(\mathbb{A})\vec{r}_{(o)} = (\mathbb{I} - w_j \mathbb{A})s_j.$$

La méthode ainsi obtenue est présentée à l'Algorithme VI.6

Algorithme VI.6 Algorithme Bi-CGSTAB

BI-CGSTAB()

```

1  choix de  $\vec{\Phi}^{(o)}, \vec{r}^{*(o)}$ 
2   $\vec{r}^{(o)} \leftarrow \vec{b} - \mathbb{A}\vec{\Phi}^{(o)}$ 
3   $p_o \leftarrow \vec{r}^{(o)}$ 
4  for  $j \leftarrow 0$  to  $N_{\max}$  do
5      while  $\|\vec{r}^{(j)}\| \geq \varepsilon \|\vec{\Phi}^{(j)}\|$  do  $j$ 
6           $\alpha_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}^{*(o)} | \vec{r}^{(j)} \rangle}{\langle \vec{r}^{*(o)} | \mathbb{A}p_j \rangle}$ 
7           $s_j \leftarrow \vec{r}^{(j)} - \alpha_j \mathbb{A}p_j$ 
8           $w_j \leftarrow \frac{\langle \mathbb{A}s_j | s_j \rangle}{\langle \mathbb{A}s_j | \mathbb{A}s_j \rangle}$ 
9           $\vec{\Phi}_{(j+1)} \leftarrow \vec{\Phi}_{(j)} + \alpha_j p_j + w_j s_j$ 
10          $\vec{r}_{(j+1)} \leftarrow s_j - w_j \mathbb{A}s_j$ 
11          $\beta_j \leftarrow \frac{\langle \vec{r}_{(j+1)} | \vec{r}^{*(o)} \rangle}{\langle \vec{r}^{(j)} | \vec{r}^{*(o)} \rangle} \times \frac{\alpha_j}{w_j}$ 
12          $p_{j+1} \leftarrow \vec{r}_{(j+1)} + \beta_j (p_j - w_j \mathbb{A}p_j)$ 
13     endwhile
14 endfor

```

ANNEXE VII

ANALYSE SPECTRALE POUR ACA ET SCR

On présente dans cette annexe la dérivation des spectres pour les préconditionnements ACA et SCR qui ont servis à l'analyse spectrale du Chapitre 4.

Pour cette étude, on considère le cas d'une géométrie 1D à plaques perpendiculaires à l'axe x et on se concentre sur le cas d'un milieu homogène. Une quadrature de $K/2$ angles $(\mu_k, w_k)_{k \in [1, K/2]}$ est utilisée pour évaluer numériquement les intégrales portant sur μ entre 0 et 1 i.e.

$$\int_0^1 d\mu f(\mu) \simeq \sum_{k=1}^{K/2} w_k f(\mu_k).$$

VII.1 Analyse de Fourier

On s'intéresse d'abord à la procédure standard d'analyse de Fourier pour un milieu infini.

VII.1.1 Itérations libres

Pour la clarté de la présentation, on reproduit ici une partie de l'analyse de [Sanchez & Chetaine, 2000] pour le spectre des itérations libres de la méthode des caractéristiques. Le point de départ sont les Eqs. (2.15) et (2.19) écrites pour une géométrie 1D composée d'une infinité de plaques d'épaisseur Δ et d'épaisseur optique $\tau = \Sigma_t \Delta$ en l'absence de source externe.

Dans ce cas particulier, les notations peuvent être simplifiées en utilisant $k = N_k = i$ et le fait que la dépendance à \vec{T} se limite à une dépendance à μ . Pour le segment de ligne passant par la région i dans la direction μ à l'itération n , on peut écrire

$$\frac{|\mu|}{\tau_i} \left[\phi_i^{\text{out}(n+1)}(\mu) - \phi_i^{\text{in}(n+1)}(\mu) \right] + \bar{\phi}_i^{(n+1)}(\mu) = c_i \Phi_i^{(n)}, \quad (\text{VII.1})$$

$$\phi_i^{\text{out}(n+1)}(\mu) = T_i \phi_i^{\text{in}(n+1)}(\mu) + (1 - T_i) c_i \Phi_i^{(n)}, \quad (\text{VII.2})$$

où

- $T_i = A_k^{\text{SC}} = \exp(-\tau_i/|\mu|)$ est la fonction de transmission,
- $c_i = \Sigma_{ti}/\Sigma_{si}$ est le ratio de diffusion,
- $\phi_i^{\text{out}}(\mu) = \begin{cases} \phi_{k+1}(\vec{T}) & \mu > 0 \\ \phi_{k-1}(\vec{T}) & \mu < 0 \end{cases}$ et $\phi_i^{\text{in}}(\mu) = \begin{cases} \phi_{k-1}(\vec{T}) & \mu > 0 \\ \phi_{k+1}(\vec{T}) & \mu < 0 \end{cases}$ sont respectivement les flux sortant et entrant pour ce segment,
- $\bar{\phi}_i^{(n+1)}(\mu) = \bar{\phi}_k(\vec{T})$ est le flux angulaire moyen pour ce segment.

Le flux scalaire moyen dans la région i est alors obtenu par l'Eq. (2.6) simplifiée comme suit

$$\Phi_i^{(n+1)} = \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{2} \bar{\phi}_i^{(n+1)}(\mu). \quad (\text{VII.3})$$

Les Ansatz de Fourier pour ce problème homogène sont alors écrits comme

$$\begin{aligned} \Phi_i^{(n)} &= \Phi_w^{(n)} \exp(\mathbf{i} w x_i), \\ \bar{\phi}_i^{(n+1)}(\mu) &= \bar{\phi}_w^{(n+1)}(\mu) \exp(\mathbf{i} w x_i), \\ \phi_i^{\text{out}(n+1)}(\mu) &= \phi_w^{(n+1)}(\mu) \exp\left(\mathbf{i} \left(\text{sg}(\mu) \frac{z}{2} + w x_i\right)\right), \\ \phi_i^{\text{in}(n+1)}(\mu) &= \phi_w^{(n+1)}(\mu) \exp\left(\mathbf{i} \left(-\text{sg}(\mu) \frac{z}{2} + w x_i\right)\right), \end{aligned}$$

où

- x_i est la coordonnée du centre de la région i ,
- $\text{sg}(\mu)$ est le signe de μ ,
- $z = \Delta w \in [0, \pi]$.

Après remplacement dans les Eqs. (VII.1) et (VII.2) et par élimination de $\phi_w^{(n+1)}(\mu)$, on obtient

$$\bar{\phi}_w^{(n+1)}(\mu) = c \Phi_w^{(n)} \left(1 - \frac{|\mu|}{\tau} (1 - T) \frac{(1 + T)(1 - \cos z) + \mathbf{i} \operatorname{sg}(\mu)(1 - T) \sin z}{T^2 - 2T \cos z + 1} \right). \quad (\text{VII.4})$$

La partie réelle de $\bar{\phi}_w^{(n+1)}$ est une fonction paire de μ tandis que sa partie imaginaire est une fonction impaire. Par conséquent, en intégrant sur μ pour obtenir le flux scalaire moyen, on obtient le spectre réel $\lambda(z)$ suivant

$$\lambda(z) = c \left(1 - \frac{1}{\tau} \int_0^1 d\mu \mu \left(\frac{(1 - T^2)(1 - \cos z)}{T^2 - 2T \cos z + 1} \right) \right), \quad (\text{VII.5})$$

qui contrôle la convergence du processus itératif $\Phi_w^{(n+1)} = \lambda(z) \Phi_w^{(n)}$.

Ce spectre est maximum pour $z = 0$ et ainsi, le rayon spectral pour les itérations libres est $\rho = \lambda(0) = c$.

VII.1.2 Itérations préconditionnées par ACA

On part du système correctif de l'Eq. (4.22) pour une ligne traversant successivement les régions $h = i - 1, i, j = i + 1$ dans la direction μ à l'itération n i.e.

$$\begin{aligned} & -\frac{a_h}{d_{ij}} \Psi_h + \left(a_i \left(\frac{1}{d_{ij}} + \frac{1}{d_{hi}} \right) + \frac{(1 - c_i) \tau_i}{d_{hi} d_{ij} |\mu|} \right) \Psi_i - \frac{a_j}{d_{hi}} \Psi_j \\ & = \frac{\tilde{b}_h}{d_{ij}} c_h R_h + \left(-\tilde{b}_i \left(\frac{1}{d_{ij}} + \frac{1}{d_{hi}} \right) + \frac{1}{d_{hi} d_{ij} |\mu|} \Delta_i \right) c_i R_i + \frac{\tilde{b}_j}{d_{hi}} c_j R_j, \end{aligned} \quad (\text{VII.6})$$

avec les coefficients calculés par

$$\begin{aligned} d_{kl} &= \left(\frac{1}{\tilde{d}_k} + \frac{1}{\tilde{d}_l} \right)^{-1}, & \frac{1}{\tilde{d}_k} &= \frac{\tau_k}{2\mu + \tau_k \alpha_k}, \\ \tilde{b}_k &= \frac{\tau_k}{2\mu} \left(\frac{1}{\tilde{d}_k} - \alpha_k \right), & a_k &= 1 - (1 - c_k) \tilde{b}_k, \\ \alpha_k &= 2 \left(\frac{1}{1 - T_k} - \frac{\mu}{\tau_k} \right) - 1. \end{aligned}$$

Dans le cas d'un milieu homogène, en introduisant les Ansatz de Fourier $\Psi_k = \Psi_w \exp(\mathbf{i}w x_k)$ et $R_k = R_w \exp(\mathbf{i}w x_k)$, on obtient

$$f(\mu, z) \Psi_w = c g(\mu, z) R_w, \quad (\text{VII.7})$$

où, $\forall \mu \in [0, 1]$, $\forall z \in [0, \pi]$,

$$\begin{aligned} f(\mu, z) &= \tilde{d} \left(1 + (1 - c) \frac{\tau \alpha}{2\mu} \right) (1 - \cos z) + (1 - c) \frac{\tau}{2\mu} (1 + \cos z), \\ g(\mu, z) &= \frac{\tau}{2\mu} \left(\tilde{d} \alpha (1 - \cos z) + 1 + \cos z \right). \end{aligned}$$

Par intégration de ces fonctions, le système correctif de l'Eq. (3.9) s'écrit

$$F(z) \Psi_w = c G(z) R_w, \quad (\text{VII.8})$$

avec, $\forall z \in [0, \pi]$, $F(z) = \int_0^1 d\mu \mu f(\mu, z)$ et $G(z) = \int_0^1 d\mu \mu g(\mu, z)$.

Ensuite, le système préconditionné de l'Eq. (3.4) permet d'obtenir le spectre $\lambda^{\text{ACA}}(z)$ sous la forme

$$\lambda^{\text{ACA}}(z) = \lambda(z) + \frac{c G(z)}{F(z)} (\lambda(z) - 1), \quad (\text{VII.9})$$

et le rayon spectral est calculé par $\rho^{\text{ACA}} = \max_{z \in [0, \pi]} |\lambda^{\text{ACA}}(z)|$.

VII.1.3 Itérations préconditionnées par SCR

Avec cette méthode, la correction pour la région i s'écrit

$$\Psi_i = \frac{c_i \Sigma_{ti} p_{ii}}{1 - c_i \Sigma_{ti} p_{ii}} R_i. \quad (\text{VII.10})$$

Dans le cas d'une géométrie 1D à plaques, l'expression de p_{ii} de l'Eq. (IV.2) se réduit à

$$\Sigma_{ti} p_{ii} = \left(1 - \frac{1}{\tau_i} \int_0^1 d\mu \mu (1 - T_i) \right). \quad (\text{VII.11})$$

Par conséquent, le spectre des itérations accélérées par SCR est

$$\lambda^{\text{SCR}}(z) = \lambda(z) + \frac{c \Sigma_t p}{1 - c \Sigma_t p} (\lambda(z) - 1), \quad (\text{VII.12})$$

et le rayon spectral est calculé par $\rho^{\text{SCR}} = \max_{z \in [0, \pi]} |\lambda^{\text{SCR}}(z)|$.

VII.2 Analyse spectrale directe

Nous nous sommes intéressés à une analyse spectrale directe qui consiste à construire explicitement la matrice itérative en l'absence de source et à calculer ses valeurs propres. Ceci est fait pour une géométrie 1D composée de N plaques avec des conditions de translation aux limites ($M = 2$).

VII.2.1 Itérations libres

Pour introduire les diverses notations, on reproduit ici une partie de l'analyse de [Sanchez, 2004] pour le spectre des itérations libres de la méthode des caractéristiques. Les surfaces gauche et droite délimitant le domaine sont notées respectivement

α et β . À l'itération n , les conditions de translation se traduisent par

$$\begin{cases} \phi_\alpha^{\text{in}(n+1)}(\mu) = \phi_\beta^{\text{out}(n)}(\mu), \\ \phi_\beta^{\text{in}(n+1)}(\mu) = \phi_\alpha^{\text{out}(n)}(\mu), \end{cases} \quad (\text{VII.13})$$

pour calculer les flux entrant dans le domaine pour chaque direction μ .

L'intégration du flux scalaire moyen pour chaque région $i \in [1, N]$ peut s'écrire

$$\Phi_i^{(n+1)} = \sum_{j=1}^N C_{ji} \Phi_j^{(n)} + \sum_{s=\alpha,\beta} \mathbf{I}_i (T_{si} \phi_s^{\text{in}(n+1)}), \quad (\text{VII.14})$$

tandis que les flux sortant du domaine pour chaque direction μ s'expriment par

$$\begin{cases} \phi_\alpha^{\text{out}(n+1)} = \sum_{j=1}^N T_{j\alpha} c_j (1 - T_j) \Phi_j^{(n)} + T_{\beta\alpha} \phi_\beta^{\text{in}(n+1)}, \\ \phi_\beta^{\text{out}(n+1)} = \sum_{j=1}^N T_{j\beta} c_j (1 - T_j) \Phi_j^{(n)} + T_{\alpha\beta} \phi_\alpha^{\text{in}(n+1)}. \end{cases} \quad (\text{VII.15})$$

Les différents termes sont définis par

$$C_{ji} = \begin{cases} c_i (1 - 2\mathbf{I}_i(1)) & \text{si } i = j \\ \mathbf{I}_i (T_{ji} c_j (1 - T_j)) & \text{si } i \neq j \end{cases},$$

$$\mathbf{I}_j (f) = \frac{1}{2} \int_0^1 d\mu \gamma_j f(\mu),$$

où $\gamma_j = \frac{|\mu|}{\tau_j} (1 - T_j)$ et T_{kl} est la fonction de transmission évaluée avec le parcours optique entre les régions (ou surfaces) k et l .

En introduisant la quadrature $(\mu_k, w_k)_{k \in [1, K/2]}$, le système devient un système linéaire de dimensions $(N + K) \times (N + K)$

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = \mathbb{A} \vec{\Phi}^{(n)}, \quad (\text{VII.16})$$

dont les inconnues sont

$$\vec{\Phi} = \left[\left(\Phi_i \right)_{i \in [1, N]}; \left(\phi_\alpha^{\text{out}}(\mu_k) \right)_{k \in [1, K/2]}; \left(\phi_\beta^{\text{out}}(\mu_k) \right)_{k \in [1, K/2]} \right]. \quad (\text{VII.17})$$

Le rayon spectral ρ est alors simplement la valeur propre de la matrice \mathbb{A} de module maximum.

VII.2.2 Itérations préconditionnées par ACA

Dans ce cas, le système préconditionné de l'Eq. (3.4) peut s'écrire

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = (\mathbb{A} + \mathbb{I}_{\text{int}} \mathbb{D}^{-1} \mathbb{E} \mathbb{I}_{\text{proj}} \sum_s (\mathbb{I} - \mathbb{A})) \vec{\Phi}^{(n)} = \mathbb{A}^{\text{ACA}} \vec{\Phi}^{(n)}, \quad (\text{VII.18})$$

$$\text{avec } \mathbb{I}_{\text{proj}} \vec{\Phi} = \begin{bmatrix} (\Phi_i)_{i \in [1, N]} \\ \Phi_\alpha^{\text{out}} = \frac{1}{M_1} \sum_{k=1}^{K/2} w_k \mu_k \phi_\alpha^{\text{out}}(\mu_k) \\ \Phi_\beta^{\text{out}} = \frac{1}{M_1} \sum_{k=1}^{K/2} w_k \mu_k \phi_\beta^{\text{out}}(\mu_k) \end{bmatrix} \text{ et } \mathbb{I}_{\text{int}} \vec{\Psi} = \begin{bmatrix} (\Psi_i)_{i \in [1, N]} \\ (\Psi_\alpha^{\text{out}})_{k \in [1, K/2]} \\ (\Psi_\beta^{\text{out}})_{k \in [1, K/2]} \end{bmatrix},$$

$$\text{où } M_1 = \sum_{k=1}^{K/2} w_k \mu_k.$$

Les matrices \mathbb{D} et \mathbb{E} de dimensions $(N+M) \times (N+M)$ sont calculées par sommation (en appliquant $\sum_{k=1}^{K/2} w_k \mu_k$) de l'Eq. (VII.6) pour les régions internes au domaine $i \in [2, N-1]$ et quatre équations qui couplent les frontières avec les régions à l'intérieur du domaine. En notant $h = N-1$, les Eqs. (4.24) et (4.25) pour les

régions 1 et N s'écrivent

$$\begin{aligned} \left(a_1 + \frac{(1-c_1)\tau_1}{d_{21}|\mu|}\right)\Psi_1 - a_2\Psi_2 &= \left(-\tilde{b}_1 + \frac{1}{d_{21}}\frac{\tau_1}{|\mu|}\right)c_1R_1 + \tilde{b}_2c_2R_2 \\ &\quad + \frac{1}{d_{21}}\Psi_\alpha^A, \end{aligned} \quad (\text{VII.19})$$

$$\begin{aligned} \left(a_N + \frac{(1-c_N)\tau_N}{d_{hN}|\mu|}\right)\Psi_N - a_h\Psi_h &= \left(-\tilde{b}_N + \frac{1}{d_{hN}}\frac{\tau_N}{|\mu|}\right)c_NR_N + \tilde{b}_hc_hR_h \\ &\quad - \frac{1}{d_{hN}}\Psi_\beta^A, \end{aligned} \quad (\text{VII.20})$$

$$\Psi_\alpha^S = \frac{1}{d_1}\Psi_\alpha^A + a_1\Psi_1 + \tilde{b}_1c_1R_1, \quad (\text{VII.21})$$

$$\Psi_\beta^S = -\frac{1}{d_N}\Psi_\beta^A + a_N\Psi_N + \tilde{b}_Nc_NR_N. \quad (\text{VII.22})$$

Ψ_s^S et Ψ_s^A , les parties symétrique et antisymétrique du flux angulaire à la frontière $s = \alpha, \beta$ s'écrivent pour des conditions de translation

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha^S &= \frac{1}{2}(\Psi_\alpha^{\text{out}} + \Psi_\beta^{\text{out}} + R_\beta), & \Psi_\beta^S &= \frac{1}{2}(\Psi_\beta^{\text{out}} + \Psi_\alpha^{\text{out}} + R_\alpha), \\ \Psi_\alpha^A &= \frac{1}{2}(\Psi_\alpha^{\text{out}} - \Psi_\beta^{\text{out}} - R_\beta), & \Psi_\beta^A &= \frac{1}{2}(\Psi_\beta^{\text{out}} - \Psi_\alpha^{\text{out}} - R_\alpha). \end{aligned}$$

VII.2.3 Itérations préconditionnées par SCR

Dans ce cas, le système préconditionné de l'Eq. (3.4) peut s'écrire

$$\vec{\Phi}^{(n+1)} = (\mathbb{A} + \mathbb{I}_{\text{int}}\mathbb{E}\mathbb{I}_{\text{proj}}\sum_s(\mathbb{I} - \mathbb{A}))\vec{\Phi}^{(n)} = \mathbb{A}^{\text{SCR}}\vec{\Phi}^{(n)}, \quad (\text{VII.23})$$

avec $\mathbb{I}_{\text{proj}}\vec{\Phi} = \left[(\Phi_i)_{i \in [1, N]} \right]$ et $\mathbb{I}_{\text{int}}\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} (\Psi_i)_{i \in [1, N]} \\ (\frac{1}{M_1}\Psi_\alpha^+)_{k \in [1, K/2]} \\ (\frac{1}{M_1}\Psi_\beta^+)_{k \in [1, K/2]} \end{bmatrix}$.

Pour SCR, \mathbb{E} est une matrice de dimensions $(N + M) \times N$ construite à partir de l'Eq. (VII.10) pour la correction du flux scalaire moyen dans chaque région

$i \in [1, N]$ et de

$$\Psi_s^{\text{out}} = \frac{V_{j_s} c_{j_s} \Sigma_{t_{j_s}} P_{j_s s}}{1 - c_{j_s} p_{j_s j_s} \Sigma_{j_s}} R_{j_s}, \quad (\text{VII.24})$$

pour la correction des flux sortant par la surface $s = \alpha, \beta$ où

- j_s est l'index de la région voisine i.e. $j_\alpha = 1$ et $j_\beta = N$;
- $P_{j_s s}$ est la probabilité de fuite à travers la surface s qui se simplifie sous la forme

$$V_{j_s} \Sigma_{t_{j_s}} P_{j_s s} = \int_0^1 d\mu \mu (1 - T_{j_s}). \quad (\text{VII.25})$$

ANNEXE VIII

ALGÈBRE DES MATRICES CREUSES POUR ACA

VIII.1 Définition et stockage

Soit une matrice carrée $\mathbb{A} = (a_{i,j})_{i,j \in [1,N]}$, on note

$$N_z(\mathbb{A}) = \{(i, j) \in [1, N] \times [1, N] \mid a_{i,j} \neq 0\}.$$

Une telle matrice est dite creuse si $\text{card}(N_z(\mathbb{A})) \ll N^2$. Pour ce genre de matrices, on voit bien que l'on a pas intérêt à utiliser le stockage usuel de N^2 réels. L'idée est alors de ne stocker que les éléments non nuls de \mathbb{A} à l'aide de deux index. Parmi les divers schémas de stockage, on a retenu une variation du schéma «Modified Sparse Row» (MSR), optimum en termes de stockage et qui a l'avantage de donner un accès direct aux éléments diagonaux. Il se présente sous la forme de deux vecteurs de réels

$$\begin{aligned} D_A &= [a_{1,1} \dots a_{N,N}], \\ C_A &= [a_{1,J_A(1)} \dots a_{1,J_A(I_A(2))} \dots a_{i,J_A(I_A(i)+1)} \dots a_{i,J_A(I_A(i+1))} \dots \\ &\quad \dots a_{N,J_A(I_A(N)+1)} \dots a_{N,J_A(I_A(N+1))}], \end{aligned}$$

de tailles respectives N et $N_C = \text{card}(N_z(A)) - N$. Ce stockage utilise deux index I_A et J_A de tailles respectives $N + 1$ et N_C . Les éléments non-diagonaux, non-nuls de la $i^{\text{ème}}$ ligne de \mathbb{A} sont au nombre de $I_A(i+1) - I_A(i)$, ont pour indices de colonne $J_A(I_A(i) + 1), \dots, J_A(I_A(i+1))$ et se trouvent en position $I_A(i) + 1, \dots, I_A(i+1)$ du

vecteur C_A . Par exemple, la matrice

$$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 2.0 & 1.0 & 3.0 \\ 1.0 & 2.0 & 1.5 & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 & 4.0 \end{bmatrix}$$

aura pour représentation

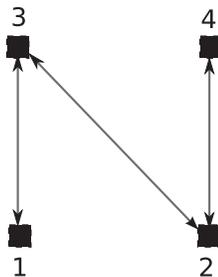
$$D_A = [1.0 \ 2.0 \ 1.5 \ 4.0],$$

$$I_A = [0 \ 1 \ 3 \ 5 \ 6],$$

$$J_A = [3 \ 3 \ 4 \ 1 \ 2 \ 2],$$

$$C_A = [2.0 \ 1.0 \ 3.0 \ 1.0 \ 2.0 \ 1.0].$$

Pour ces matrices creuses, on définit le graphe $G = (V, E)$ d'une matrice où $V = [1, N]$ est l'ensemble des *nœuds* et $E \subset V \times V$ est un ensemble de *liens* (i, j) qui traduisent les éléments de V en relation par la relation binaire \mathcal{R} suivante : $i \mathcal{R} j$ ssi. $(i, j) \in N_z(A)$ i.e. $a_{i,j} \neq 0$. La matrice de l'exemple précédent a pour graphe



On notera $R_i^{\mathcal{R}} \subset V$, l'ensemble des nœuds en relation avec i qui diffèrent de i i.e. $\{j \in [1, N] \setminus \{i\} \mid i \mathcal{R} j\}$. Le degré d'un nœud i , $\deg(i)$ est alors le nombre de liens que ce nœud entretient avec d'autres nœuds i.e. $\text{card}(R_i^{\mathcal{R}})$.

Dans notre cas, on a affaire à des matrices pour lesquelles cette relation binaire est symétrique i.e. $(i, j) \in N_z(A) \Rightarrow (j, i) \in N_z(A)$. Dans le cadre de **ACA**, cette relation binaire peut être explicitée sous la forme $i \mathcal{R} j$ ssi. $\exists \vec{T} \in \Upsilon, \exists k \in [1, K(\vec{T})]$ tels que $N_k(\vec{T}) = i$ et $N_{k+1}(\vec{T}) = j$, c'est à dire que la ligne \vec{T} traverse consécutivement les régions i et j . Ainsi, a priori, la connectivité des matrices **ACA** est entièrement déterminée par le tracking et ne dépend pas des sections efficaces macroscopiques utilisées. Les index I_A et J_A peuvent donc être calculés une bonne fois pour tout au sortir du module de tracking (sans recours explicite à la géométrie). En pratique, suivant les valeurs des sections efficaces, certains coefficients des matrices **ACA** peuvent s'annuler ; ce cas est marginal et ces éléments nuls sont stockés pour garder des vecteurs I_A et J_A indépendants des sections efficaces (et donc du groupe d'énergie).

VIII.2 Renumerotation et préconditionnement

Pour la résolution du système **ACA** stocké au format MSR, on utilise une méthode de Krylov telle que présentée à l'Annexe VI. En pratique, on a observé la nécessité d'utiliser un préconditionnement pour ces itérations sur un système de plusieurs millions d'inconnues. Pour limiter le coût de stockage tout en garantissant une convergence satisfaisante, un préconditionnement $\mathbb{P} = (\mathbb{L}\mathbb{U})^{-1}$ induit par *décomposition LU incomplète* (ILU) a été utilisé. Il s'agit de construire une matrice triangulaire inférieure \mathbb{L} et une matrice triangulaire supérieure \mathbb{U} en imposant des contraintes sur la matrice résiduelle $\mathbb{R} = \mathbb{L}\mathbb{U} - \mathbb{A}$. La plupart de ces factorisations sont basées sur la définition d'un ensemble $P \subset \{(i, j) \in [1, N] \times [1, N] \mid i \neq j\}$ qui conditionne les éléments à conserver lors de la construction de \mathbb{L} et \mathbb{U} par décomposition LU de \mathbb{A} . L'algorithme de décomposition tel que le plus souvent employé est décrit à l'Algorithme VIII.1 et est illustré à la Fig. VIII.1.

Algorithme VIII.1 Décomposition ILU générale (version IKJ)

ILU()

```

1  for  $i \leftarrow 1$  to  $N$  do
2    for  $k \leftarrow 1$  to  $i - 1 \mid (i, k) \in P$  do
3       $a_{ik} = a_{ik} a_{kk}$  (1)
4      for  $j \leftarrow k + 1$  to  $N \mid (i, j) \in P$  do
5         $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$  (2)
6      endfor
7    endfor
8     $a_{ii} = \frac{1}{a_{ii}}$ 
9  endfor
  
```

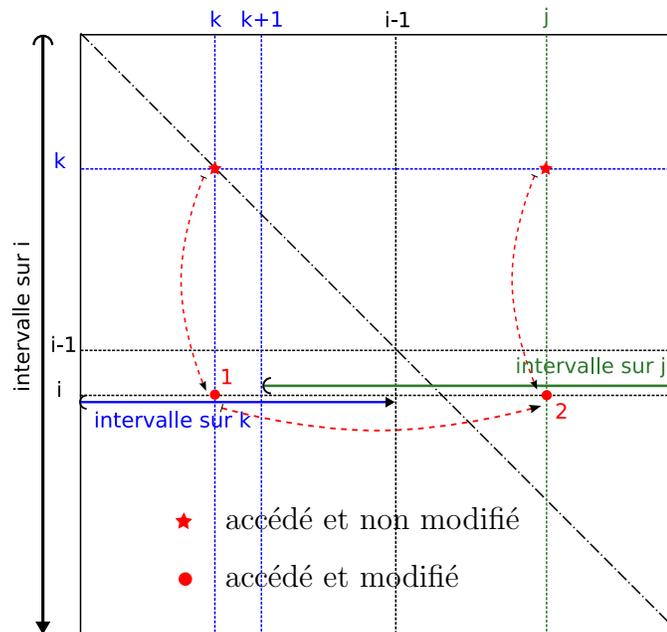


FIG. VIII.1 Mécanisme de décomposition ILU

À la sortie de cet algorithme *en place*, la matrice \mathbb{A} contient les éléments de \mathbb{L} et \mathbb{U} sous la forme $L/U - I$ suivante :

- $\{a_{ij} \mid (i, j) \in [1, N] \times [1, N], i > j\}$ correspond à l'ensemble des éléments non-diagonaux de \mathbb{L} . Remarque : les éléments diagonaux de \mathbb{L} sont égaux à 1 par normalisation et ne sont donc pas stockés.
- $\{a_{ij} \mid (i, j) \in [1, N] \times [1, N], j > i\}$ correspond à l'ensemble des éléments non-diagonaux de \mathbb{U} .
- $\{a_{ii} \mid i \in [1, N]\}$ correspond à l'ensemble des inverses des éléments diagonaux de \mathbb{U} .

Les différentes décompositions viennent alors du choix de P . Si $P = N_z(\mathbb{A})$, c'est à dire que le graphe de la décomposition ILU de \mathbb{A} est le même que celui de \mathbb{A} et que l'on ne permet aucun *remplissage*, on a affaire à une décomposition ILU0.

Pour la résolution de ACA, au vu des résultats publiés par [Santandrea & Sanchez, 2005], nous avons décidé d'opter pour cette décomposition qui offre un stockage qui peut être réduit de manière très satisfaisante pour ACA. En effet, si l'on observe l'algorithme, on remarque qu'un élément (i, j) non-diagonal de \mathbb{A} n'est modifié que si $R_i^R \cap R_j^R$ n'est pas limité à $\{(i, j), (j, i)\}$ i.e. les nœuds i et j ont des *voisins* en commun. Dans le cas de la méthode DP_N , Santandrea a montré que les éléments non-diagonaux de \mathbb{U} ne diffèrent jamais de \mathbb{A} et par conséquent, seuls les éléments diagonaux de \mathbb{U} doivent être stockés (les éléments de \mathbb{L} sont simplement construits à partir de ceux de \mathbb{A} par normalisation à cette diagonale). Dans le cas de ACA où les nœuds correspondent directement aux régions et surfaces externes de la géométrie, les éléments non-diagonaux de \mathbb{U} qui diffèrent de \mathbb{A} peuvent exister mais sont en nombre limité (noté N_0). Ainsi, en pratique, on ne stocke à l'issue d'une décomposition ILU0 que la diagonal de \mathbb{U} et les éléments non-diagonaux qui diffèrent de \mathbb{A} (en introduisant deux index construits préalablement). Ainsi, si l'on considère G groupes pour lesquels on doit faire cette décomposition, le stockage

est réduit de $G \times (N_C + N)$ à $G \times (N_0 + N)$ réels auxquels viennent s'ajouter $N + 1 + N_0$ entiers pour les deux index. À titre d'exemple, pour la géométrie $\mathcal{F}_3 - \mathcal{C}_4$ avec symétrie diagonale du cas BASALA-H du Chapitre 7 qui compte $N = 7328$ régions, on a $N_C = 28796$ tandis que $N_0 = 846$. Si l'on considère 172 groupes, on obtient donc un total de 1406 Kréels (au lieu de 6213 K) et 8 Kentiers pour les décompositions ILU0.

Comme la décomposition ILU0 conserve le graphe de \mathbb{A} , l'efficacité du préconditionnement induit dépend grandement de la numérotation des nœuds. Cette numérotation pour le système ACA provient directement de la numérotation des régions et surfaces telle que produite par l'analyse de géométrie du module de tracking. Nous avons donc introduit un algorithme qui génère une permutation Π des inconnues du système : à un nœud i_{old} est associé le nouvel indice $i_{\text{new}} = \Pi^{-1}(i_{\text{old}})$. Avec une décomposition ILU, un bon indicateur de la qualité d'une renumérotation est la réduction de la largeur de bande de la matrice \mathbb{A} , $b(\mathbb{A}) = \max_{(i,j) \in N_z(\mathbb{A})} |i - j|$.

Cet algorithme est basé sur les méthodes heuristiques de «level-set traversal» (LST) qui consistent à partitionner le graphe de \mathbb{A} par niveaux de nœuds. C'est une procédure récursive qui procède tel qu'illustré à l'Algorithme VIII.2 à partir d'un nœud initial n_o . Suivant l'ordre de traversée du niveau N_{lev} de la ligne 8 de l'Algorithme VIII.2, on obtient différentes méthodes. Par exemple, si le niveau N_{lev} est traversé par degré croissant, on a l'algorithme de Cuthill-McKee. Ensuite, la permutation Π est construite en parcourant les nœuds par niveaux décroissant de manière à minimiser $b(\mathbb{A})$.

Algorithme VIII.2 Partition par Niveaux

LST()

```

1   $N_{\text{lev}} = 1$ 
2   $N_{\text{visited}} = 1$ 
3   $level(N_{\text{lev}}) = \{n_o\}$ 
4   $mask(n_o) = N_{\text{lev}}$ 
5  while  $N_{\text{visited}} < N$  do
6       $N_{\text{lev}} = N_{\text{lev}} + 1$ 
7       $level(N_{\text{lev}}) = \emptyset$ 
8      for  $i \in level(N_{\text{lev}} - 1)$  do
9          for  $j \in R_i^R \mid mask(j) = 0$  do
10              $level(N_{\text{lev}}) = level(N_{\text{lev}}) \cup \{j\}$ 
11              $N_{\text{visited}} = N_{\text{visited}} + 1$ 
12         endfor
13     endfor
14 endwhile

```

On voit que cet algorithme peut dépendre grandement du nœud de départ n_o . Intuitivement, on voit qu'un *nœud périphérique* i.e. qui maximise la distance d (le nombre de liens) entre les nœuds, est le meilleur choix. Comme la détermination d'un tel nœud est très coûteuse, on a recours en pratique à un algorithme pour déterminer un *nœud pseudo-périphérique* (PPN) sous la forme présentée à l'Algorithme VIII.3. En peu d'itérations, il fournit un nœud qui maximise «localement» la distance d et permet d'avoir une renumérotation par niveaux performante.

Algorithme VIII.3 Nœud Pseudo-Périphérique

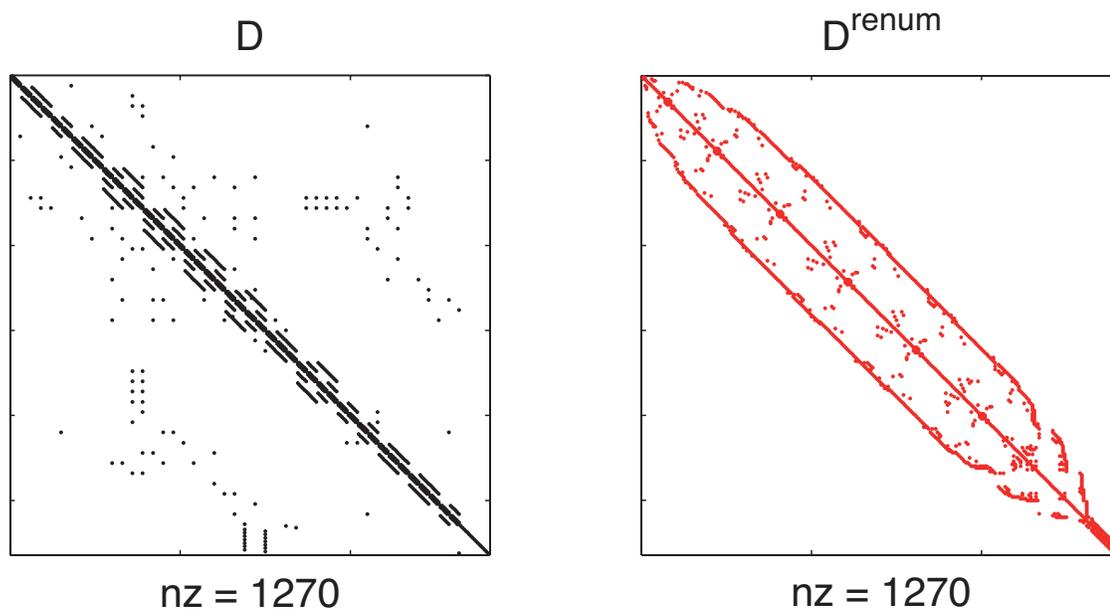
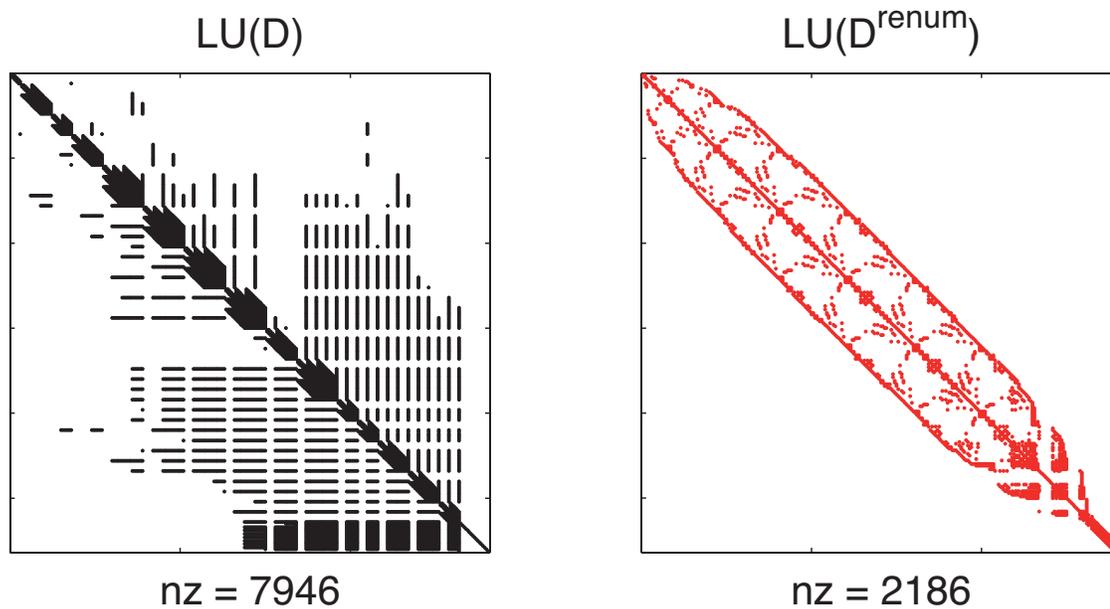
PPN()

```

1   $\delta = 0$ 
2  appel de  $LST(G, n_o)$ 
3  on choisit un nœud  $i \in level(N_{lev})$  de degré minimal
4  if  $N_{lev} = \max_{j \in R_i^R} d(i, j) > \delta$  then
5     $n_o = i$ 
6    GOTO 2
7  endif
8   $n_o$  est un nœud pseudo-périphérique

```

À titre d'exemple, la Fig. VIII.2 présente une matrice \mathbb{D} pour ACA issue de la discrétisation d'un assemblage type PWR (c.f. Chapitre 9) en 281 régions. Dans ce cas, la largeur de bande passe de 181 à 43 grâce à la renumérotation utilisée. La Fig. VIII.3 montre les matrices $LU(\mathbb{D})$ issues de la décomposition LU complète de \mathbb{D} sans ou avec renumérotation. Le nombre d'éléments non nuls passe de 7946 à 2186 ; le niveau de remplissage, défini comme $\frac{\text{card}(N_z(LU(\mathbb{D}))) - \text{card}(N_z(\mathbb{D}))}{\text{card}(N_z(\mathbb{D}))}$ passe de 23.8 à 3.3. Clairement, dans le cas d'une décomposition ILU0 qui conserve le graphe de la matrice (i.e. impose un niveau de remplissage nul), la qualité du préconditionnement induit est largement améliorée par une telle renumérotation.

FIG. VIII.2 Matrice \mathbb{D} avant et après renumérotationFIG. VIII.3 Décomposition LU de la matrice \mathbb{D} avant et après renumérotation

ANNEXE IX

BENCHMARKS 2D MONO-ÉNERGÉTIQUES

On présente ici deux benchmarks mono-énergétiques en géométrie 2D cartésienne utilisés à plusieurs reprises dans ce projet.

IX.1 1^{er} benchmark : problème à source

Il s'agit d'un benchmark proposé dans [Stepanek et al., 1982]. Ce problème à source utilise une expansion des sections efficaces de diffusion à l'ordre P_2 . Les sections efficaces sont données au Tableau IX.1. Sa géométrie, présentée à la Fig. IX.1 est composée de quatre zones internes entourées de modérateur avec des conditions de vide à la frontière. Le modérateur a une épaisseur de 18 cm tandis que les régions internes sont des rectangles de 30×25 cm. Une source uniforme, unitaire et isotrope est située dans les mélanges 1 et 3. Chaque région est subdivisée en n_{split} selon les axes x et y .

matériel	Σ_t	Σ_s^0	Σ_s^1	Σ_s^2
mix 5	0.90	0.89	0.40	0.10
mix 4	0.65	0.50	0.15	0.10
mix 3	0.70	0.66	0.30	0.20
mix 2	0.48	0.20	0.02	0.01
mix 1	0.60	0.53	0.27	0.10

TAB. IX.1 Sections efficaces macroscopiques P_2 pour le benchmark de Stepanek (en cm^{-1})

La Fig. IX.1 présente la géométrie discrétisée avec un maillage 16×16 correspondant à $n_{\text{split}} = 4$.

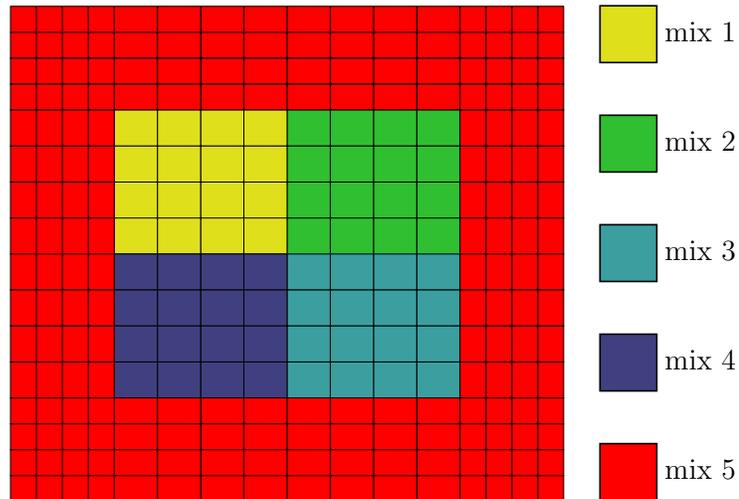


FIG. IX.1 Géométrie du benchmark de Stepanek (maillage 16×16)

IX.2 2^{ème} benchmark : problème à valeur propre

Il s'agit d'un benchmark défini dans [Hébert, 2006a]. Les sections efficaces linéairement anisotropes de ce problème à valeur propre sont données au Tableau IX.2. La moitié de l'assemblage cartésien 5×5 de cette géométrie est présenté à la Fig. IX.2. On y distingue quatre différentes zones dont une région vide dans les coins de l'assemblage ; des conditions de vide sont appliquées aux frontières $x+$ et $y+$ tandis que des conditions de réflexion sont appliquées sur les deux autres faces.. La taille de la maille régulière de cette géométrie cartésienne est 40 cm. Chaque maille est subdivisée en n_{split} selon les axes x et y .

matériel	Σ_t	Σ_s^0	Σ_s^1	$\nu\Sigma_f$
mix 3	0.075	0.0	0.0	0.0
mix 2	0.025	0.024	0.006	0.0
mix 1	0.025	0.013	0.0	0.0155

TAB. IX.2 Sections efficaces macroscopiques P_1 pour le benchmark à valeur propre (en cm^{-1})

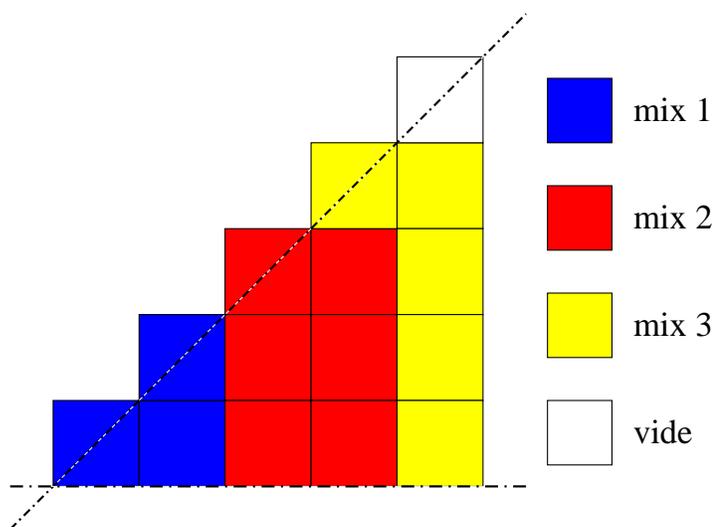


FIG. IX.2 Géométrie du benchmark à valeur propre