



**HAL**  
open science

# Méthode multi-échelle pour la résolution des équations de la cinétique neutronique

Steve Chauvet

► **To cite this version:**

Steve Chauvet. Méthode multi-échelle pour la résolution des équations de la cinétique neutronique. Modélisation et simulation. Université de Nantes, 2008. Français. NNT: . tel-00348435

**HAL Id: tel-00348435**

**<https://theses.hal.science/tel-00348435>**

Submitted on 19 Dec 2008

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

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

UNIVERSITÉ DE NANTES  
FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET TECHNOLOGIES  
DE L'INFORMATION ET DE MATHÉMATIQUES

Année : 2008

N° B.U. : 

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

# MÉTHODE MULTI-ÉCHELLE POUR LA RÉOLUTION DES ÉQUATIONS DE LA CINÉTIQUE NEUTRONIQUE

**Thèse de Doctorat de l'Université de Nantes**

Spécialité : MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

*Présentée et soutenue publiquement par*

**Steve CHAUVET**

*le 29 octobre 2008 à l'Université de Nantes devant le jury ci-dessous*

*Président du jury* : François JAUBERTEAU Professeur (Université de Nantes)  
*Rapporteurs* : Ernest MUND Professeur (Université Libre de Bruxelles)  
Grégoire ALLAIRE Professeur (École Polytechnique)  
*Examinatrice* : Anne-Marie BAUDRON Ingénieur (CEA Saclay)

*Directeur de thèse* : Abdeljalil NACHAOUI

*Laboratoire* : Laboratoire Jean Leray (UMR 6629 UN-CNRS-ECN)

ED : .....



## Remerciements

Je remercie Anne-Marie Baudron, qui m'a encadré au CEA Saclay pendant mes trois ans de thèse et qui est l'initiatrice du sujet. Je remercie Jean-Jacques Lautard, qui a aussi pris une part importante dans l'encadrement de ces travaux. Leurs conseils, leurs réponses et les échanges que j'ai eu avec eux, ont été déterminants dans l'avancée de ma thèse. Je remercie ensuite Abdeljalil Nachaoui, qui a accepté de diriger cette thèse. L'expertise qu'il m'a apportée sur les problèmes théoriques et numériques et son soutien constant au cours des étapes administratives et techniques ont été déterminants pour mon parcours.

J'exprime ensuite ma gratitude à Grégoire Allaire et Ernest Mund qui ont accepté d'être rapporteurs et de relire mon manuscrit avec attention. Je remercie également François Jauberteau qui a bien voulu être membre du jury.

Je remercie les membres du Laboratoire de Mathématiques Jean Leray de l'Université de Nantes et ceux du Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées du CEA Saclay qui ont été présents à différentes étapes de cette thèse. Je remercie en particulier Gabriele, François, Pierre et Pietro, qui ont préparé leur thèse en même temps que moi, cela crée des liens. Je remercie aussi mes collègues de Dassault Systèmes et en particulier Jean-Michel Houdouin et Franck Deboulle pour m'avoir accueilli et avoir faciliter la fin de ma thèse, parallèlement à mes débuts dans mon nouveau travail.

Mes remerciements vont enfin à ma famille, en particulier à mes parents. Leurs encouragements et leur réconfort dans les moments difficiles m'ont été indispensables pour persévérer et achever mon travail. Je remercie George, Ole et tous mes amis 501st et au delà, ce sont les moments comme ceux partagés avec eux qui rendent le reste plus facile.

Merci à vous tous.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Éléments de physique et de représentation des réacteurs</b>	<b>3</b>
1.1 Fonctionnement d'un réacteur nucléaire . . . . .	4
1.2 Les neutrons et la réaction en chaîne . . . . .	5
1.3 La neutronique . . . . .	6
1.4 La notion de criticité . . . . .	7
1.5 Représentation de la géométrie et de la composition . . . . .	8
1.6 Codes et schémas de calculs . . . . .	9
<b>2 Modélisation de la population de neutrons</b>	<b>11</b>
2.1 Le flux neutronique . . . . .	12
2.2 L'équation de Boltzmann . . . . .	12
2.3 Traitement des variables de vitesse . . . . .	13
2.3.1 Représentation angulaire . . . . .	14
2.3.2 Représentation énergétique . . . . .	14
2.4 Le modèle de la diffusion . . . . .	15
2.4.1 Approximation du transport . . . . .	15
2.4.2 Équations de la diffusion . . . . .	16
2.5 Concentration des précurseurs . . . . .	16
2.6 Calcul à valeur propre . . . . .	17
2.7 Conditions aux limites . . . . .	18
<b>3 Traitement mathématique de la cinétique</b>	<b>19</b>
3.1 Rappel du problème et des notations . . . . .	20
3.2 Formulation variationnelle non mixte . . . . .	21
3.3 Évolution et positivité de la solution . . . . .	22
3.4 Formulations variationnelles mixtes . . . . .	22
3.5 Traitement analytique de la variable temporelle . . . . .	24
3.6 Propriétés du problème mixte duale . . . . .	25
3.7 Bilan des résultats théoriques et pratiques . . . . .	27
<b>4 Le solveur de cœur Minos</b>	<b>29</b>
4.1 Un solveur mixte duale en géométrie cartésienne . . . . .	30
4.2 Maillage et espaces discrétisés . . . . .	30
4.3 Mise en forme du système linéaire . . . . .	32
4.4 Éléments finis de Raviart-Thomas-Nédélec . . . . .	33
4.4.1 Élément de référence . . . . .	33
4.4.2 Fonctions de base . . . . .	34

4.4.3	Assemblage des matrices globales . . . . .	36
4.5	Méthodes d'inversion et algorithmes . . . . .	37
4.6	Conception numérique et codes informatiques . . . . .	40
<b>5</b>	<b>L'approche quasi-statique</b>	<b>41</b>
5.1	L'idée du quasi-statique . . . . .	42
5.2	Le quasi-statique amélioré . . . . .	44
5.3	Idée de la généralisation locale . . . . .	45
5.3.1	Cinétique multipoint . . . . .	45
5.3.2	Idée quasi-statique locale . . . . .	46
5.4	Application d'idées multi-échelles . . . . .	46
<b>6</b>	<b>La méthode quasi-statique locale</b>	<b>49</b>
6.1	Formulation mixte de la décomposition quasi-statique . . . . .	50
6.2	Résolution de l'amplitude . . . . .	52
6.2.1	Discrétisation en espace . . . . .	52
6.2.2	Discrétisation en temps . . . . .	54
6.2.3	Assemblage du système linéaire . . . . .	55
6.3	Résolution de la forme . . . . .	56
6.3.1	Discrétisation en espace . . . . .	56
6.3.2	Discrétisation en temps . . . . .	57
6.3.3	Assemblage du système linéaire . . . . .	58
6.4	Bilan de la méthode . . . . .	58
6.4.1	Traitement des précurseurs condensés . . . . .	59
6.4.2	Algorithme global . . . . .	59
<b>7</b>	<b>Implémentation étape par étape pour l'amplitude</b>	<b>63</b>
7.1	Techniques proposées . . . . .	64
7.1.1	Coefficients de condensation . . . . .	64
7.1.2	Insertion de flux dans la maille . . . . .	65
7.2	Formules obtenues et implémentées . . . . .	65
7.2.1	Couplages pairs . . . . .	66
7.2.2	Couplages impairs . . . . .	67
7.2.3	Condensation des concentrations de précurseurs . . . . .	68
7.3	Aspects numériques de la condition de normalisation . . . . .	68
7.4	Remarques globales sur le traitement de l'amplitude . . . . .	68
<b>8</b>	<b>Implémentation étape par étape pour la forme</b>	<b>71</b>
8.1	Technique pour l'intégration en temps . . . . .	72
8.2	Technique pour l'interpolation de l'amplitude . . . . .	73
8.3	Source de divergence . . . . .	74
8.4	Coefficients de discontinuité . . . . .	75
8.4.1	Condition de raccordement . . . . .	75
8.4.2	Illustration du gain . . . . .	76
8.5	Algorithme global . . . . .	76
8.5.1	Performances a priori . . . . .	77
8.5.2	Perspectives de l'implémentation . . . . .	78

<b>9 Résultats et analyses de validation</b>	<b>79</b>
9.1 Tests à 1 dimension . . . . .	80
9.1.1 Présentation du cas test . . . . .	80
9.1.2 Résultats numériques . . . . .	80
9.2 Tests en 2 dimensions . . . . .	82
9.2.1 Présentation du cas test . . . . .	82
9.2.2 Résultats numériques . . . . .	83
9.3 Tests en 3 dimensions . . . . .	87
9.3.1 Présentation du cas test . . . . .	87
9.3.2 Résultats numériques . . . . .	88
<b>10 Étude de la méthode</b>	<b>91</b>
10.1 Performance et temps de calcul . . . . .	92
10.1.1 Temps et précisions . . . . .	92
10.1.2 Condensations et parallélisme . . . . .	92
10.2 Échelles adaptatives . . . . .	94
10.2.1 Variable d'espace . . . . .	94
10.2.2 Variable de temps . . . . .	96
10.3 Perspectives de la méthode . . . . .	97
<b>Conclusions</b>	<b>99</b>
<b>Références</b>	<b>101</b>

,





# Introduction

Les enjeux énergétiques d'aujourd'hui imposent une recherche de plus en plus innovante. De l'amont à l'aval de la chaîne, les développements sont partout. La modélisation et la simulation numérique prennent une place incontournable dans tous ces travaux. De plus, les centrales nucléaires ont une place prépondérante dans le paysage électrique, présent et futur. L'étude du parc actuel et la conception de ces prochaines évolutions représentent des défis scientifiques et industriels. Ainsi, la mise au point d'outils informatiques précis et performants s'insère au cœur des projets du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) et de ses partenaires.

La neutronique, i.e. la physique du neutron (particule élémentaire au centre de la réaction nucléaire), impose des modèles mathématiques complexes. En particulier, le calcul du flux de neutrons dans un cœur de réacteur en est une étape importante. Il est assuré par des programmes informatiques, les solveurs, basés sur des approximations de l'équation du transport, modélisant le cheminement des neutrons. Ces codes requièrent de plus en plus de ressources de calculs, c'est-à-dire des ordinateurs de plus en plus puissants. En effet, on cherche à être toujours plus précis sur des problèmes dont la complexité ne cesse de croître. Le coût de calcul nécessaire est donc très important du fait du grand nombre de paramètres et de la complexité du modèle. De plus, dans le cadre d'une utilisation industrielle, la rapidité à laquelle les résultats sont obtenus est essentielle.

Les modèles mathématiques et les méthodes numériques de résolution doivent donc évoluer pour améliorer leur ratio temps de calcul / précision. De plus, il est nécessaire que ces développements s'adaptent aux nouvelles architectures informatiques. Le calcul parallèle, où l'on découple la charge de calcul sur plusieurs processeurs ou ordinateurs, en est le meilleur exemple.

Dans ce manuscrit, nous nous focaliserons sur les équations de la cinétique modélisant l'évolution dans le temps du flux de neutrons. Le solveur de cœur MINOS développé et utilisé au CEA permet entre autre de résoudre la formulation mixte duale de ce problème. Il offre déjà d'excellentes performances. Nous nous proposons d'étudier une nouvelle voie pour encore améliorer le ratio temps de calcul / précision. Elle sera basée sur une modélisation multi-échelle et exploitera au mieux les avantages de l'outil MINOS. Ainsi, on explore des alternatives reposant sur des approximations mais permettant un gain nécessaire en temps de calcul. Dans cette optique, la méthode la plus élaborée actuellement, repose sur un enchaînement de deux niveaux d'approximations. L'un est condensé en espace et l'autre en temps, on parle de méthode quasi-statique.

Les approches multi-échelles sont nombreuses et trouvent de plus en plus d'applications numériques. Dans le cadre de la cinétique neutronique, les méthodes quasi-statiques proposent donc de factoriser le flux en une fonction d'amplitude ne dépendant que du temps et un flux de forme indépendant du temps. Ainsi, l'idée est de séparer la variation en temps du reste de la représentation du flux. Cette approche induit donc une supposition forte sur le comportement de la solution. Pour améliorer cette méthode, une dépendance grossière a été

introduite pour le flux de forme, c'est le quasi-statique amélioré (IQS). Cette modélisation a été intégrée dans le code CRONOS, l'ancien environnement de MINOS. Meilleure, elle est tout de même limitée par ses fortes suppositions (séparation des variations temps et espace) qui ne se réalisent pas en pratique. En particulier, elle s'avère peu adaptée pour la prise en compte des hétérogénéités spatiales des données géométriques et neutroniques du problème.

Nous proposons donc de continuer sur la voie de l'amélioration du quasi-statique. Tout en conservant l'idée de séparation de variables, nous allons renforcer l'aspect multi-échelle. Là où la méthode IQS introduisait une représentation grossière en temps pour la forme, nous allons, en plus, introduire une dépendance spatiale grossière pour l'amplitude. Ce sont le cadre, la conceptualisation, le développement, la réalisation et l'analyse de cette idée qui forment le sujet de ce manuscrit.

Ainsi, nous commencerons par quelques rappels d'éléments de la physique des réacteurs qui servent à la compréhension du problème. De ces éléments nous déduirons les équations modélisant le comportement cinétique d'un cœur. Dans un second temps, nous établirons et étudierons les résultats mathématiques. Toujours d'un point de vue théorique, nous verrons les principaux outils qui nous serviront à la représentation numérique du problème. Ce qui nous amènera à la présentation des algorithmes de résolution de MINOS et du quasi-statique.

La troisième partie sera donc consacrée à notre nouvelle méthode. Nous discuterons de tous les éléments théoriques et numériques qui la composent, comme les schémas de discrétisation, la pondération, les discontinuités ou les enchaînements itératifs. Les résultats numériques serviront de démonstrations et de justifications. Mais surtout, ils seront développés et analysés dans une partie spécifique, où les performances seront étudiées. Ce qui aboutira à une analyse illustrée des conclusions et perspectives de l'approche, en particulier l'adaptation de maillage et le parallélisme.

## Chapitre 1

# Éléments de physique et de représentation des réacteurs nucléaires

*Ce chapitre a pour but de poser les bases de la physique des réacteurs qui nous seront nécessaires par la suite. Un réacteur nucléaire produit de l'électricité à partir de la chaleur produite dans le cœur. Ce dernier vit de la réaction en chaîne de fission. La population de neutrons est l'élément clé qui nous intéresse dans ce processus. La neutronique est la physique dont nous extrayons la modélisation. Les notions de pilotage, combustible, croix de contrôle, criticité et section efficace sont présentées simplement pour permettre la bonne compréhension du problème. La dernière section résume les principes des schémas de calcul et des codes appliqués à la neutronique tels qu'ils sont utilisés au CEA.*

Ces travaux s'inscrivent dans le contexte général du développement d'outils d'aide à la conception des réacteurs nucléaires de façon à maîtriser les risques et incertitudes afférentes à certaines grandeurs physiques de calcul. Pour introduire la problématique, il faut tout d'abord présenter le contexte, l'étude des cœurs de réacteurs, et le support, la neutronique. Cette courte introduction à la physique nucléaire pourra être complétée par la lecture des ouvrages [Bussac et Reuss, 1985] et [Reuss, 2003] et la visite du site [CEA, 2008] dont proviennent nos illustrations.

## 1.1 Fonctionnement d'un réacteur nucléaire

Le principe d'une **centrale nucléaire** est commun à la plupart des centrales électriques (thermiques) : une source de chaleur permet de vaporiser de l'eau. Cette vapeur est ensuite utilisée pour alimenter des turbines reliées à un alternateur produisant l'électricité.

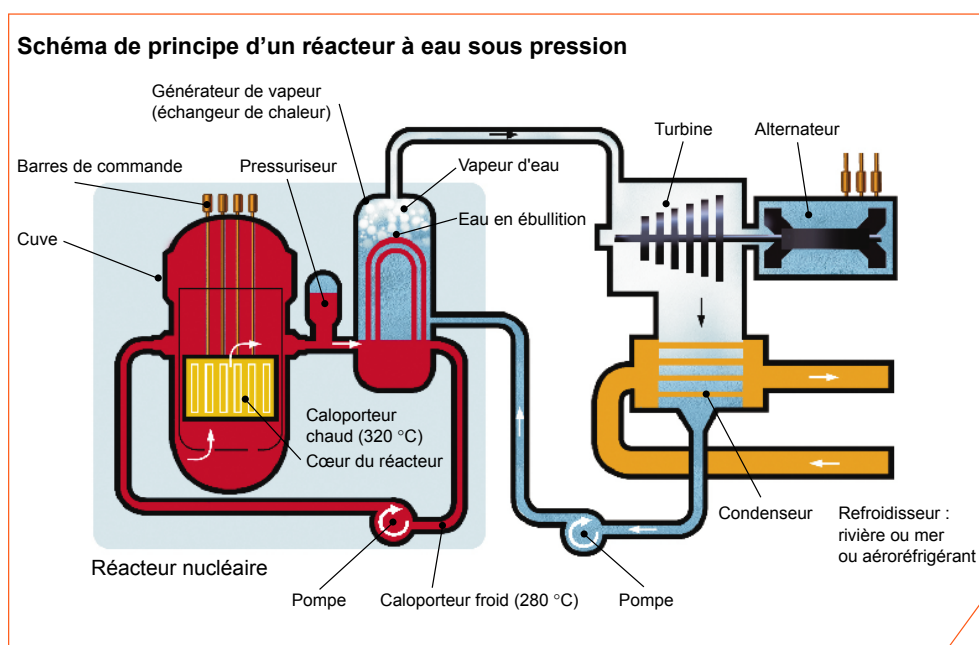


FIG. 1.1 – *Fonctionnement d'un réacteur de centrale nucléaire transformant l'énergie calorifique en électricité*

La source de chaleur provient donc du **cœur**, c'est-à-dire de là où se produit la réaction nucléaire de fission. Il existe différentes conceptions du cœur du réacteur (bouillant, à neutrons rapides...), la figure 1.1 présente un REP qui constitue la majorité du parc actuel en France. On pourra se référer aux ouvrages [Bussac et Reuss, 1985] et [Reuss, 2003] pour plus de détails sur ces différentes filières.

La **fission** atomique est une réaction en chaîne exothermique. Ce sont des neutrons libres (i.e. désolidarisés du noyau d'un atome) qui entrent en collision avec des atomes du matériau combustible, comme l'Uranium, qui se trouve dans le cœur. Le choc entraîne la fission de certains de ces atomes (i.e. qu'un noyau lourd se scinde en deux plus légers), libérant de nouveaux neutrons libres et de la chaleur.

Ainsi, la réaction repose sur deux éléments importants : les neutrons et le matériau

fissible. Dans les cas qui nous intéressent, ce dernier est composé d'Uranium 235. Ce **combustible**, qui peut être vu comme le carburant des centrales, est placé dans le cœur à la conception. Avec le temps, la ressource s'épuise et alors on recharge le cœur en arrêtant la centrale, en enlevant les produits de fission et en insérant du nouveau combustible. On peut donc parler de la consommation d'un réacteur, c'est-à-dire de la quantité d'électricité produite par rapport au temps écoulé entre deux rechargements. Cette consommation dépend de plusieurs facteurs dans le réacteur. L'élément qui nous intéresse ici est la gestion de l'usure du combustible.

On parle de **pilotage** du réacteur lorsque l'on agit sur le cœur pour conserver l'équilibre nécessaire au bon fonctionnement neutronique. Il s'agit d'optimiser l'usure de la matière fissile, de la façon la plus homogène sur l'intégralité de la géométrie. Pour cela et pour maintenir la réaction en chaîne active et en équilibre, il est donc nécessaire de pouvoir simuler l'évolution de la composition du matériau au cours du temps. Dans notre cas, et dans cette optique, on se concentre sur la modélisation de l'évolution de la population neutronique.

## 1.2 Les neutrons et la réaction en chaîne

Chaque fission produit en moyenne deux à trois neutrons d'énergie élevée qui se déplacent à très grande vitesse (20 000 km/s) parmi les atomes d'uranium. L'énergie emportée par les neutrons représente une faible partie de l'énergie totale libérée lors de la fission, l'essentiel de cette énergie étant emporté par les produits de fission. Mais les neutrons étant de masse faible par rapport aux produits de fission, leur vitesse est très grande. Le choc des produits avec la matière environnante est la source de chaleur principale.

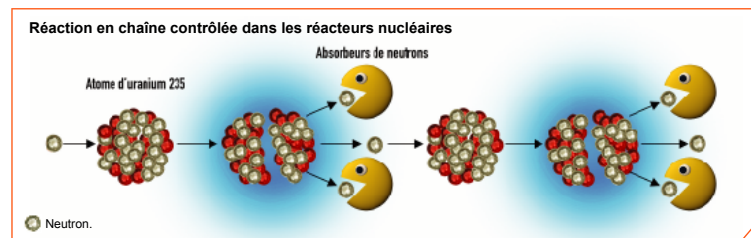
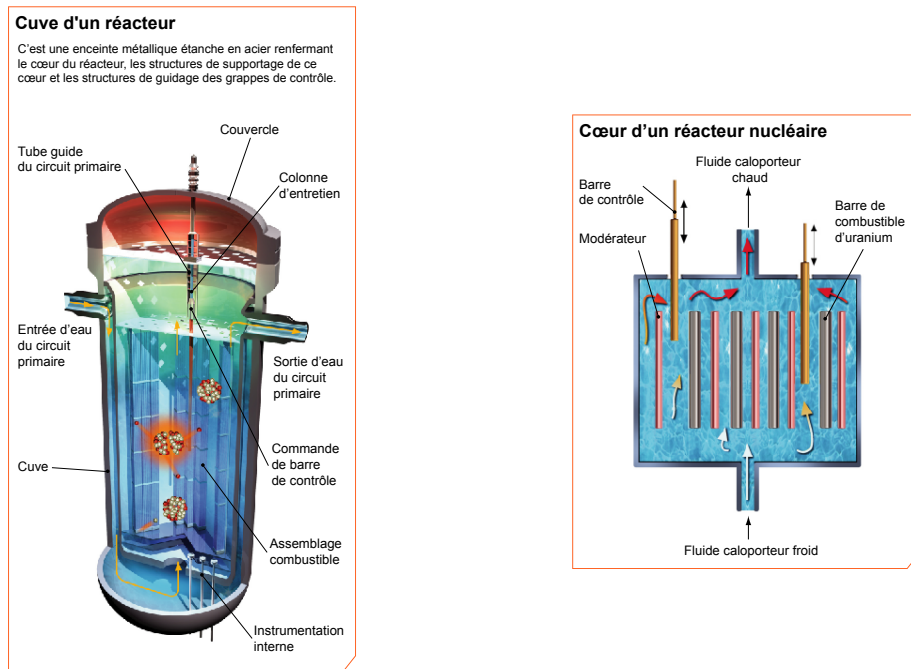


FIG. 1.2 – Schéma de la réaction en chaîne de fission atomique dans un cœur

Projectiles de petite dimension, neutres électriquement, les **neutrons** vont pouvoir se propager relativement loin avant d'interagir avec un autre noyau d'atome. S'il s'agit d'un atome d'Uranium 235, ils donneront éventuellement lieu à une nouvelle fission, d'où la réaction en chaîne. Le pilotage maîtrise cette réaction à l'aide d'absorbant neutronique pour maintenir un rythme de fissions constant. C'est-à-dire que sur les deux ou trois neutrons libérés lors d'une fission, seul l'un d'entre eux en provoque une nouvelle, les autres étant capturés. Ainsi, on contrôle aussi la chaleur libérée dans le cœur.

Le mécanisme de pilotage est basé sur l'insertion ou l'extraction de **croix ou barres de contrôle** (absorbants neutroniques dont la composition chimique a pour effet de capter les neutrons, empêchant ainsi toute fission thermique dans l'environnement proche). On peut aussi utiliser du bore dissout dans l'eau de la cuve (le bore disposant d'une forte capacité

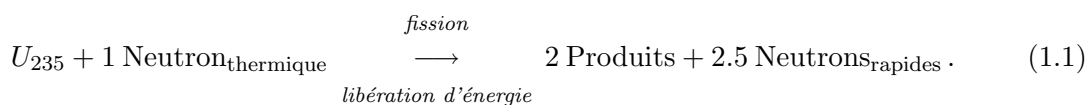
de capture des neutrons). A contrario, lorsque l'on retire la croix, la section de passage des croix est comblée par l'eau.

(a) *La réaction au sein de la cuve*(b) *La chaleur produite dans le cœur*FIG. 1.3 – *Vision schématique d'un cœur de réacteur et de son pilotage*

L'eau, élément environnant du combustible, assure la modulation des neutrons, ce qui se caractérise par une diminution de leur énergie par des chocs successifs sur les noyaux d'hydrogène et permet ainsi la fission nucléaire sur le noyau d'Uranium 235 dans le domaine de faible énergie. En effet, si le neutron produit par la fission à une haute énergie (rapide), la probabilité qu'il provoque une autre fission est plus forte à basse énergie (thermique).

### 1.3 La neutronique

La physique du neutron ou neutronique est la science de la naissance, de la vie et de la mort du neutron. Comme on vient de le voir, lorsqu'un atome fissile, tel l' $U_{235}$  est fissionné par un neutron thermique, son noyau se divise, en moyenne en deux fragments de fission, plus légers, et il y a libération de l'énergie de liaison et émission de neutrons secondaires (en moyenne 2.5 par fission). Les neutrons libérés sont dits prompts lorsqu'ils accompagnent la fission, et sont dits retardés lorsqu'ils sont émis avec un délai de quelques dizaines de secondes. Ils se dispersent dans l'environnement proche par migration et peuvent à leur tour produire de nouvelles fissions et libérer de l'énergie.



Les neutrons thermiques sont plus lents que les neutrons libérés (moins d'énergie cinétique). Les produits de fission (radioactifs) sont des atomes à noyaux plus légers (par exemple : Xénon et Strontium). L'énergie libérée dans la fission de l' $U_{235}$  est égale à environ  $200\text{MeV}$ <sup>1</sup>. Elle se compose, pour 85-90%, de l'énergie cinétique des produits de fission et des neutrons prompts et retardés et, pour 10%, de rayonnements (tableau 1.1). Cette énergie, instantanément convertie en chaleur, est évacuée à l'extérieur du cœur par le réfrigérant (ou fluide caloporteur), le plus souvent l'eau.

Énergie libérée dans la fission de l' $U_{235}$	<i>MeV</i>
Énergie cinétique des produits de fission	165
Énergie cinétique des neutrons prompts et retardés (2-3 neutrons)	5
Rayonnement $\gamma$ prompts (5 rayons)	6
Rayonnement $\beta$ (7 rayons)	8
Antineutrino	12
Rayonnement radioactif $\gamma$	6
Énergie totale libérée	202

TAB. 1.1 – Énergie libérée dans la fission de l'uranium 235

Les neutrons produits par cette fission sont donc rapides ( $5\text{MeV}$ ), il faut les ralentir pour qu'ils créent de nouvelles fissions. On parle de thermalisation des neutrons : l'eau joue ce rôle de "modérateur" ou thermaliseur de neutrons par des chocs successifs (type élastiques) avec les noyaux d'hydrogène de la molécule d'eau. Mais, avant et pendant ce ralentissement, beaucoup de neutrons sont perdus pour la fission thermique du fait de :

- Fuites hors du cœur ;
- Captures dans les structures ;
- Captures dans les résonances d'absorption des noyaux lourds ;
- Captures par les produits de fission,

le terme **capture** signifiant que les neutrons sont retenus par ces éléments et ne se diffusent plus dans l'environnement.

## 1.4 La notion de criticité

Le réacteur est dit **critique** lorsqu'un équilibre s'établit au niveau de la population de neutrons, et donc de la réaction en chaîne. On établit le bilan neutronique suivant pour cet état :

$$\text{Production}_{\text{fission}} + \text{Source}_{\text{extérieure}} = \text{Absorption} + \text{Fuite} \quad (1.2)$$

où on a :

- La Production par fission des neutrons ;
- La Source représentant les neutrons injectés dans le système (source de démarrage du cœur par exemple) ;
- L'Absorption pouvant être fertile ( $U_{238} + 1\text{Neutron} \rightarrow Pu_{239} + 2\text{Électron}$ , le plutonium étant fissile comme l' $U_{235}$ ), une simple excitation ou stérile (les poisons consommables et les barres d'asorption absorbant les neutrons) ;

<sup>1</sup>Unité de mesure de l'énergie :  $1\text{eV} = 1\text{électron-volt}$  ;  $1\text{MeV} = 1\text{méga électron-volt}$  (1 million d'électrons-volts).



– Le terme de Fuite représentant les neutrons qui quittent le système.

Les deux derniers termes sont généralement regroupés sous la dénomination de disparition. Si le bilan est local, la source extérieure représente les neutrons provenant du reste du cœur et si le bilan est global, on injecte une éventuelle source extérieure pour initier la réaction en chaîne de fission ou garantir un certain niveau de flux. Néanmoins, lorsque le cœur est en fonctionnement autonome, après un certain temps d'initialisation, la source devient nulle.

On en déduit que l'équilibre est conditionné par le rapport entre émission de neutrons et disparition. Ainsi le facteur de multiplication dans un milieu infini (sans fuite), noté  $k_\infty$  est défini comme suit :

$$k_\infty = \frac{\text{nombre de neutrons à l'instant } t}{\text{nombre de neutrons à l'instant } t - 1}. \quad (1.3)$$

Dans un milieu borné, le facteur de multiplication effectif noté  $k_{eff}$  est le suivant :

$$k_{eff} = \frac{k_\infty}{1 + \text{Fuite}_{\text{neutron}}}. \quad (1.4)$$

Ils doivent approcher 1 pour garantir cet équilibre. On dira du cœur qu'il est sur-critique si  $k_{eff} > 1$ , et sous-critique si  $k_{eff} < 1$ .

On définit aussi à partir de ces facteurs la notion de **réactivité** noté  $\rho$  et dont l'unité est le *pcm*<sup>2</sup> :

$$\rho = \frac{k - 1}{k} \text{ avec } k = k_\infty \text{ ou } k_{eff}. \quad (1.5)$$

De même que pour les facteurs de multiplication, la réactivité garantit l'équilibre si elle approche de 0.

## 1.5 Représentation de la géométrie et de la composition

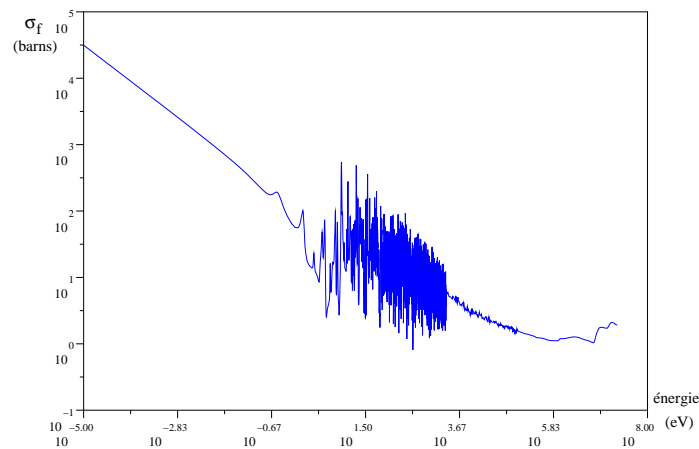
La géométrie générale du cœur est une juxtaposition d'assemblages combustibles contenant les matériaux fissiles représentés sous forme de pâte homogène. Lorsque cet assemblage est divisé en sous volumes (pour le maillage de calcul par exemple), des sections efficaces sont associées à chaque volume. Une **section efficace** exprime la probabilité d'interaction entre un neutron et un noyau contenus dans le cœur d'un réacteur nucléaire. La section efficace est en quelque sorte la surface d'influence autour du noyau : plus la probabilité d'interaction neutron-noyau est forte, plus la surface d'influence est importante. Elle s'exprime donc en *barn*<sup>3</sup>.

Pour chaque élément caractéristique du cœur (uranium, plutonium, eau, ...), on définit, lorsqu'elles existent, les sections efficaces de diffusion, de capture, de fission, etc... Les sections efficaces d'un même noyau s'ajoutent puisqu'elles correspondent à des probabilités indépendantes. Par exemple, les propriétés des neutrons pour la fission se retrouvent si on représente la section efficace de fission de l' $U_{235}$  selon l'énergie d'un neutron (figure 1.4) : la fission est plus "probable" pour les neutrons thermiques ( $\simeq \frac{1}{40} eV$ ) que pour les neutrons rapides ( $\simeq 5 MeV$ ).

Ainsi, lorsque l'assemblage homogène est divisé, axialement et radialement, en plus petits volumes sur lesquels on base le maillage de calcul, on définit les sections efficaces pour chacun de ces volumes. Il peut y avoir un ou plusieurs points d'intégration par volume, mais pour les

<sup>2</sup>Unité de la réactivité multipliée par  $10^{-5}$  (initiales de Pour Cent Mille).

<sup>3</sup>1 *barn* =  $10^{-24} cm^2$

FIG. 1.4 – Section efficace de fission de l' $U_{235}$  (échelle logarithmique)

propriétés physiques (absorption, fuite, fission...), on ne considère qu'une valeur moyennée sur le volume élémentaire pour chaque section efficace. Les sections efficaces traduisent donc la composition d'un volume par la moyenne des sections efficaces des noyaux en présence. Par exemple, pour les zones où l'on insère une croix, la contribution à l'absorption neutronique, définie géométriquement, augmente et celle due à la fission diminue. C'est de cette manière que l'on représente le changement de composition du volume.

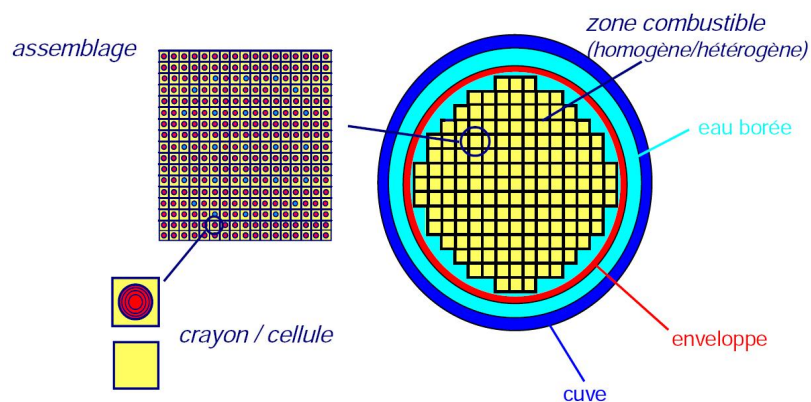


FIG. 1.5 – Géométrie radiale multi-échelle d'un cœur

Dans le cœur, une couche de **réflecteur** ou enveloppe est disposée à la périphérie radiale et aux extrémités axiales. Son but est de renvoyer les neutrons à l'intérieur du cœur de façon à diminuer les fuites vers l'extérieur de la géométrie. Ce réflecteur représente donc une certaine économie de neutrons.

## 1.6 Codes et schémas de calculs

Du fait de la complexité physique d'un cœur, sa simulation numérique est découpée en plusieurs éléments. Tout d'abord, on distingue la neutronique, qui nous intéresse dans ces travaux, de la thermohydraulique. Au CEA, c'est le code FLICA qui sert à étudier le transfert de la chaleur couplée à l'hydraulique des écoulements. Des couplages sont effectués

entre ce dernier et les codes de neutroniques. En effet, au CEA, il existe plusieurs outils distincts pour étudier le comportement de la population de neutrons dans le cœur.

Tout d’abord, on distingue les approches stochastiques (calculs probabilistes) et déterministes (espaces discrétisés). La première, de type Monte-Carlo, est réalisé par le code TRIPOLI et a pour ambition d’offrir des résultats de références au niveau précision. Mais dans notre cas, on considère des modèles déterministes, cherchant un juste équilibre entre précision et vitesse de calcul, qui sont réalisés par les codes APOLLO et CRONOS ([Sanchez *et al.*, 1988, Baudron *et al.*, 1999b]). Nos travaux s’intègrent dans le projet d’unification, de ces outils et d’autres éléments, nommé APOLLO3. Cette unification passe entre autre par la refonte et la réécriture de certaines composantes tel le solveur MINOS ([Baudron et Lautard, 2007]) que nous verrons plus tard.

En simplifiant, on peut découper le protocole de simulation numérique de la neutronique du cœur en trois étapes. Tout d’abord, un calcul précis est réalisé à un échelle très fine de la géométrie et à un instant donné. En particulier, on réalise l’**homogénéisation** de certaines zones pour obtenir des informations exploitables à une échelle plus grossière, c’est-à-dire que pour un volume hétérogène on ne retient qu’une valeur calculée pour être représentative. Grâce à cela, on peut réaliser des calculs sur l’ensemble du cœur, des calculs stationnaires et cinétiques. Les premiers évaluent à un instant donné les informations physiques ou observables désirés pour l’étude du fonctionnement. Les seconds consistent à faire évoluer le système suivant une réalité pratique (on rajoute la variable de temps). Ces derniers sont donc en fin de chaîne et servent par exemple à simuler des situations accidentelles pour s’en prémunir. C’est ce que l’on appelle la cinétique ([Tellier, 1993]).

Nous allons voir dans les chapitres suivants comment ces outils sont conçus et sur quelles méthodes mathématiques et numériques ils reposent. En particulier, nous étudierons plus en détail les outils qui nous intéressent. Mais avant cela, voyons les équations mathématiques modélisant le comportement neutronique.

## Chapitre 2

# Modélisation et mise en équations mathématiques de la population de neutrons

*Dans ce chapitre, nous abordons la modélisation mathématique, c'est-à-dire la mise en équation du comportement physique des neutrons. Nous nous limitons aux éléments dont nous aurons besoin dans les travaux suivants. En premier lieu, nous posons la fonction qui est le sujet de notre étude et de nos calculs : le flux de neutrons. Ainsi, partant de ce flux et de l'équation qui le régit (Boltzmann), nous évoluons vers une forme simplifiée plus adaptée aux contraintes de la cinétique (modèle de la diffusion), i.e. la simulation en temps. On aboutit ainsi à un système complet d'équations que l'on pourra, dans les chapitres suivants, étudier mathématiquement avant de le traiter numériquement.*

Afin de modéliser le comportement neutronique du cœur, nous allons introduire la notion de flux de neutrons et voir les équations qui régissent ce flux. Nous verrons comment sont traitées mathématiquement ses variables et nous étudierons plus précisément le modèle de la diffusion qui nous intéresse. Nous nous limitons aux éléments servant à nos travaux et à leur compréhension. Pour approfondir, les lecteurs pourront se référer aux ouvrages de neutronique [Bussac et Reuss, 1985] et [Reuss, 2003] précédemment cités, et à l'ouvrage plus spécifique à la cinétique [Tellier, 1993]. Dans la même optique, des présentations qui ont servi d'inspiration à celle qui suit, ont été effectués dans les manuscrits [Guérin, 2007] et [Schneider, 2000].

## 2.1 Le flux neutronique

Nous avons vu dans la partie précédente que pour l'étude physique du cœur, nous devons modéliser la population de neutrons. Si ces derniers sont plus dilués que les atomes, ils n'en restent pas moins très nombreux (de l'ordre de  $10^8$  par  $cm^3$  dans un réacteur). On les traite donc de façon statistique. Ils sont représentés par un flux

$$\phi = nv \quad (2.1)$$

produit de la densité de neutrons  $n$  et de leur vitesse  $v$ . Ce flux caractérise les neutrons libres qui circulent dans l'environnement. Remarquons que le flux neutronique n'est pas un flux au sens physique usuel, c'est-à-dire une quantité traversant une surface.

Le flux s'exprime selon sept variables :

- trois variables d'espace  $(x, y, z)$  ou  $\vec{r}$ , position dans l'espace de la mesure ;
- trois variables de vitesse  $(v, \vec{\Omega})$ , i.e. la vitesse absolue  $v$  (énergie cinétique) et la direction angulaire  $\vec{\Omega}$ , donnant l'état des neutrons ;
- une variable de temps  $t$  précisant l'instant d'observation.

Son unité serait donc le  $n.cm^{-2}.s^{-1}.eV^{-1}$ , où  $n$  désigne le neutron. Comme nous l'avons déjà vu dans le chapitre précédent section 1.5, l'autre élément fondamental de la modélisation des phénomènes neutroniques est la notion de **section efficace**. Ces sections sont les grandeurs caractéristiques des probabilités d'interaction des neutrons avec les noyaux environnants. On différencie les sections microscopiques  $\sigma$ , caractéristique d'une cible comme un atome d' $U_{235}$  (cf. figure 1.4), et macroscopiques  $\Sigma$ , caractéristique d'un matériau contenant un grand nombre d'atomes. La première s'exprime en barn ou  $cm^2$  et la seconde en  $cm^{-1}$ . Pour un milieu homogène ces valeurs sont liées :

$$\Sigma = N\sigma \quad (2.2)$$

où  $N$  est le nombre de noyaux par unité de volume. On peut ainsi définir la notion de **taux de réaction**  $\Sigma\phi$  représentant la densité d'interaction, d'un certain type, entre la matière, représentée par  $\Sigma$ , et les neutrons, représentés par  $\phi$ .

## 2.2 L'équation de Boltzmann

Le bilan de la population de neutrons est décrit par l'équation de Boltzmann sur le flux neutronique. Deux opérateurs figurent dans cette équation :

- l'opérateur de transport, qui modélise les neutrons diffusant dans l'espace ;
- l'opérateur de collision, qui exprime les neutrons sortant de collision en fonction de ceux entrant en collision.

L'opérateur de transport peut être écrit sous forme intégrale ou sous forme intégro-différentielle (intégrale pour  $(v, \vec{\Omega})$  et différentielle pour  $\vec{r}$  et  $t$ ). Bien que les deux formulations soient mathématiquement équivalentes, elles conduisent à des méthodes de résolution numérique différentes. Dans notre contexte déterministe, nous utilisons l'équation de Boltzmann sous la seconde forme :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) &= -\vec{\nabla} \cdot [\vec{\Omega} \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)] - \Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \\
&+ \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, (v', \vec{\Omega}') \rightarrow (v, \vec{\Omega}), t) \phi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) d^2\Omega' dv' \\
&+ \frac{1}{4\pi} \chi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \int_0^\infty \int_{4\pi} \nu(\vec{r}, v', \vec{\Omega}') \Sigma_f(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) \phi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) d^2\Omega' dv' \\
&+ S_e(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)
\end{aligned} \tag{2.3}$$

avec dans l'ordre :

- la dérivée en temps du flux égale à ce qui entre et sort du système ;
- l'opérateur de transport ou de divergence modélisant les entrées-sorties du système des neutrons diffusant dans l'espace sans collision, avec les notations :
  - $\vec{\nabla} \cdot \vec{q} = \sum_{i=1}^d \frac{\partial q_i}{\partial x_i}$  ;
  - $\vec{q} = (q_i)_{1 \leq i \leq d}$ ,  $d$  étant le nombre de dimensions de l'espace (1, 2 ou 3) ;
- le taux de réaction associé à la section efficace totale modélisant l'ensemble des neutrons disparaissant par choc, c'est-à-dire par absorption (captés par des atomes) ou par transfert vers une autre vitesse et/ou une autre direction ("rebond") ;
- l'opérateur de diffusion ou de scattering (terme anglais usité pour différencier cette diffusion de celle spatiale), premier élément de l'opérateur de collision, modélisant des neutrons entrant dans le système, avec :
  - $\Sigma_s$ , la section de scattering, ou de transfert, modélisant une interaction de la matière transférant les neutrons depuis une autre direction et/ou à une autre vitesse ;
- la source des neutrons issus de fissions, deuxième élément de l'opérateur de collision, où :
  - $\chi$  est le spectre de neutrons émis par fission, c'est-à-dire que  $\chi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$  est la fraction, de l'ensemble des neutrons produits, émise à la vitesse  $v$  dans la direction  $\vec{\Omega}$  à la position  $\vec{r}$  et au temps  $t$  considérés ;
  - $\nu$  est le nombre moyen de neutrons émis par fission ( $\approx 2.5$ ) ;
  - $\Sigma_f$  est la section efficace de fission ;
- la source externe modélisant les neutrons insérés dans le système depuis l'extérieur de ce dernier.

## 2.3 Traitement des variables de vitesse

Dans le cas qui nous intéresse, déterministe et formulation intégro-différentielle du transport, les spécificités des méthodes numériques utilisées sont dans les approximations sur les variables angulaires et d'énergie. Les variables spatiales et en temps sont traitées de façons plus conventionnelles (exemple : éléments finis,  $\theta$ -schéma...) comme nous le verrons dans les chapitres suivants. En effet, on souhaite discrétiser les termes intégraux pour retrouver des équations différentielles standards.

### 2.3.1 Représentation angulaire

Deux techniques sont principalement utilisées pour discrétiser la variable angulaire  $\vec{\Omega}$ . La première est la technique des ordonnées discrètes, qui discrétise la variable en  $N$  directions. Elle est notamment utilisée par les méthodes  $S_N$ . Plusieurs approches utilisent la deuxième technique qui consiste à faire un développement à ordre fini de  $\vec{\Omega}$  sur des bases complètes de fonctions :

- les approximations  $B_N$  où le terme de transfert  $\Sigma_s$  est développé sur la base des harmoniques sphériques jusqu'à l'ordre  $N$  ;
- les approximations  $P_N$  où c'est le flux qui est développé sur la base des harmoniques sphériques ;
- l'approximation  $SP_N$ , ou  $P_N$  simplifié ([Pomraning, 1993]) où on se ramène à plusieurs équations couplées de type diffusion (cf. section suivante). Elle offre une meilleure approximation du transport que la diffusion avec des temps de calcul bien inférieurs à ceux du  $P_N$  ;
- l'approximation de diffusion, que nous détaillons donc dans la section suivante, correspondant aux modèles  $P_1$  ou  $SP_1$ .

Pour rappel, les harmoniques sphériques, au nombre de  $2l + 1$  pour le degré  $l$ , sont des fonctions dont le laplacien est nul, peuvent s'exprimer en coordonnées sphériques et forment une base orthogonale sur la sphère unité.

### 2.3.2 Représentation énergétique

Usuellement, on effectue un changement de variable pour la vitesse absolue (liant énergie, masse et vitesse) :

$$E = \frac{1}{2}mv^2. \quad (2.4)$$

Ainsi, les équations s'expriment selon une variable d'énergie cinétique  $E$ . Cette variable est toujours discrétisée de la même manière, selon la théorie multigroupe :  $E$  est discrétisée sur un ensemble de groupes ou intervalles d'énergie. Soit  $E_0$  l'énergie maximale que peuvent avoir les neutrons, l'intervalle global d'énergie  $[0, E_0]$  est donc divisé en  $G$  groupes. Chaque groupe  $g$  correspond alors à l'intervalle  $[E_g, E_{g-1}]$  (par convention, la numérotation est décroissante). Dans chacun de ces groupes, le transport des neutrons est traité comme s'ils étaient monocinétiques, c'est-à-dire comme s'ils avaient tous la même énergie. On obtient ainsi autant d'équations couplées qu'il y a de groupes.

Les couplages entre ces équations s'effectuent par l'ajout aux sources, émettant dans le groupe considéré, des taux de transfert vers ce groupe depuis les autres. Inversement pour les absorptions, on ajoute les transferts du groupe considéré vers les autres groupes. Schématiquement, des neutrons sont ralentis d'un groupe  $g$  vers un groupe  $g' > g$  ou propulsés d'un groupe  $g$  vers un groupe  $g' < g$ . On obtient donc un système multigroupe couplé

de  $G$  équations dont les inconnues sont les flux de chaque groupe d'énergie  $g$  :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) &= - \vec{\nabla} \cdot \left[ \vec{\Omega} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \right] - \Sigma_t^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \\
&+ \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, (\vec{\Omega}') \rightarrow (\vec{\Omega}), t) \phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) d^2\Omega' \\
&+ \frac{1}{4\pi} \chi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \nu^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \Sigma_f^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) \phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) d^2\Omega' \\
&+ S_e^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t),
\end{aligned} \tag{2.5}$$

où  $V^g$  est la vitesse des neutrons du groupe  $g$ . On remarque que ce sont les termes liés au transfert et à la fission qui couplent les  $G$  équations.

La qualité d'approximation de ces méthodes de représentation, angulaire et énergétique, dépend des ordres de discrétisation. Plus ils sont élevés, plus la solution se rapproche de la solution exacte mais plus les calculs sont coûteux en mémoire et en temps de calcul.

## 2.4 Le modèle de la diffusion

La grande complexité de l'équation de Boltzmann, due notamment à la dépendance à sept variables, fait que la résolution numérique n'est pas envisageable sur des grands domaines. L'approximation du transport des particules par un opérateur de diffusion est souvent utilisée car elle suppose une simplification de la variable angulaire  $\vec{\Omega}$ .

### 2.4.1 Approximation du transport

Tout d'abord, la variation des sections efficaces étant très lente en comparaison du temps de vie moyen des neutrons, on les supposera dorénavant indépendantes du temps. L'approximation de la diffusion repose sur la loi de Fick. Cette loi exprime l'idée intuitive que les neutrons diffusent des points où ils sont nombreux vers ceux où ils le sont moins, d'autant plus que la différence de niveaux de flux est importante. Ainsi, on définit la notion de courant. On peut extraire de l'équation de Boltzmann (2.3) une densité de courant angulaire :

$$\vec{J}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega} \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t). \tag{2.6}$$

Dérivant de cela, la loi de Fick exprime indépendamment de  $\vec{\Omega}$  et proportionnel au gradient du flux, le courant suivant :

$$\vec{p}(\vec{r}, v, t) = -D(\vec{r}, v) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, v, t). \tag{2.7}$$

$D$  est le coefficient de diffusion en  $cm$ , égal en première approche à  $\frac{1}{3\Sigma_t}$ .

Mais cette loi n'est valable que si les variations en espace et en temps sont lentes, ce qui implique les hypothèses suivantes :

- les hétérogénéités géométriques sont faibles ;
- la section efficace d'absorption est faible devant la section efficace de diffusion ;
- on ne se place pas trop près des interfaces entre des milieux différents ;
- on ne se place pas trop près des sources concentrées.



Notons que le courant correspond aussi au degré de liberté d'ordre 1 dans les harmoniques sphériques, d'où sa correspondance avec les approximations  $P_1$  ou  $SP_1$ . C'est aussi pour ça que l'on nomme parfois le flux  $\phi$  flux pair et le courant  $\vec{p}$  flux impair.

### 2.4.2 Équations de la diffusion

L'équation de la diffusion s'obtient donc en intégrant l'équation de Boltzmann (2.3) par rapport à la variable angulaire et en remplaçant le courant selon la définition (2.6) et la loi de Fick (2.7). Ce qui donne en formulation multigroupe déduite de l'équation (2.5), le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\vec{r}, t) = - \vec{\nabla} \cdot \vec{p}^g(\vec{r}, t) - \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) \\ \quad + \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G \nu^{g'}(\vec{r}) \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) + S_e^g(\vec{r}, t), \\ \vec{p}^g(\vec{r}, t) = - D^g(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, t). \end{array} \right. \quad (2.8)$$

Ce système flux-courant est donc une formulation mixte du problème. Si la seconde égalité est nommée loi de Fick, usuellement, on fait référence à la première comme l'équation de bilan. En effet, l'évolution du bilan neutronique ( $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ ) est égale à ce qui apparaît (fission, scattering et source extérieure) moins ce qui disparaît (divergence et absorption totale).

## 2.5 Concentration des précurseurs

Pour pleinement modéliser la cinétique neutronique, il faut intégrer au problème une autre notion. En effet, comme nous l'avons vu dans la section 1.3, tous les neutrons produits d'une fission ne sont pas émis instantanément. Une partie est retardée, liée à une décroissance par radioactivité  $\beta^-$  d'un fragment de fission. Bien que la proportion de ces neutrons retardés soit faible (0.7% pour la fission induite de l'uranium 235 par exemple), ils jouent un rôle fondamental dans la cinétique des réacteurs. Leur émission peut être décalée par rapport à la fission d'un laps de temps allant de la seconde à la minute, c'est-à-dire très long devant la durée de vie des neutrons qui, elle, se mesure plutôt en microsecondes.

Pour modéliser ce comportement, on introduit la notion de concentration des précurseurs. Lorsque la décroissance  $\beta^-$  du produit de fission est effectivement suivie d'une émission neutronique, on dit que le produit est le noyau précurseur. On regroupe ces concentrations selon les différents processus émetteurs. Pour chaque groupe, on associe deux paramètres :

- la proportion  $\beta^k$  des neutrons retardés issus du groupe de précurseurs  $k$  parmi l'ensemble de ceux émis par la fission. Cette valeur est ensuite subdivisée en  $\beta^{kg}$  selon le groupe d'énergie  $g$  dans lequel les neutrons retardés, issus de ces précurseurs, sont émis. Leur somme sur les  $K$  groupes de précurseurs  $\beta^g = \sum_{k=1}^K \beta^{kg}$  est la fraction totale des neutrons retardés émis dans le groupe d'énergie  $g$  ;
- la constante de décroissance radioactive ou de désintégration  $\lambda^k$  du groupe de précurseurs  $k$  en  $s^{-1}$ .

Ainsi si on définit  $c^k$  comme la concentration de précurseurs du groupe  $k$ , on peut

reformuler l'équation de bilan du système (2.8) comme suit :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{Vg} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\vec{r}, t) = & - \vec{\nabla} \cdot \vec{p}^g(\vec{r}, t) - \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) \\
& + \chi_p^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G (1 - \beta^{g'}) \nu^{g'}(\vec{r}) \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) \\
& + \sum_{k=1}^K \chi_d^{kg}(\vec{r}) \lambda^k c^k(\vec{r}, t) + S_e^g(\vec{r}, t), \tag{2.9}
\end{aligned}$$

où  $\chi_p^g$  et  $\chi_d^{kg}$  sont respectivement les spectres de fission des neutrons prompts et retardés du groupe  $g$  et, pour le deuxième, associé aux précurseurs du groupe  $k$ . Ainsi la source de fission est dédoublée pour différencier les deux sortes de neutrons. L'équation régissant la concentration de chaque groupe est donc la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} c^k(\vec{r}, t) = -\lambda^k c^k(\vec{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \beta^{kg'} \nu^{g'}(\vec{r}) \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t). \tag{2.10}$$

On introduit alors, dans l'optique du traitement mathématique de ces équations, la section efficace de production totale :  $\chi^g \nu \sigma_f^{g'} = \chi_p^g (1 - \beta^{g'}) \nu \sigma_f^{g'} + \sum_{k=1}^K \chi_d^{kg} \beta^{kg'} \nu \sigma_f^{g'}$ . En substituant  $\lambda^k c^k$  grâce à l'égalité (2.10), l'équation (2.9) peut se reformuler ainsi :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{Vg} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\vec{r}, t) = & - \vec{\nabla} \cdot \vec{p}^g(\vec{r}, t) - \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) \\
& + \sum_{g'=1}^G \chi^g \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) + S_d^g(\vec{r}, t) + S_e^g(\vec{r}, t), \tag{2.11}
\end{aligned}$$

où  $S_d^g = - \sum_{k=1}^K \chi_d^{kg} \frac{\partial c^k}{\partial t}$  est la source du groupe  $g$  associée aux neutrons retardés.

## 2.6 Calcul à valeur propre

Ensuite, on doit introduire les équations du régime stationnaire qui correspond à l'annulation de la dérivée en temps du flux. En particulier, les équations stationnaires sont nécessaires pour évaluer le flux initial avant d'utiliser le système précédent pour effectuer l'évolution. Nous considérerons dans ce cas que nous n'avons pas de sources externes ou de précurseurs mais seulement celles issues de fissions. Dans cette configuration, l'équation de Boltzmann n'a une solution que dans le cas particulier d'un réacteur stationnaire critique. En effet, si la dérivée en temps est nulle, le bilan est à l'équilibre (production = disparition). Comme nous l'avons vu à la page 7 dans la section 1.4 sur la criticité, cela implique que le coefficient de multiplication  $k_{eff}$  soit égal à 1.

Pour contourner cette difficulté et évaluer l'état de stabilité (la réactivité) de la réaction en chaîne, on introduit un paramètre critique qui modifie fictivement les données du calcul (la source) de façon à le rendre critique. Ce paramètre n'est autre que le facteur de multiplication effectif  $k_{eff}$ . Ce calcul devient alors un problème à valeur propre dont on cherche

le mode fondamental, i.e. le flux associé à la plus grande valeur propre  $k = k_{eff}$ . Dédit du système (2.8), ce problème s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}^g(\vec{r}, t) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, t) - \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) \\ = \frac{1}{k} \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G \nu^{g'}(\vec{r}) \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t) + S_e^g(\vec{r}, t), \\ \vec{p}^g(\vec{r}, t) = -D^g(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, t). \end{array} \right. \quad (2.12)$$

## 2.7 Conditions aux limites

Finalement, avant de voir comment on résout ces équation, il faut détailler les conditions aux limites en temps et en espace. Si le problème étudié ne propose pas de flux initial, nous pouvons utiliser, comment nous l'avons vu précédemment, un calcul à valeur propre pour déterminer la valeur des flux  $\phi_0^g$  à l'instant  $t = 0$ . Ces valeurs connues, on déduit les concentrations de précurseurs initiales avec la formule

$$c^k(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\lambda^k} \sum_{g'=1}^G \beta^{kg'} \nu \sigma_f^{g'} \phi_0^{g'}(\vec{r}), \quad (2.13)$$

déduite de l'équation (2.10) avec la dérivée en temps nulle.

Pour les limites spatiales, les conditions s'expriment sur le flux ou le courant. On en distingue trois, associées chacune à un type de modélisation du comportement au bord :

**Dirichlet** lorsque l'on est au bord du cœur (réflecteur compris), cette condition matérialise la limite d'un matériau très absorbant :

$$\phi^g = 0 \text{ sur le bord du domaine}; \quad (2.14)$$

**Neumann** si un domaine étudié possède des symétries (un quart de cœur par exemple), le comportement dans un sous domaine et ses symétriques sera identique. De même, si l'on a une réflexion du flux sans perte, aux interfaces, ce qui entre est égal à ce qui sort, d'où un courant normal au bord nul ( $\vec{n}$  est le vecteur normal du bord considéré) :

$$\vec{p}^g \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur le bord du domaine}; \quad (2.15)$$

**Robin** pour lier des domaines non symétriques ou modéliser d'autres cas, on utilise une condition plus générale avec un coefficient d'Albédo  $\tau^{g' \rightarrow g}$  (positif et dépendant du matériau) liant courant et flux multigroupe :

$$\vec{p}^g \cdot \vec{n} = \sum_{g'=1}^G \tau^{g' \rightarrow g} \phi^{g'} \text{ sur le bord du domaine.} \quad (2.16)$$

Maintenant que nous avons présenté l'ensemble des éléments de modélisation dont nous aurons besoin dans nos travaux, nous allons voir les aspects plus mathématiques de ces problèmes. En particulier, pour comprendre et justifier les choix numériques, certaines propriétés de la solution sont nécessaires.

## Chapitre 3

# Traitement et résultats mathématiques des équations de la cinétique neutronique

*Dans ce chapitre, nous reprenons les équations issues de la modélisation, étape par étape. Pour chaque formulation, nous étudions des résultats d'existence et d'unicité et les propriétés des solutions. En particulier, dans l'optique de l'application des méthodes aux éléments finis, nous posons les différentes formulations variationnelles et leurs spécificités. Pour développer les résultats du système d'équations mixte, nous présentons l'approximation en temps telle que nous l'utiliserons par la suite. Finalement, dans la dernière section, nous effectuons le bilan des résultats bibliographiques, de leurs conditions théoriques et de leurs applications à notre contexte. Tous ces éléments sont orientés pour la présentation théorique des approches numériques.*

Les méthodes de résolution des équations de la cinétique, ainsi que certains éléments de modélisation, que nous verrons plus loin, nécessitent que nous étudions les propriétés du système. En particulier, nous discuterons de l'existence, l'unicité et la positivité de la solution du problème stationnaire et en évolution. Pour cette étude, nous introduirons la formulation variationnelle des équations qui nous servira pour la discrétisation par éléments finis. Nous nous référerons plusieurs fois à des ouvrages de la littérature pour certains résultats. Leur lecture pourra compléter cette présentation dans certains domaines.

### 3.1 Rappel du problème et des notations

Avant de commencer, rappelons le système d'équations formant le problème introduit dans le chapitre précédent : les équations de la cinétique espace temps sous leur forme multigroupe et sans source extérieure, forme simplifiée de l'équation de transport aussi appelée équations de la diffusion

$$\begin{cases} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} \phi) - [\Sigma] \phi + S_d, \\ \phi(t=0) = \phi_0, \phi|_{\Gamma_D} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_N} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_R} = [\tau] \phi, \end{cases} \quad (3.1)$$

où  $S_d = -[\chi_d] \frac{\partial c}{\partial t}$  et  $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \partial\Omega$ , frontière du domaine  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ . Pour le confort de lecture, nous utilisons des notations simplifiées, vectorielles et matricielles sur les groupes :

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi^1 \\ \vdots \\ \phi^G \end{pmatrix}, [\Sigma] = \left( \Sigma_t^{g' \rightarrow g} - \Sigma_s^{g' \rightarrow g} - \chi^g \nu \Sigma_f^{g'} \right)_{1 \leq g, g' \leq G} \quad \text{où } \Sigma_t^{g' \rightarrow g} = \begin{cases} \Sigma_t^g & \text{si } g = g', \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Pour la résolution, nous compléterons aussi ce problème avec l'équation (2.10) pour les neutrons retardés. Néanmoins, cette adjonction ne change rien à l'étude théorique suivante puisque cette équation différentielle du premier ordre est traitée séparément et de façon exacte comme nous le verrons dans la section 3.5 et l'algorithme 2.

Nous avons vu précédemment comment nous aboutissions par modélisation à cette formulation du problème. Entre autre, on pourra trouver dans la section 5 du chapitre XXI de l'ouvrage [Dautray et Lions, 1984] des éléments de preuve et les conditions de la consistance du modèle de la diffusion comme bonne approximation du transport. Dans le chapitre précédent, nous avons aussi détaillé comment nous faisons évoluer la formulation de ce problème pour une bonne modélisation.

Dans ce chapitre, nous allons reprendre cette évolution en la complétant par les formulations faibles associées. Ces formulations variationnelles sont nécessaires pour l'introduction de méthodes aux éléments finis comme celles utilisées par MINOS et, par extension, nos travaux. Pour les différentes étapes, nous référencerons des résultats théoriques intéressants de la littérature.

Il faut noter que si les problèmes introduits dans ce chapitre sont transposables sous forme multigroupe, suivant les notations précédentes, l'essentiel des résultats énoncés sont obtenus en monogroupe ( $G = 1$ ). L'extension de ces résultats est non triviale et le lecteur pourra se reporter à la littérature pour plus de détails.

### 3.2 Formulation variationnelle non mixte

On considère l'espace de Hilbert  $L^2(\Omega) = \{u : \Omega \mapsto \mathbb{R} / \|u\|_{L^2(\Omega)} < \infty\}$ , son produit scalaire et sa norme :

$$\langle u, v \rangle = \int_{\Omega} u(\vec{r})v(\vec{r}) \vec{dr}, \quad \|u\|_{L^2(\Omega)} = \sqrt{\langle u, u \rangle}. \quad (3.2)$$

On a donc équivalence à résoudre le problème (3.1), en ne considérant que la condition de Dirichlet ( $\partial\Omega = \Gamma_D$ ), et à trouver  $\phi \in C^0([0, T], H_0^1(\Omega))$  (i.e.  $\phi$  est continu pour la variable temps et, pour chaque  $t$ ,  $\phi(t) \in H_0^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) / u|_{\partial\Omega} = 0 \text{ et } \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), 1 \leq i \leq d\}$ ) tel que

$$\langle V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t}, \psi \rangle = a(\phi, \psi) - t(\phi, \psi) + \langle S_d, \psi \rangle \quad (3.3)$$

$\forall \psi \in H_0^1(\Omega)$ , indépendant du temps, et avec

$$a(\phi, \psi) = - \int_{\Omega} D \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} \psi \vec{dr} \quad \text{et} \quad t(\phi, \psi) = \int_{\Omega} [\Sigma] \phi \psi \vec{dr}. \quad (3.4)$$

Pour rappel, on obtient cette formulation variationnelle en multipliant la première équation (3.1) par une fonction test  $\psi$  et en appliquant la formule de Green sur le terme de divergence. Les termes de bord disparaissent du fait de l'espace des fonctions tests considéré ( $H_0^1(\Omega)$ ). On introduit ensuite l'espace  $L^\infty(\Omega) = \{u : \Omega \mapsto \mathbb{R} / \|u\|_{L^\infty(\Omega)} < \infty\}$  et les normes suivantes :

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)} = \|u\|_{H^1(\Omega)} = \left( \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^d \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}; \quad (3.5)$$

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} = \sup_{\vec{r} \in \Omega} |u(\vec{r})|. \quad (3.6)$$

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on note qu'il existe des constantes positives indépendantes du temps  $C$ ,  $C_0$  et  $C_1$  telles que :

$$|a(\phi, \psi)| \leq C \|\phi\|_{H_0^1(\Omega)} \|\psi\|_{H_0^1(\Omega)}, \quad (3.7)$$

$$|t(\phi, \psi)| \leq C_0 \|\phi\|_{L^2(\Omega)} \|\psi\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 \|\phi\|_{H_0^1(\Omega)} \|\psi\|_{H_0^1(\Omega)} \quad (3.8)$$

Alors, on a le théorème 3.1, démontré dans la section 7 du chapitre XVIII de l'ouvrage [Dautray et Lions, 1984].

**Théorème 3.1** *Soit le problème (3.3), on suppose que :*

- $D$  et  $[\Sigma]$  sont des fonctions de  $L^\infty(\Omega \times ]0, T[)$  ;
- $D$  et  $[\Sigma]$  sont supérieurs à une constantes strictement positives ;
- $\phi_0 \in L^2(\Omega)$  ;
- $S_d \in L^2(\Omega)$  ;

*alors on a existence et unicité d'une solution à ce problème  $\phi \in C^0([0, T], H_0^1(\Omega))$ .*

L'extension aux autres conditions aux limites (Neumann et Robin) pourra s'effectuer en reprenant les démonstrations de ce théorème. Ce résultat s'entend bien sûr pour chaque groupe d'énergie  $g$  suivant les définitions de la section précédente. Dans l'exposé complet de [Dautray et Lions, 1984], on trouvera de plus ce résultat étendu à une formulation du problème (3.3) continue en énergie, c'est-à-dire sans approximation multigroupe.

### 3.3 Évolution et positivité de la solution

Outre l'existence et l'unicité de la solution, il est utile de connaître certaines bonnes propriétés dont peut disposer la solution de notre problème. Ainsi, dans le même ouvrage [Dautray et Lions, 1984], section 5, chapitre XVIII, est démontré le résultat suivant.

**Théorème 3.2** *Soit le problème (3.3), on suppose que :*

- $D$  et  $[\Sigma]$  sont des fonctions de  $L^\infty(\Omega \times ]0, T[)$  ;
- $D$  et  $[\Sigma]$  sont supérieurs à une constantes strictement positives ;
- $\phi_0 \geq 0$  presque partout dans  $\Omega$  ;
- $S_d \geq 0$  au sens des distributions ( $\langle S_d, \psi \rangle \geq 0, \forall \psi \geq 0$  ;

alors on a pour tout  $t \in [0, T]$  :  $\phi(t) \geq 0$  presque partout dans  $\Omega$ .

Ce résultat est valable pour toutes les conditions aux limites indépendantes du temps.

Puisque le flux est une densité de neutrons par unité de temps, il est cohérent que l'on puisse démontrer sa positivité. La physique impliquerait de plus une stricte positivité dans le cœur d'un réacteur, mais ce résultat, bien qu'intéressant, n'est pas démontré à notre connaissance. Par contre, en plus de cette minoration, on peut poser une limite supérieure au flux. La démonstration de ce résultat suit, dans [Dautray et Lions, 1984], celle du théorème 3.2.

**Théorème 3.3** *Soit le problème (3.1), on suppose que :*

- $D$  et  $[\Sigma]$  sont des fonctions de  $L^\infty(\Omega \times ]0, T[)$  ;
- $D$  et  $[\Sigma]$  sont supérieurs à une constantes strictement positives ;
- $\phi_0 \in L^\infty(\Omega)$  ;

alors on a pour tout  $t \in [0, T]$  :  $\phi(t) \in L^\infty(\Omega)$  et  $\|\phi(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \|\phi_0\|_{L^\infty(\Omega)}$ .

Ce résultat est valable pour toutes les conditions aux limites indépendantes du temps. De plus, il est établi pour la formulation forte du problème (3.1) puisque on ne s'intéresse qu'à la variable temporelle pour le démontrer. Nous reviendrons dans la section 3.7 sur l'application de ces résultats dans la pratique.

### 3.4 Formulations variationnelles mixtes

Pour l'instant, nous avons étudié un problème dont seul le flux est l'inconnu. Néanmoins, dans le chapitre précédent, section 2.4, nous avons discuté de l'intérêt d'introduire la notion de courant pour une meilleure modélisation, liée à la représentation angulaire ou directionnelle de l'évolution des neutrons. C'est donc cette forme mixte que nous allons maintenant considérer :

$$\begin{cases} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi - [\Sigma] \phi + S_d, \\ -D^{-1} \vec{p}_\phi = \vec{\nabla} \phi, \\ \phi|_{\Gamma_D} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_N} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_R} = [\tau] \phi, \end{cases} \quad (3.9)$$

où  $S_d = -[\chi_d] \frac{\partial c}{\partial t}$  et  $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \partial\Omega$ , frontière du domaine  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ .

Le flux  $\phi$  solution de ce problème est, par définition, aussi solution du système (3.1). On peut donc lui étendre les résultats déjà exposés. En particulier, s'il on suppose que  $(\phi_1, \vec{p}_{\phi_1})$  et  $(\phi_2, \vec{p}_{\phi_2})$  sont tous deux solutions du système (3.9), alors  $\phi_1$  et  $\phi_2$  sont solution

du problème (3.1). L'unicité de la solution de ce dernier implique  $\phi_1 = \phi_2$ , et par définition (loi de Fick)  $\vec{p}_{\phi_1} = \vec{p}_{\phi_2}$ , d'où l'unicité de la solution du problème mixte.

Ensuite et de même que précédemment, pour l'introduction de méthodes aux éléments finis, nous allons voir les formulations variationnelles de ces équations mixtes. Pour cela, on introduit l'espace  $H(\text{div}, \Omega) = \{\vec{q} \in (L^2(\Omega))^d / \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \in L^2(\Omega)\}$ . Il existe donc deux formulations différentes déduites du problème (3.9), en ne considérant que la condition de Dirichlet ( $\partial\Omega = \Gamma_D$ ). En effet, après :

- la multiplication de la première ligne par une fonction test de flux  $\psi$  ;
- la multiplication de la seconde ligne par une fonction test de courant  $\vec{q}$  ;
- l'intégration des deux équations sur  $\Omega$  ;

deux options sont possibles pour l'application de la formule de Green :

- l'utiliser pour la divergence du courant de la première équation, le problème est alors de trouver, pour chaque  $t$ , la solution  $(\phi(t), \vec{p}_\phi(t)) \in H_0^1(\Omega) \times (L^2(\Omega))^d$  telle que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \vec{dr} = \int_{\Omega} \vec{p}_\phi \cdot \vec{\nabla} \psi \vec{dr} - \int_{\Omega} [\Sigma] \phi \psi \vec{dr} + \int_{\Omega} S_d \psi \vec{dr}, \\ \int_{\Omega} -D^{-1} \vec{p}_\phi \cdot \vec{q} \vec{dr} = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{q} \vec{dr}, \end{cases} \quad (3.10)$$

$\forall(\psi, \vec{q}) \in H_0^1(\Omega) \times (L^2(\Omega))^d$ , c'est la formulation mixte primale ;

- l'utiliser pour le gradient du flux de la seconde équation, le problème est alors de trouver, pour chaque  $t$ , la solution  $(\phi(t), \vec{p}_\phi(t)) \in L^2(\Omega) \times H(\text{div}, \Omega)$  telle que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \vec{dr} = - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi \psi \vec{dr} - \int_{\Omega} [\Sigma] \phi \psi \vec{dr} + \int_{\Omega} S_d \psi \vec{dr}, \\ \int_{\Omega} -D^{-1} \vec{p}_\phi \cdot \vec{q} \vec{dr} = - \int_{\Omega} \phi \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \vec{dr}, \end{cases} \quad (3.11)$$

$\forall(\psi, \vec{q}) \in L^2(\Omega) \times H(\text{div}, \Omega)$ , c'est la formulation mixte duale.

C'est cette seconde formulation, mixte duale, qui est résolue par le solveur MINOS, que nous verrons dans le chapitre suivant, et que nous utiliserons pour notre étude. Moins restrictive sur la régularité du flux, elle s'avère plus pertinente sur certains éléments de modélisation. On peut l'étendre à l'ensemble des conditions aux limites. Ainsi résoudre le problème (3.9) est équivalent à trouver  $(\phi(t), \vec{p}_\phi(t)) \in L^2(\Omega) \times H(\text{div}, \Omega, \Gamma_N)$  vérifiant :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \vec{dr} = - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi \psi \vec{dr} - \int_{\Omega} [\Sigma] \phi \psi \vec{dr} + \int_{\Omega} S_d \psi \vec{dr}, \\ \int_{\Omega} -D^{-1} \vec{p}_\phi \cdot \vec{q} \vec{dr} = - \int_{\Omega} \phi \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \vec{dr} + \int_{\Gamma_R} [\tau]^{-1} (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})(\vec{q} \cdot \vec{n}) ds, \end{cases} \quad (3.12)$$

$\forall(\psi, \vec{q}) \in L^2(\Omega) \times H(\text{div}, \Omega, \Gamma_N)$  avec  $H(\text{div}, \Omega, \Gamma_N) = \{\vec{q} \in H(\text{div}, \Omega) / \vec{q} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_N\}$  et  $\vec{n}$  est la normale sortante du bord considéré du domaine. Rappelons que nous sommes toujours en formulation multigroupe, c'est-à-dire vectorielle sur les groupes d'énergie, comme introduit dans la section 3.1.



### 3.5 Traitement analytique de la variable temporelle

Comme nous l'avons vu, la solution de ces différents problèmes est continue pour la variable temporelle. Nous allons, dans cette section, partiellement anticiper la présentation des méthodes de résolution comme celles utilisées dans le solveur cinétique de MINOS (chapitre 4). En effet, en faisant cela, nous obtiendrons un problème mixte indépendant du temps qui nous permettra d'étudier et d'obtenir des résultats supplémentaires sur la solution du problème. Donc, considérons le problème continu, en réintégrant l'équation des précurseurs vue à la section 2.5 :

$$\begin{cases} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi - [\Sigma] \phi + S_d, \\ -D^{-1} \vec{p}_\phi = \vec{\nabla} \phi, \\ \frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c + [\beta \nu \Sigma_f] \phi, \\ \phi(t=0) = \phi_0, \phi|_{\Gamma_D} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_N} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_R} = [\tau] \phi, \end{cases} \quad (3.13)$$

où  $S_d = -[\chi_d] \frac{\partial c}{\partial t}$ . Ce système est la forme la plus complète que nous chercherons à résoudre par la suite.

Le solveur de cinétique utilisé pour ces équations au CEA ([Baudron et Lautard, 2007, Schneider *et al.*, 2003]), et qui nous servira de référence pour les applications numériques, résout le système (3.13) en temps selon un schéma à un pas de temps. On discrétise l'intervalle de temps étudié  $[0, T]$  en un ensemble de sous intervalles :

$$[0, T] = \bigcup_k [t_k, t_{k+1}]. \quad (3.14)$$

Ensuite, on décompose le flux et le courant à l'aide d'un  $\theta$ -schéma pour chaque sous intervalle :

$$\begin{cases} \phi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t_k) \omega_k(t) + \phi(\vec{r}, t_{k+1}) \omega_{k+1}(t), \\ \vec{p}_\phi(\vec{r}, t) = \vec{p}_\phi(\vec{r}, t_k) \omega_k(t) + \vec{p}_\phi(\vec{r}, t_{k+1}) \omega_{k+1}(t), \end{cases} \quad (3.15)$$

$\forall t \in \Delta t_k = [t_k, t_{k+1}]$ , le  $k$ -ème intervalle de temps. Les  $\omega_i$  sont des polynômes indépendants de l'espace et de l'énergie tels que :

$$\begin{aligned} \omega_k(t_k) &= 1, & \omega_k(t_{k+1}) &= 0, & \int_{t_k}^{t_{k+1}} \omega_k(t) dt &= (1 - \theta) \delta t_k, \\ \omega_{k+1}(t_k) &= 0, & \omega_{k+1}(t_{k+1}) &= 1, & \int_{t_k}^{t_{k+1}} \omega_{k+1}(t) dt &= \theta \delta t_k, \end{aligned}$$

où  $\delta t_k = t_{k+1} - t_k$  est la longueur de l'intervalle, i.e. un pas de temps. Les sections efficaces sont supposées, quant à elles, linéaires :

$$[\Sigma](\vec{r}, t) = [\Sigma](\vec{r}, t_k) l_k(t) + [\Sigma](\vec{r}, t_{k+1}) l_{k+1}(t), \quad (3.16)$$

où

$$l_k(t) = \frac{t_{k+1} - t}{t_{k+1} - t_k} \quad \text{et} \quad l_{k+1}(t) = \frac{t - t_k}{t_{k+1} - t_k}.$$

Les précurseurs sont traités analytiquement en intégrant sur  $[0, t]$  l'équation (2.10), reprise à la troisième ligne du système (3.13) :

$$c(t) = c(0) e^{-\lambda t} + \int_0^t e^{-\lambda(t-s)} [\beta \nu \Sigma_f](s) \phi(s) ds. \quad (3.17)$$

Par récurrence, on obtient :

$$\begin{aligned} c(t_{k+1}) &= c(t_k)e^{-\lambda\delta t_k} + e^{-\lambda\delta t_k} \int_{\Delta t_k} e^{-\lambda(t_k-t)} [\beta\nu\Sigma_f](t)\phi(t) dt \\ &= c(t_k)e^{-\lambda\delta t_k} + \sum_{g=1}^G \sum_{p,q=k}^{k+1} b_{pq} [\beta\nu\Sigma_f](t_p)\phi(t_q), \end{aligned} \quad (3.18)$$

où

$$b_{pq} = e^{-\lambda\delta t_k} \int_{\Delta t_k} e^{-\lambda(t_k-t)} l_p(t)\omega_q(t) dt.$$

Et ainsi, pour chaque pas de temps, connaissant  $(\phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k))$ , on doit résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi(t_{k+1}) + [\Sigma^{k+1}] \phi(t_{k+1}) = [\Sigma^k] \phi(t_k) - \frac{1-\theta}{\theta} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi(t_k) + S_d, \\ [D^{k+1}] \vec{p}_\phi(t_{k+1}) + \vec{\nabla} \phi(t_{k+1}) = -\frac{1-\theta}{\theta} \vec{\nabla} \phi(t_k) + [D^k] \vec{p}_\phi(t_k), \end{cases} \quad (3.19)$$

où :

$$\begin{aligned} [\Sigma^q] &= \frac{1}{\theta\delta t_k} V^{-1} + (-1)^{q-k+1} \sum_{p=k}^{k+1} \left( \frac{a_{pq}}{\theta\delta t_k} [\Sigma](t_p) + \frac{b_{pq}}{\theta\delta t_k} [\chi_d][\beta\nu\Sigma_f](t_p) \right), \\ a_{pq} &= \int_{\Delta t_k} l_p(t)\omega_q(t) dt, \quad S_d = \frac{1 - e^{-\lambda\delta t_k}}{\theta\delta t_k} [\chi_d]c(t_k), \\ [D^q] &= (-1)^{q-k} \sum_{p=k}^{k+1} \frac{a_{pq}}{\theta\delta t_k} D^{-1}(t_p). \end{aligned}$$

Le système (3.19) suit toujours le formalisme multigroupe de la section 3.1. Algorithmiquement, ce système et les précurseurs sont traités alternativement. Connaissant  $c(t_k)$ , on détermine  $\phi(t_{k+1})$  en résolvant les équations (3.19), ce qui nous donne directement  $c(t_{k+1})$  avec l'égalité (3.18).

### 3.6 Propriétés du problème mixte duale

En considérant la formulation variationnelle du système (3.19), nous allons poser des résultats d'existence et d'unicité basés sur cette formulation mixte. Ainsi, résoudre le problème (3.19), discrétisation en temps des équations (3.13), avec des conditions de Dirichlet ( $\partial\Omega = \Gamma_D$ ), connaissant  $(\phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k))$ , équivaut à trouver  $(\phi(t_{k+1}), \vec{p}_\phi(t_{k+1})) \in L^2(\Omega) \times H(\text{div}, \Omega)$  solution de :

$$\begin{cases} b(\vec{p}_\phi(t_{k+1}), \psi) - t(t_{k+1}, \phi(t_{k+1}), \psi) = g(t_k, \phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k), \psi), \\ a(t_{k+1}, \vec{p}_\phi(t_{k+1}), \vec{q}) + b(\vec{q}, \phi(t_{k+1})) = f(t_k, \phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k), \vec{q}), \end{cases} \quad (3.20)$$

$\forall (\psi, \vec{q}) \in L^2(\Omega) \times H(\text{div}, \Omega)$  et avec

$$\begin{aligned} a(t_k, \vec{p}, \vec{q}) &= \int_{\Omega} [D^k] \vec{p} \cdot \vec{q} \, dr, \\ b(\vec{p}, \psi) &= - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p} \psi \, dr, \\ t(t_k, \phi, \psi) &= \int_{\Omega} [\Sigma^k] \phi \psi \, dr, \\ f(t_k, \phi, \vec{p}, \vec{q}) &= -\frac{1-\theta}{\theta} b(\vec{q}, \phi) + a(t_k, \vec{p}, \vec{q}), \\ g(t_k, \phi, \vec{p}, \psi) &= -t(t_k, \phi, \psi) - \frac{1-\theta}{\theta} b(\vec{p}, \psi) - \int_{\Omega} S_d \psi \, dr. \end{aligned}$$

Notons que  $a(t_k, \cdot, \cdot)$ ,  $b(\cdot, \cdot)$  et  $t(t_k, \cdot, \cdot)$  sont des formes bilinéaires continues.

Nous renvoyons aux ouvrages [Brezzi et Fortin, 1991] et [Roberts et Thomas, 1991] pour la démonstration des théorèmes suivants. On pose  $V = L^2(\Omega)$ ,  $W = H(\text{div}, \Omega)$  et  $W'$  le dual de  $W$ . De plus, on rappelle qu'une forme bilinéaire  $a$  est  $W$ -elliptique s'il existe  $\alpha > 0$  tel que  $a(q, q) \geq \alpha \|q\|_W^2$ ,  $\forall q \in W$ .

**Théorème 3.4** *On suppose que :*

- $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  est  $W$ -elliptique ;
- $t(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  est  $V$ -elliptique ;

alors  $\forall f(t_k, \phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k), \cdot) \in W'$  et  $\forall g(t_k, \phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k), \cdot) \in V'$ , le problème (3.20) admet une solution unique.

La preuve est simplement une application du théorème de Lax-Milgram au problème obtenu en faisant la différence des deux équations du système (3.20). En effet, la forme bilinéaire  $K$ , définit comme

$$K((\phi, \vec{p}), (\psi, \vec{q})) = a(t_{k+1}, \vec{p}, \vec{q}) + b(\vec{q}, \phi) + t(t_{k+1}, \phi, \psi) - b(\vec{p}, \psi), \quad (3.21)$$

est elliptique et le second membre  $F(\psi, \vec{q})$  est linéaire. Mais ce théorème n'est pas applicable dans notre cas car  $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  n'est pas elliptique sur  $H(\text{div}, \Omega)$  pour la norme associée :

$$\|\vec{q}\|_{H(\text{div}, \Omega)} = \left( \sum_{i=1}^d \|q_i\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\vec{\nabla} \cdot \vec{q}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}. \quad (3.22)$$

Nous avons donc besoin de conditions moins restrictives sur  $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  mais cela implique des hypothèses sur  $b$ .

**Théorème 3.5** *Soit l'espace  $\ker B = \{\vec{q} \in W / b(\vec{q}, \psi) = 0, \forall \psi \in V\}$ , on suppose que :*

- $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  est semi-définie positive et  $(\ker B)$ -elliptique :  $\exists \alpha > 0$ ,  $a(t_{k+1}, \vec{q}, \vec{q}) \geq \alpha \|\vec{q}\|_W^2$ ,  $\forall \vec{q} \in \ker B$  ;
- $b$  vérifie la condition inf-sup :  $\exists \beta > 0$ ,  $\inf_{\psi \in V} \sup_{\vec{q} \in W} \frac{b(\vec{q}, \psi)}{\|\vec{q}\|_W \|\psi\|_V} \geq \beta$  ;
- $t(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  est semi-définie positive symétrique ;

alors  $\forall f(t_k, \phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k), \cdot) \in W'$  et  $\forall g(t_k, \phi(t_k), \vec{p}_\phi(t_k), \cdot) \in V'$ , le problème (3.20) admet une solution unique.

Les hypothèses de ce théorème sont vérifiées pour le système (3.20) pour tout  $\Delta t_k$ . On renvoie aux thèses [Schneider, 2000] et [Guérin, 2007] pour plus de détails à ce sujet.

### 3.7 Bilan des résultats théoriques et pratiques

Nous avons présenté des résultats pour le problème non mixte et la formulation mixte après le traitement de la variable en temps. Dans les deux cas, théorèmes 3.1 et 3.5, l'existence et l'unicité sont conditionnées par la stricte positivité des données neutroniques du problème : les sections efficaces  $[\Sigma]$ . Il en est de même pour le coefficient de diffusion, mais celui-ci est égal en première approximation à  $(3\Sigma_t)^{-1}$ . En pratique, les sections, étant des probabilités, sont toujours strictement positifs. Néanmoins, le résultat 3.2 est incompatible avec la physique car il impliquerait qu'on ne peut maintenir le flux du cœur à l'équilibre. Cela vient du fait que le terme  $(\Sigma_t^{g' \rightarrow g} - \Sigma_s^{g' \rightarrow g} - \chi^g \nu \Sigma_f^{g'})$  n'est pas toujours strictement positif. En effet, on peut avoir plus de fissions que d'absorptions et ainsi voir la densité de neutrons (le flux) augmenter.

De fait, aucun résultat parfait ne peut être établi sur le flux sans supposer un "bon contexte physique" de la simulation. Si on donne artificiellement des données aberrantes, il est évident que la solution n'aura plus de sens. Néanmoins, de l'ensemble de ces théorèmes, on extrait la cohérence mathématique entre ces équations paraboliques et ce qu'elles modélisent. De plus, on en extraira des informations utiles lors de la présentation des méthodes numériques utilisées.

En effet, le problème (3.20) n'admet pas de solution analytique, sauf cas particulièrement simples. Par conséquent, on utilise des méthodes de résolution numérique afin d'obtenir une bonne approximation de la solution exacte. L'objectif est d'obtenir la meilleure approximation possible avec un "coût" algorithmique le plus faible possible, i.e. comme nous le verrons par la suite, le temps de calcul. Ceci nous amènera à parler d'optimisation du ratio temps / précision des méthodes numériques.

De nombreuses méthodes existent, notre contexte est le problème elliptique (3.20), issu du traitement en temps du système (3.13) parabolique. Comme nous l'avons déjà dit, nous allons nous intéresser à des méthodes variationnelles de type Galerkin : la méthode des éléments finis. Ces méthodes introduisent des espaces de dimensions finies de manière à chercher une projection de la solution sur ces espaces. La projection est effectuée selon les produits scalaires définis par la formulation variationnelle.

Nous introduisons donc deux espaces  $W_h$  et  $V_h$  de dimensions finies. Nous considérons une approximation conforme :  $W_h \subset W$  et  $V_h \subset V$ . Nous verrons dans le chapitre 4 suivant quels sont ces espaces. Alors, le problème discret consiste à trouver  $(\phi_h(t_{k+1}), \vec{p}_{\phi,h}(t_{k+1})) \in V_h \times W_h$  solution de :

$$\begin{cases} b(\vec{p}_{\phi,h}(t_{k+1}), \psi_h) - t(t_{k+1}, \phi_h(t_{k+1}), \psi_h) = g(t_k, \phi_h(t_k), \vec{p}_{\phi,h}(t_k), \psi_h) , \\ a(t_{k+1}, \vec{p}_{\phi,h}(t_{k+1}), \vec{q}_h) + b(\vec{q}_h, \phi_h(t_{k+1})) = f(t_k, \phi_h(t_k), \vec{p}_{\phi,h}(t_k), \vec{q}_h) , \end{cases} \quad (3.23)$$

$\forall (\psi_h, \vec{q}_h) \in V_h \times W_h$ .

Soit l'espace  $\ker B_h = \{\vec{q}_h \in W_h / b(\vec{q}_h, \psi_h) = 0, \forall \psi_h \in V_h\}$ , sous les hypothèses suivantes :

$$\begin{aligned} \exists \alpha_h > 0, a(t_{k+1}, \vec{q}_h, \vec{q}_h) &\geq \alpha_h \|\vec{q}_h\|_{W_h}^2, \forall \vec{q}_h \in \ker B_h, \\ \exists \beta_h > 0, \inf_{\psi_h \in V_h} \sup_{\vec{q}_h \in W_h} \frac{b(\vec{q}_h, \psi_h)}{\|\vec{q}_h\|_{W_h} \|\psi_h\|_{V_h}} &\geq \beta_h, \end{aligned}$$

le théorème 3.5 s'applique et implique donc que le problème(3.23) admet une solution et une seule.

De plus, et parce qu'il est important d'estimer l'erreur d'une approximation, on pose le théorème suivant :

**Théorème 3.6** *On suppose que :*

- $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  est semi-définie positive,  $(\ker B)$ -elliptique et uniformément  $(\ker B_h)$ -elliptique ( $\alpha_0 = \inf_h \alpha_h > 0$ );
- $t(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$  est semi-définie positive et symétrique;
- $b$  vérifie la condition inf-sup discrète uniforme ( $\beta_0 = \inf_h \beta > 0$ );

alors il existe une constante  $C$  (dépendante de  $a$ ,  $b$  et  $t$ ) telle que si  $(\phi(t_{k+1}), \vec{p}_\phi(t_{k+1}))$  est solution du système continu (3.20) et  $(\phi_h(t_{k+1}), \vec{p}_{\phi,h}(t_{k+1}))$  est solution du système discret (3.23) :

$$\begin{aligned} & \|\vec{p}_\phi(t_{k+1}) - \vec{p}_{\phi,h}(t_{k+1})\|_W + \|\phi(t_{k+1}) - \phi_h(t_{k+1})\|_V \\ & \leq C \left( \inf_{\vec{q}_h \in W_h} \|\vec{p}_\phi(t_{k+1}) - \vec{q}_h\|_W + \inf_{\psi_h \in V_h} \|\phi(t_{k+1}) - \psi_h\|_V \right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

La résolution du problème discret (3.23) correspond donc à une projection de la solution exacte sur les espaces  $W_h$  et  $V_h$  et ce théorème garantit une solution optimale dans ces espaces discrets. Néanmoins, l'application du théorème 3.6 nécessite de montrer la  $(\ker B)$ -ellipticité de  $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$ . La proposition suivante est une condition suffisante pour la vérifier.

**Proposition 3.1** *Soit la condition sur les espaces discrets  $W_h$  et  $V_h$  :*

$$\vec{q}_h \in W_h \text{ et } \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{q}_h \psi_h = 0, \forall \psi_h \in V_h \quad \Rightarrow \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{q}_h = 0. \quad (3.25)$$

Dans le cadre du problème (3.20), si les sous-espaces  $W_h \subset V$  et  $V_h \subset V$  vérifient la condition (3.25), on a  $\ker B_h \subset \ker B$  et donc la  $(\ker B_h)$ -ellipticité uniforme de la forme bilinéaire  $a(t_{k+1}, \cdot, \cdot)$ .

Ce résultat est démontrée dans [Roberts et Thomas, 1991] et, comme ce qui précède, est issu de la présentation [Guérin, 2007]. Ces éléments étant établis, nous allons voir quel est la méthode d'approximation par éléments finis dans MINOS et par extension, les caractéristiques de ce solveur de cœur.

## Chapitre 4

# Détails du solveur Minos, des éléments finis utilisés et de ses différentes applications

*Dans ce chapitre, nous présentons l'outil de référence de notre étude. Le solveur de cœur MINOS sert pour la résolution de problème à source, et par extension les équations de la cinétique. Nous détaillons la méthode par éléments finis utilisée appliquée aux équations. Tout d'abord, nous assemblons le système linéaire en liaison au maillage cartésien du domaine. Puis, nous étudions l'élément fini de Raviart-Thomas-Nédélec, son principe, ses fonctions de base et l'assemblage des matrices. Ceci fait, nous verrons les propriétés des matrices globales du système assemblé. Finalement, nous posons l'enchaînement algorithmique de la résolution du problème mixte avec précurseurs. Ce solveur est une part du projet APOLLO3/DESCARTES.*

Dans le cadre de notre problématique, la simulation en temps de la population de neutrons d'un cœur de réacteur, nous avons fait le choix d'exploiter un outil dédié : le solveur MINOS ([Baudron et Lautard, 2007]). Puisque nos travaux reposent sur ce solveur et que nous prenons ces spécificités comme contraintes de développement, nous allons voir plus précisément comment MINOS fonctionne. Après avoir vu les bases de ce code, nous détaillerons plus particulièrement les éléments finis mixte de Raviart-Thomas ([Raviart et Thomas, 1977, Nédélec, 1986]) qui forment un élément important pour son fonctionnement. Nous finirons par les algorithmes de MINOS et en particulier ceux pour la cinétique.

Ce chapitre est en partie inspiré du chapitre 2 des thèses [Guérin, 2007, Schneider, 2000]. Les lecteurs pourront s'y référer pour plus de détails, en particulier pour les calculs stationnaires aux valeurs propres.

## 4.1 Un solveur mixte duale en géométrie cartésienne

MINOS est un code de calcul pour la simulation de cœur de réacteur. Ces calculs constituent une étape finale dans un schéma de calcul neutronique. Nous avons abordé les autres étapes dans la section 1.6. Comme annoncé, ce solveur utilise une approximation aux éléments finis pour la formulation (3.12) mixte duale. MINOS sert donc à résoudre les équations de la diffusion mais aussi les équations type  $SP_N$  (cf. paragraphe 2.3.1).

Dans le cas de la diffusion, il peut servir pour résoudre le problème stationnaire (2.12) de calcul aux valeurs propres ou la cinétique. Pour cette dernière, comme nous l'avons présenté dans la section 3.5 au chapitre précédent, nous commençons par effectuer un traitement de la variable temps pour obtenir un problème à source similaire au stationnaire. En effet, le cœur du solveur MINOS sert à résoudre un problème à source telle que nous allons le décrire par la suite. Ainsi, pour l'utiliser, dans tous les cas, nous nous ramenons à cette forme spécifique uniformisée, cela sera l'objet de la section 4.3.

Nous ne représenterons pas tous les détails d'une méthode aux éléments finis, mais nous allons en rappeler le principe pour voir les spécificités qui nous intéressent. C'est donc une méthode type Galerkin donnant une solution approchée d'un problème variationnel, projection de la solution exacte sur un espace discret de dimension finie. Cet espace est engendré par des fonctions de base définies sur un maillage. Ces fonctions sont obtenues par composition de polynômes sur une géométrie de référence. La solution approchée s'exprime donc dans cet espace discret comme combinaison linéaire des fonctions de base. Les coefficients de cette combinaison forment les degrés de liberté du problème discret, associés à des nœuds du maillage. Après discrétisation et projection, nous obtenons un système linéaire à inverser pour déterminer ces valeurs associées aux nœuds du maillage.

Pour simplifier l'exposé, nous faisons le choix de présenter les méthodes en 2 dimensions, mais la généralisation à 1 et 3 dimensions ne pose pas de problème. Nous nous limiterons aussi pour les équations à des conditions aux limites de type Dirichlet (flux nul) les autres conditions ne changeant rien à la présentation. Nous renvoyons à la littérature ([Baudron et Lautard, 2007]) pour plus de détails dans ces cas là.

## 4.2 Maillage et espaces discrétisés

Le solveur MINOS travaille en géométrie rectangulaire. Lorsque la géométrie représente un cœur non rectangulaire, elle est complétée artificiellement pour former un rectangle. Nous verrons par la suite, au cours des tests numériques, des exemples de géométrie. Par

exemple, une géométrie découpée représentant une cuve cylindrique (cf. figure 1.5, page 9), est complétée comme sur la figure 4.1. Les cellules supplémentaires sont posées généralement comme des réflecteurs (diffusion plus faible et aucune fission, cf. section 1.5) de sorte que les données introduites ne changent pas le problème.

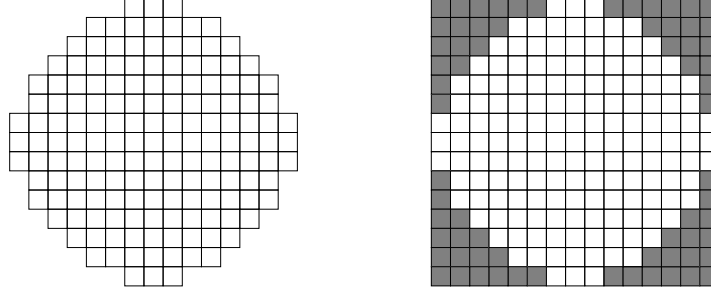


FIG. 4.1 – Exemple de géométrie de calcul, en maillage cartésien, complétée pour former un rectangle (découpée à gauche, complétée à droite).

Un maillage à deux dimensions est simplement le produit de deux maillages mono-dimensionnelles. Il est donc défini par la dimension des mailles dans chaque direction. Rappelons que ce maillage forme un ensemble  $T_h$  d'éléments  $K$ , des rectangles pour le cas 2D. L'indice  $h$  correspond au diamètre de la plus grande maille. Ainsi :

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{K \in T_h} K \quad \text{et} \quad \forall K_1 \in T_h, \forall K_2 \in T_h, K_1^\circ \cap K_2^\circ = \emptyset. \quad (4.1)$$

Les espaces de fonctions discrétisées utilisés sont inclus dans leurs homologues de dimensions infinies ( $W_h \subset W$  et  $V_h \subset V$ ). L'approximation est donc conforme. Soit  $P(K)$  l'ensemble des polynômes de degré quelconque sur  $K$  et, en dimension 2,  $Q_{l,m}(K)$  l'espace des polynômes de degré inférieur à  $l$  en  $x$  et  $m$  en  $y$  :

$$Q_{l,m}(K) = \left\{ p(x, y) \in P(K) / p(x, y) = \sum_{i,j=0}^{l,m} a_{ij} x^i y^j, a_{ij} \in \mathbb{R} \right\}. \quad (4.2)$$

Soit l'espace des polynômes

$$D_k(K) = [Q_{k,k-1}(K) \times \{0\}] \oplus [\{0\} \times Q_{k-1,k}(K)], \quad (4.3)$$

on définit alors les espaces d'approximation pour le flux :

$$V_h^k(\Omega) = \{\psi \in L^2(\Omega) / \forall K \in T_h, \psi|_K \in Q_{k-1,k-1}(K)\} \quad (4.4)$$

et pour le courant :

$$W_h^k(\Omega) = \{\vec{q} \in H(\text{div}, \Omega) / \forall K \in T_h, \vec{q}|_K \in D_k(K)\}. \quad (4.5)$$

**Remarque 4.1** La conformité de l'approximation de courant  $W_h^k(\Omega) \subset W = H(\text{div}, \Omega)$  implique que la trace normale du courant à l'interface entre deux mailles (deux rectangles) soit continue.



### 4.3 Mise en forme du système linéaire

Soient  $(\psi_i)_{1 \leq i \leq n}$  un ensemble de fonctions de base de flux et  $(\vec{q}_i)_{1 \leq i \leq m}$  un ensemble de fonctions de base de courant tels que

$$V_h^k(\Omega) = Vect\{\psi_i\}_{1 \leq i \leq n} \quad \text{et} \quad W_h^k(\Omega) = Vect\{\vec{q}_i\}_{1 \leq i \leq m}. \quad (4.6)$$

La résolution du problème discret (3.23) est équivalente à la résolution d'un système linéaire. Matrices et seconds membres sont obtenus en appliquant  $a$ ,  $b$ ,  $t$ ,  $f$  et  $g$  sur l'ensemble des fonctions de base et à chaque pas de temps. L'inconnue du système est le vecteur composé des degrés de liberté de la solution  $(\phi_h(t_{k+1}), \vec{p}_{\phi,h}(t_{k+1}))$  dans ces espaces de fonctions. Ainsi on obtient le système matriciel :

$$\begin{cases} {}^tBP_{k+1} + T_{k+1}\Phi_{k+1} = T_k\Phi_k - \frac{1-\theta}{\theta} {}^tBP_k + S_d, \\ -A_{k+1}P_{k+1} + B\Phi_{k+1} = -\frac{1-\theta}{\theta} {}^tB\Phi_k - A_kP_k, \end{cases} \quad (4.7)$$

où  $\Phi_{k+1}$  et  $P_{k+1}$  sont les vecteurs des inconnues de flux et courant à l'instant  $t_{k+1}$ . Les matrices sont :

$$\begin{aligned} A_k(i, j) &= a(t_k, \vec{q}_i, \vec{q}_j) = \int_{\Omega} [D^k] \vec{q}_i \cdot \vec{q}_j \vec{dr}; \\ B(i, j) &= -b(\vec{q}_i, \psi_j) = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{q}_i \psi_j \vec{dr}; \\ {}^tB(i, j) &= B(j, i); \\ T_k(i, j) &= t(t_k, \psi_i, \psi_j) = \int_{\Omega} [\Sigma^k] \psi_i \psi_j \vec{dr}; \end{aligned}$$

et le vecteur  $S$  est constitué des sources :  $S_d(i) = \int_{\Omega} S_d \psi_i \vec{dr}$ . Comme nous l'avons dit, dans

MINOS, on se ramène à des problèmes à source pour la résolution. Dans notre cas, cela consiste à assembler le second membre avant la résolution. Nous considérerons donc par la suite le système :

$$\begin{cases} {}^tBP + T\Phi = S, \\ -AP + B\Phi = -Q, \end{cases} \quad (4.8)$$

où on a simplifié les indices de temps. Dans les faits, l'assemblage des matrices du second membre n'est pas différent des autres, il suffit seulement de changer l'indice de temps. Ainsi, on construira les sources  $S$  et  $Q$  avant d'inverser le système.

En plus du formalisme multigroupe (cf. section 3.1) qui fait que l'on a le système (4.8) pour chaque groupe d'énergie, on considère l'inconnue de courant dans chaque direction. C'est-à-dire que  $P$  est décomposée en ses différentes composantes dans chaque direction ( $P = (P_x, P_y, P_z) = (P_1, P_2, P_3)$  en 3 dimensions). Ainsi, on réécrit les équations (4.8) :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^d {}^tB_i P_i + T\Phi = S, \\ -A_i P_i + B_i \Phi = -Q_i, \quad 1 \leq i \leq d, \end{cases} \quad (4.9)$$

avec  $d$  le nombre de directions (i.e. la dimension) et :

$$A_d(i, j) = a_d(t_{k+1}, \vec{q}_i, \vec{q}_j) = \int_{\Omega} [D^{k+1}] q_{i,d} q_{j,d} \vec{dr} ;$$

$$B_d(i, j) = -b_d(\vec{q}_i, \psi_j) = \int_{\Omega} \frac{\partial q_{i,d}}{\partial x_d} \psi_j \vec{dr} .$$

La formulation globale en 2D est donc :

$$\begin{bmatrix} T & {}^t B_x & {}^t B_y \\ B_x & -A_x & 0 \\ B_y & 0 & -A_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi \\ P_x \\ P_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S \\ -Q_x \\ -Q_y \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Voyons maintenant comment ces matrices sont assemblées à partir de matrices de référence obtenues sur l'élément de référence de Raviart-Thomas. Nous présenterons aussi la transformation affine permettant de calculer les premières à partir des secondes.

## 4.4 Éléments finis de Raviart-Thomas-Nédélec

L'élément fini mixte de Raviart-Thomas est utilisé en géométrie rectangulaire dans MINOS. Cet élément a été introduit par [Raviart et Thomas, 1977] en deux dimensions et étendu par [Nédélec, 1986] en trois dimensions. On le note  $RT_k$  pour faire référence au degré des polynômes de base. La géométrie de référence  $\hat{K}$  est un segment unité en dimension 1, le carré unité en dimension 2 et le cube unité en dimension 3. Nous prenons la convention  $\hat{x}$  pour signifier que nous nous plaçons sur l'élément de référence.

### 4.4.1 Élément de référence

L'élément  $RT_{k-1}$  utilise l'espace  $Q_{k-1,k-1}(\hat{K})$  (définition (4.2)) pour le flux et l'espace  $D_k(\hat{K})$  (définition (4.3)) pour son courant. Le premier est de dimension  $k^2$  et le second de dimension  $2k(k+1)$ . En effet, la  $d$ -ème composante du courant est dans un espace de polynômes de degré  $k$  pour la variable correspondant à la direction  $d$ , et  $k-1$  pour les autres directions. On a donc la propriété suivante pour lier ces espaces discrets : si  $\vec{q} \in D_k(\hat{K})$  alors  $\vec{\nabla} \cdot \vec{q} \in Q_{k-1,k-1}(\hat{K})$ . Ainsi, la divergence d'un courant discret est dans l'espace des flux discrets. On représente sur la figure 4.2 les trois premiers éléments sur le carré unité :

- $RT_0$ , linéaire,  $\phi \in Q_{0,0}$ ,  $\vec{p}_\phi \in Q_{1,0} \times Q_{0,1}$  ;
- $RT_1$ , parabolique,  $\phi \in Q_{1,1}$ ,  $\vec{p}_\phi \in Q_{2,1} \times Q_{1,2}$  ;
- $RT_2$ , cubique,  $\phi \in Q_{2,2}$ ,  $\vec{p}_\phi \in Q_{3,2} \times Q_{2,3}$ .

Les nœuds de flux sont toujours internes. On a flêché ceux de courant dans la direction à laquelle ils sont associés.

Supposons que nous travaillons avec un maillage rectangulaire régulier (toutes les mailles ont les mêmes dimensions  $(h_x, h_y)$ ). L'application  $F$  qui permet de passer de l'élément de référence  $\hat{K} = [0, 1]^2$  à un élément courant  $K = [x_K, x_K + h_x] \times [y_K, y_K + h_y]$  est définie par :

$$F \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_x \hat{x} \\ h_y \hat{y} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_K \\ y_K \end{pmatrix} . \quad (4.11)$$

Le Jacobien de cette transformation est  $J = h_x h_y$ . Les formes linéaires et bilinéaires du problème (3.23), reformulé en système (4.10), peuvent alors être exprimées comme une

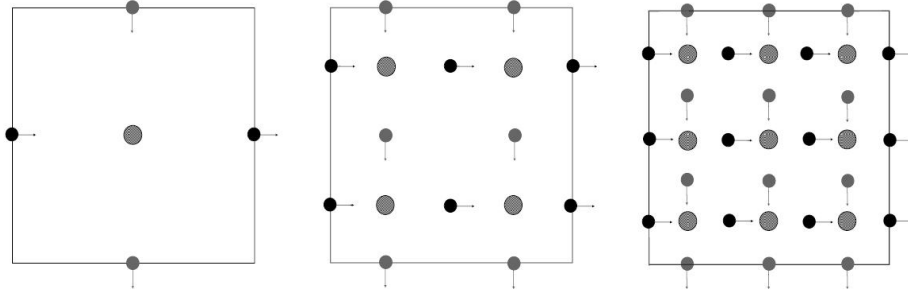


FIG. 4.2 – Éléments de Raviart-Thomas 2D : les flèches indiquent la direction associée aux nœuds de courant, les nœuds de flux étant sans flèche.

somme d'intégrales sur chaque maille puis ramenées aux intégrales sur l'élément de référence par changement de variable ( $d$  indique la direction) :

$$\begin{aligned}
 A_d(i, j) &= a_d(t_{k+1}, \vec{q}_i, \vec{q}_j) = \sum_{K \in T_h} [D^{k+1}]_K \int_K q_{i,d} q_{j,d} \vec{d}r = \sum_{K \in T_h} [D^{k+1}]_K \frac{h_d^2}{J} \int_{\hat{K}} \hat{q}_{i,d} \hat{q}_{j,d} \vec{d}r; \\
 B_d(i, j) &= -b_d(\vec{q}_i, \psi_j) = \sum_{K \in T_h} \int_K \frac{\partial q_{i,d}}{\partial x_d} \psi_j \vec{d}r = \sum_{K \in T_h} \int_{\hat{K}} \frac{\partial \hat{q}_{i,d}}{\partial x_d} \hat{\psi}_j \vec{d}r; \\
 T(i, j) &= t(t_k, \psi_i, \psi_j) = \sum_{K \in T_h} [\Sigma^k]_K \int_K \psi_i \psi_j \vec{d}r = \sum_{K \in T_h} [\Sigma^k]_K J \int_{\hat{K}} \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j \vec{d}r; \quad (4.12) \\
 Q_d(i) &= Q_d(\vec{q}_i) = \sum_{K \in T_h} Q_{d,K} \int_K q_{i,d} \vec{d}r = \sum_{K \in T_h} Q_{d,K} \frac{h_d}{J} \int_{\hat{K}} \hat{q}_{i,d} \vec{d}r; \\
 S(i) &= S(\psi_i) = \sum_{K \in T_h} S_K \int_K \psi_i \vec{d}r = \sum_{K \in T_h} S_K J \int_{\hat{K}} \hat{\psi}_i \vec{d}r.
 \end{aligned}$$

Les données, comme les sections efficaces, sont supposées constantes par maille. Il est donc nécessaire de les avoir homogénéisées sur chaque maille (cf. section 1.5, page 8). Ainsi, pour chaque maille de la géométrie, on doit disposer des valeurs de diffusion  $[D^{k+1}]_K$ , sections  $[\Sigma^k]_K$  et sources  $Q_{d,K}$  et  $S_K$ .

#### 4.4.2 Fonctions de base

Le choix des fonctions de base doit permettre de simplifier les matrices, en diminuant leur stockage et en facilitant leur inversion. Pour cela, on limite les couplages entre les nœuds. On se place dans le cadre  $RT_{k-1}$ .

• **Les fonctions de base de flux** sont choisies de manière à ce que la matrice  $T$  soit diagonale. On n'a donc pas de couplage entre deux nœuds différents de flux. Ce qui veut aussi dire que l'on n'a pas de couplage entre deux polynômes de la base du flux. De plus, ces polynômes sont choisis comme produit de polynômes 1D :

$$\hat{\psi}_i(\hat{x}, \hat{y}) = L_{i_x}(\hat{x}) L_{i_y}(\hat{y}) \quad (4.13)$$

où  $1 \leq i_x, i_y \leq k$  et  $i = (i_y - 1)k + i_x$ . Il y a donc  $k^2$  polynômes de base de flux pour l'élément  $RT_{k-1}$  en 2D. Les  $L_i$  sont des polynômes de Lagrange de degré  $k - 1$  :

$$L_i(\hat{x}) = \frac{\prod_{j=1, j \neq i}^k (\hat{x} - \hat{x}_j)}{\prod_{j=1, j \neq i}^k (\hat{x}_i - \hat{x}_j)}, \quad 1 \leq i \leq k. \quad (4.14)$$

On a donc  $L_i(\hat{x}_j) = \delta_{ij}$ . On choisit les  $(\hat{x})_{1 \leq i \leq k}$  comme points de Gauss-Legendre d'ordre  $k$ . La formule d'intégration de Gauss-Legendre est exacte pour un polynôme de degré  $2k - 1$ . Les  $L_i$  vérifient donc les propriétés suivantes :

$$\int_0^1 L_i(\hat{x}) L_j(\hat{x}) d\hat{x} = t_i \delta_{ij}; \quad \sum_{i=1}^k L_i(\hat{x}) = 1, \quad \forall \hat{x} \in [0, 1]; \quad \int_0^1 L_i^2(\hat{x}) d\hat{x} = \int_0^1 L_i(\hat{x}) d\hat{x} = t_i.$$

La matrice de référence de couplage des flux  $\hat{T}$ , de taille  $k^2$ , définie par

$$\hat{T}(i, j) = \int_0^1 L_i(\hat{x}) L_j(\hat{x}) d\hat{x}, \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} t_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & t_k \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

est donc diagonale. Ainsi, on développe le flux sur cette base :

$$\hat{\phi}(\hat{x}, \hat{y}) = \sum_{i_x=1}^k \sum_{i_y=1}^k \hat{\phi}_i L_{i_x}(\hat{x}) L_{i_y}(\hat{y}). \quad (4.16)$$

Les  $(\hat{\phi}_i)_{1 \leq i \leq k^2}$  sont les degrés de liberté correspondant aux valeurs du flux aux points de Gauss-Legendre. Si on note  $(\hat{x}_l, \hat{y}_m)_{1 \leq l, m \leq k}$  ces points, alors on a  $\hat{\phi}(\hat{x}_l, \hat{y}_m) = \hat{\phi}_{(m-1)k+l}$ .

• **Les fonctions de base de courant** sont aussi le produit de polynôme 1D. Elles n'ont qu'une seule composante non nulle dans une direction donnée. Par exemple, un courant dans la direction  $x$  se factorise en

$$\hat{q}_{x,i}(\hat{x}, \hat{y}) = P_{i_x}(\hat{x}) L_{i_y}(\hat{y}) \quad (4.17)$$

où  $1 \leq i_x \leq k + 1$ ,  $1 \leq i_y \leq k$  et  $i = (i_y - 1)(k + 1) + i_x$ . Il y a donc  $k(k + 1)$  polynômes de base de courant pour l'élément  $RT_{k-1}$  en 2D. On utilise les polynômes de Lagrange pour les directions transverses ( $y$  pour l'exemple), ce qui évite tout couplage dans ces directions. Quant à eux, les polynômes  $P_i$  sont choisis notamment pour avoir une matrice de couplage flux-courant la plus simple possible. On pose :

$$P_i(\hat{x}) = \frac{1}{t_i - 1} \int_0^{\hat{x}} L_{i-1}(t) dt - \frac{1}{t_i} \int_0^{\hat{x}} L_i(t) dt, \quad i = 2, \dots, k; \quad (4.18)$$

$$P_1(\hat{x}) = 1 - \frac{1}{t_1} \int_0^{\hat{x}} L_1(t) dt; \quad P_{k+1}(\hat{x}) = \frac{1}{t_k} \int_0^{\hat{x}} L_k(t) dt.$$

Les propriétés des polynômes de Lagrange nous permettent de calculer les termes de la matrice de référence  $\hat{B}$  de taille  $(k+1)k$ . Ainsi :

$$\hat{B}(i, j) = \int_0^1 \frac{\partial P_i}{\partial \hat{x}}(\hat{x}) L_j(\hat{x}) d\hat{x} \quad \text{et} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ +1 & -1 & 0 \\ & \ddots & \ddots \\ 0 & & +1 & -1 \\ 0 & 0 & & +1 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Finalement, la matrice de référence de couplage des courants  $\hat{A}$  est définie par

$$\hat{A}(i, j) = \int_0^1 P_i(\hat{x}) P_j(\hat{x}) d\hat{x} \quad (4.20)$$

et est pleine de taille  $(k+1)^2$ .

**Remarque 4.2** *Le fait que  $P_i(0) = \delta_{i1}$  et  $P_i(1) = \delta_{ik+1}$  permet d'assurer la conformité de l'approximation de courant (cf. remarque 4.1, page 31). En effet, les nœuds de courant à l'interface de deux mailles étant communs, la continuité des traces normales du courant est assurée.*

Le courant dans la direction  $x$  se développe sur cette base :

$$\hat{p}_x(\hat{x}, \hat{y}) = \sum_{i_x=1}^{k+1} \sum_{i_y=1}^k \hat{p}_{x,i} P_{i_x}(\hat{x}) L_{i_y}(\hat{y}). \quad (4.21)$$

Les  $(\hat{p}_{x,i})_{1 \leq i \leq k(k+1)}$  sont les degrés de liberté. Contrairement aux degrés de liberté de flux, ils ne correspondent pas à des valeurs ponctuelles du courant, sauf pour  $i_x = 1$  et  $i_x = k+1$ . Dans ces cas, ils sont égaux à la valeur de la trace normale du courant sur les bords de l'élément dans la direction  $x$ , aux nœuds correspondants. Notons qu'il y a  $k$  degrés de liberté de plus pour le courant dans une direction donnée, que pour le flux.

#### 4.4.3 Assemblage des matrices globales

À l'aide de ces matrices de référence, avec le changement de variable, on peut réécrire les matrices (4.12) sur une maille de taille  $(h_x, h_y)$  :

$$\begin{aligned} \tilde{A}_x(i, j) &= [D^{k+1}]_K \frac{h_x^2}{J} \int_{\hat{K}} \hat{q}_{i,x} \hat{q}_{j,x} \vec{dr} = [D^{k+1}]_K \frac{h_x}{h_y} \hat{A}(i_x, j_x) t_{i_y} \delta_{i_y j_y}; \\ \tilde{B}_x(i, j) &= \int_{\hat{K}} \frac{\partial \hat{q}_{i,x}}{\partial x} \hat{\psi}_j \vec{dr} = \hat{B}_x(i_x, j_x) t_{i_y} \delta_{i_y j_y}; \\ \tilde{T}(i, i) &= [\Sigma^k]_K J \int_{\hat{K}} \hat{\psi}_i^2 \vec{dr} = [\Sigma^k]_K h_x h_y t_{i_x} t_{i_y}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Les nœuds de flux et de courant sont numérotés de manière canonique, en parcourant d'abord la direction  $x$  puis la direction  $y$ . Cette numérotation, représentée figure 4.3(a), permet d'optimiser le profil de la matrice en rassemblant les termes non nuls autour de la diagonale. Les matrices globales sont des matrices par blocs, les blocs étant les matrices



Cette résolution se fait par une double méthode itérative, une itération interne sur les variables en espace et une itération externe sur les variables en énergie.

• **Le traitement itératif de la variable en énergie** consiste en une méthode de Gauss-Seidel par bloc pour chaque groupe d'énergie. Les  $B_d$  sont diagonales sur les groupes, seules  $A$  et  $T$  sont décomposées en leurs parties inférieure, diagonale et supérieure sur les groupes d'énergie :

$$A = \tilde{A} - A_{inf} - A_{sup}, \quad T = \tilde{T} - T_{inf} - T_{sup}, \quad (4.24)$$

formant pour chaque groupe d'énergie le système itératif :

$$\begin{bmatrix} \tilde{T} & {}^t B \\ B & -\tilde{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi \\ P \end{bmatrix}^{(n+1)} = \begin{bmatrix} S \\ -Q \end{bmatrix}^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (4.25)$$

avec :

$$\begin{bmatrix} S \\ -Q \end{bmatrix}^{(n+\frac{1}{2})} = \begin{bmatrix} S \\ -Q \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} T_{inf} & 0 \\ 0 & -A_{inf} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi \\ P \end{bmatrix}^{(n+1)} + \begin{bmatrix} T_{sup} & 0 \\ 0 & -A_{sup} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi \\ P \end{bmatrix}^{(n)}$$

$\forall n = 0, \dots, N$ .

• **Le traitement itératif de la variable en espace** nécessite une étape préalable. En effet, la matrice du système pour chaque groupe d'énergie n'est pas définie positive. Donc, on élimine l'inconnue de flux  $\Phi$ . Elle est exprimée en fonction du courant en considérant la seconde ligne du système (4.25) :

$$\Phi^{(n+1)} = \tilde{T}^{-1} \left( S^{(n+\frac{1}{2})} - \sum_{d \in \{x,y,z\}} {}^t B_d P_d^{(n+1)} \right). \quad (4.26)$$

Ainsi, on reporte l'égalité (4.26) dans le système (4.25) :

$$\begin{bmatrix} W_x & B_x \tilde{T}^{-1t} B_y & B_x \tilde{T}^{-1t} B_z \\ B_y \tilde{T}^{-1t} B_x & W_y & B_y \tilde{T}^{-1t} B_z \\ B_z \tilde{T}^{-1t} B_x & B_z \tilde{T}^{-1t} B_y & W_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix}^{(n+1)} = \begin{bmatrix} Q_x + B_x \tilde{T}^{-1} S \\ Q_y + B_y \tilde{T}^{-1} S \\ Q_z + B_z \tilde{T}^{-1} S \end{bmatrix}^{(n+\frac{1}{2})} \quad (4.27)$$

avec  $W_d = \tilde{A}_d + B_d \tilde{T}^{-1t} B_d$ . Cette opération est possible car  $T$  est diagonale donc facilement inversible. Le profil et donc les couplages de la matrice  $W_d$  sont les mêmes que ceux de  $A_d$ . Le nouveau système obtenu pour chaque groupe d'énergie, dont l'inconnue est le courant, est bien défini positif puisque  $A_d$  et  $T^{-1}$  le sont. Une méthode de Gauss-Seidel (G-S, [Allaire et Kaber, 2002]) par bloc est utilisé pour résoudre ce système pour chaque groupe d'énergie. La technique de résolution associée à chaque bloc est une méthode de Cholesky ([Allaire et Kaber, 2002]).

• **Les Processus itératifs** nous servant par la suite sont présentés sous forme d'algorithmes. En premier, le solveur inversant le système global (4.23) est exprimé dans l'algorithme 1. À la fin de l'itération interne sur les courants, le flux, dans le groupe considéré, est réactualisé par l'expression (4.26). Cette résolution est communément utilisée avec une seule itération interne. Un conditionnement et de bonnes propriétés du système garantissent la

```

Initialisation flux-courant
Tant que (l'itération externe de G-S sur l'énergie n'aboutit pas) faire
  [nombre d'itérations maximum ou précision demandée atteinte]
  Pour chaque groupe  $g$  faire
    Tant que (l'itération interne de G-S sur l'espace n'aboutit pas) faire
      [nombre d'itérations maximum ou précision demandée atteinte]
      Pour  $d \in \{x, y, z\}$  faire
        Calcul de l'itéré G-S suivant avec la ligne  $d$  du système (4.27)
        et avec une résolution (Cholesky) du bloc  $d$ 
        dans le système (4.27) du groupe  $g$ 
      Fin Pour
    Fin Tant que
    Réactualisation du flux avec l'égalité (4.26)
    Calcul de l'itéré G-S suivant avec le système (4.25) du groupe  $g$ 
  Fin Pour
Fin Tant que

```

Algorithme 1: *Processus d'inversion d'un système linéaire dans MINOS.*

bonne convergence. Dans ce cas, le gain en temps de calcul est non négligeable. La convergence est évaluée par l'erreur successive, différence entre deux itérés, et/ou par la valeur du résidu, différence entre la source et le produit matrice-solution.

Nous avons vu que dans MINOS, on ramenait les différents problèmes à des calculs à source. Une fois le système obtenu sous la forme (4.23), on utilise donc l'algorithme 1. Néanmoins, ce solveur s'intègre, pour chaque cas, dans un processus plus global résolvant le problème considéré. En stationnaire, nous avons vu le problème (2.12). Ce calcul à valeur propre est traité dans MINOS par la méthode des puissances, un algorithme donnant la plus grande valeur propre  $k_{eff}$  ([Guérin, 2007]).

Dans notre contexte de la cinétique, nous devons résoudre le système (4.7) en évolution. D'un côté on fait évoluer le couple flux-courant  $(\Phi, P)$  et de l'autre les concentrations de précurseurs  $c$ . Cette double évolution est présentée dans l'algorithme 2.

```

Initialisation pour  $t = 0$  de  $\phi_0, \vec{p}_{\phi_0}$  et  $c_0$  (section 2.7, page 18)
Pour  $k = 1, \dots, K$  faire
  [ $t_0 = 0$  et  $t_K = T$ ]
  Résolution du système (4.7) avec l'algorithme 1 donnant  $(\Phi_{k+1}, P_{k+1})$ 
  connaissant  $(\Phi_k, P_k)$ 
  Calcul des concentrations de précurseurs  $c(t_{k+1})$  selon l'équation (3.18)
  connaissant  $c(t_k)$  et  $\phi(t_{k+1})$ 
Fin Pour

```

Algorithme 2: *Évolution du système mixte de la cinétique avec précurseurs.*



## 4.6 Conception numérique et codes informatiques

Le projet APOLLO3/DESCARTES a pour ambition de créer une plate-forme de développement commune à un ensemble de solveurs et de procédures permettant une large variété de calculs de neutronique. Un de ces solveurs est MINOS, entièrement revu et programmé en C++. Une version précédente existe en Fortran dans le code CRONOS2 ([Baudron *et al.*, 1999b]).

La programmation de MINOS a été fortement orientée objet. Le modèle de conception de la figure 4.4 met en évidence deux types de classes :

- des classes de base génériques de conception interne ;
- des classes spécifiques dérivant des classes de base pour représenter les objets que l'utilisateur construit et enchaîne afin de réaliser son calcul de façon modulaire.

Par exemple, sur la figure 4.4, on détaille la classe *VectorTree* du solveur. Le flux est stocké dans la partie pair et le courant dans la partie impair. On pourra se référer à la littérature [Guérin, 2007] pour plus de détails.

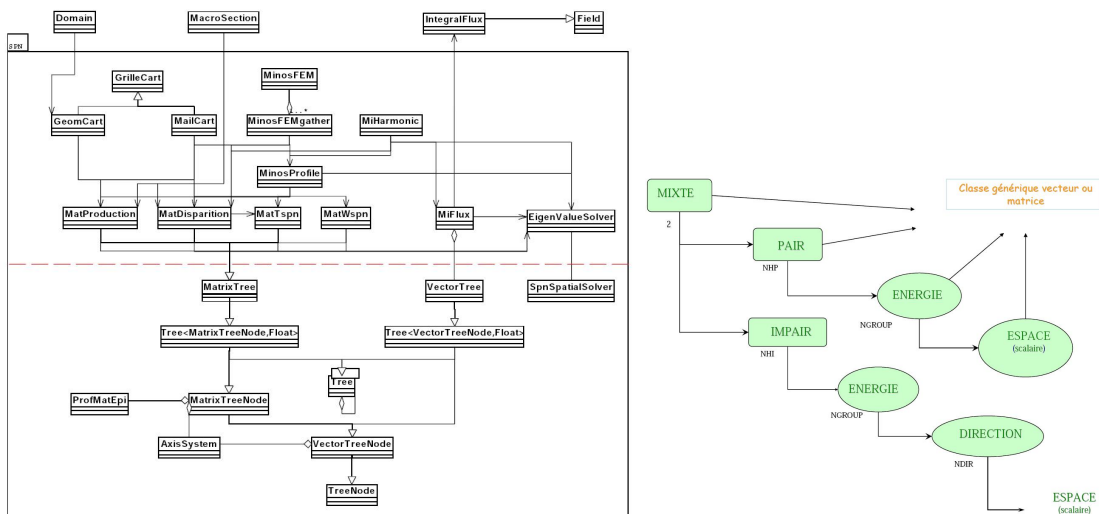


FIG. 4.4 – Modèle de conception du solveur MINOS et de la classe *VectorTree*.

Dans le contexte de la cinétique, nous venons de voir comment le problème était traité par le solveur MINOS. Néanmoins, cette approche est coûteuse en temps de calcul. Par la suite, nous allons étudier des méthodes d'approximation multi-échelle dans le but d'optimiser le ratio temps / précision de la résolution des équations de la diffusion. En particulier, le modèle quasi-statique décrit dans la littérature nous servira de base de travail.

## Chapitre 5

# L'approche quasi-statique, principe, méthodes et développements

*L'optique de nos travaux sur la cinétique se focalise sur les méthodes multi-échelles. Une approche utilisée pour notre problème est nommée quasi-statique. À la base, cette approche consiste en une séparation des variables. Ainsi, le flux est factorisé en une fonction d'amplitude ne dépendant que du temps et un flux de forme indépendant du temps. Si cette méthode présente des avantages pour donner des informations ponctuelles sur un problème, elle s'avère trop restrictive pour des études plus poussées. Dans ce chapitre, nous voyons comment de cette idée originale, différentes options d'améliorations ont été proposées dans la littérature. Du quasi-statique amélioré au multi-point, chacune des méthodes a montré des limites et une application à des problématiques spécifiques. Néanmoins, chacune peut être vue comme une approche multi-échelle de la résolution des équations de la cinétique. Nous proposons de pousser plus avant ce raisonnement et étudions différentes options pour aller plus loin dans la représentation multi-échelle du flux. La dernière étape est le choix justifié d'une de ces voies qui nous amène pour nos travaux.*

Pour pallier au coût important en temps de calcul que nécessitent les simulations cinétiques, différentes approximations ont été proposées. L'objectif est de simplifier les problèmes à résoudre par approximation du système de la cinétique. Les approximations sont des hypothèses sur l'état initial ou sur le comportement dans le temps du système. Bien sûr, cela peut entraîner une perte en précision du modèle. Il faut donc trouver un juste compromis dans le ratio temps / précision, voire laisser aux utilisateurs le choix du niveau de compromis. L'idée quasi-statique, basée sur une approximation en temps, est une approche utilisée dans les études de cinétique. Nous allons voir son principe, ses propriétés et ses développements, qui nous amènent à des considérations multi-échelles en temps et espace.

## 5.1 L'idée du quasi-statique

L'histoire du quasi-statique commence en 1958 avec les publications de [Henry, 1958], même si le terme est apparu par la suite. La relation proposée par Henry était la suivante :

$$\phi^g(\vec{r}, t) = a(t)f^g(\vec{r}, t), \quad 1 \leq g \leq G. \quad (5.1)$$

Jusqu'alors, les études de cinétique reposait sur la cinétique ponctuelle, c'est-à-dire que seul le coefficient multiplicateur  $a$  était calculé dans le temps, on conservait le flux  $f(t=0)$  à sa valeur initiale ( $\phi^g(\vec{r}, t) = a(t)f^g(\vec{r}, t=0)$ ). Des expériences ([Yasinsky et Henry, 1965]) ont montré que cette approximation était plus que grossière et, de là, on chercha à étendre la simulation en se rapprochant de la relation initiale. Aujourd'hui, le mot 'quasi-statique' recouvre une large famille de méthodes : cinétique ponctuelle, adiabatique, quasi-statique, quasi-statique amélioré, quasi-statique généralisé, ... Nous développerons certaines d'entre elles par la suite et nous renvoyons le lecteur à l'article de [Dulla *et al.*, 2008] pour plus de détails sur l'histoire et les spécificités de ces méthodes.

Ainsi, la méthode proposée par [Henry, 1958], et repris par [Ott et Meneley, 1969], peut être vu comme une séparation des variations rapides du flux (par rapport au temps) des variations lentes. Autrement dit, le flux pourrait être décomposé sous la forme :

$$\phi^g(\vec{r}, t) = a^g(\vec{r}, t)f^g(\vec{r}, t), \quad (5.2)$$

où l'on désire que  $a$  représente le comportement rapide, on le nomme fonction d'amplitude, et  $f$  est un flux de forme variant lentement. Dans un premier temps, cette approche fut donc introduite à l'extrême en posant une forme indépendante du temps et une amplitude ne dépendant que du temps. C'est la méthode Quasi-Statique (QS).

Cette décomposition introduite dans les équations sur le flux (formulation mixte (3.1) ou non (3.13)), on en déduit deux problèmes, un sur l'amplitude et l'autre sur la forme. Le premier est une cinétique point ([Planchard, 1995]). Le second est un problème stationnaire reprenant la formulation du problème sur le flux  $\phi$  initial. Ainsi on pourrait exprimer le flux "statique" de forme  $f$  en  $n.cm^{-2}$  et la fonction d'amplitude  $a$  en  $s^{-1}$ . Cette séparation de variable est une hypothèse forte.

Rapidement, on la fit donc évoluer ([Henry, 1958, Ott et Meneley, 1969]) sous la forme Quasi-Statique Amélioré (IQS). L'idée est d'introduire une dépendance lente (grossière) en temps pour la forme, tout en conservant une amplitude point :

$$a^g(\vec{r}, t) = a(t), \quad f^g(\vec{r}, t) = f^g(\vec{r}, T). \quad (5.3)$$

Cette décomposition est initialisée à

$$a(t=0) = 1 \quad \text{et} \quad f^g(\vec{r}, T=0) = \phi^g(\vec{r}, t=0) = \phi_0^g(\vec{r}). \quad (5.4)$$

Usuellement, pour imposer l'hypothèse IQS sur la forme, on pose la condition de normalisation :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial t} \phi_0^* \vec{dr} = 0, \quad (5.5)$$

où  $\phi_0^*$  est le flux adjoint initial. Cette condition garantit de plus l'unicité de la factorisation (5.2). D'autres normalisations sont possibles, autres que  $\phi_0^*$ . Néanmoins, on montre qu'en utilisant le flux adjoint initial, on réduit l'erreur sur le calcul comme nous le verrons dans la section suivante.

Cette factorisation posée, on différencie deux pas de temps (figure 5.1) :

- un premier grossier  $\Delta T_i = [T_i, T_{i+1}]$ , où on détermine l'amplitude et la forme ;
- un deuxième fin  $\Delta t_k = [t_k, t_{k+1}]$ , subdivision du premier, où on n'évalue que l'amplitude.

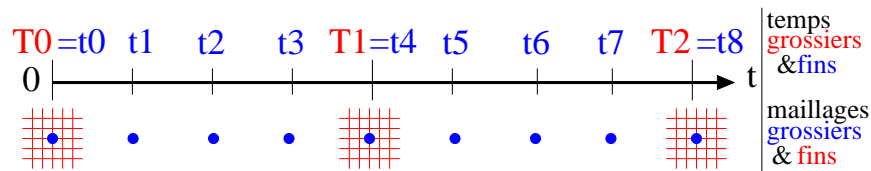


FIG. 5.1 – Deux échelles, en temps et espace, emboîtées pour la représentation quasi-statique du flux de neutrons.

On résout alternativement :

- le problème de cinétique point donnant  $a$  en connaissant  $f$  ;
- le problème cinétique sur le pas de temps grossier donnant  $f$  en connaissant  $a$ .

En effet, on suppose que l'évolution de la forme sur un pas de temps grossier est connue (constante), hypothèse renforcée par la condition (5.5). On reconstruit ainsi  $\phi$  à chaque pas de temps (fins) suivant la décomposition (5.2).

On considère les équations sur le flux où  $\phi$  est substitué par le produit  $af$ . Pour la première résolution donnant  $a$ , on condense ces équations en espace et en énergie après multiplication par le flux adjoint initial. On intègre donc les équations sur le domaine  $\Omega$  et sur les groupes d'énergie. La dérivée en temps de la forme disparaît grâce à la condition de normalisation (5.5). Pour la forme, le traitement des équations est identique à celles sur le flux, seule la discrétisation en temps est différente. La représentation, comme le  $\theta$ -schéma par exemple, et l'intégration se font donc sur les pas de temps grossiers. Finalement, on aboutit à un système dynamique sur les deux pas de temps que l'on sait résoudre.

Tous les plus grands codes de calcul (diffusion et transport) appliquent au moins une des méthodes quasi-statiques (en général le quasi-statique amélioré). Nous allons voir dans la section suivante, l'application de l'approche IQS dans le contexte mixte dual de MINOS. Puis, nous reprendrons la factorisation (5.2) et étudierons comment développer l'idée multi-échelle qui nous a fait passer du quasi-statique au quasi-statique amélioré.

## 5.2 Le quasi-statique amélioré

Rappelons le problème de la cinétique multigroupe que l'on considère :

$$\left\{ \begin{array}{l} V^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi - [\Sigma] \phi + S_d, \\ -D^{-1} \vec{p}_\phi = \vec{\nabla} \phi, \\ \frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c + [\beta \nu \Sigma_f] \phi, \\ \phi(t=0) = \phi_0, \phi|_{\Gamma_D} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_N} = 0, (\vec{p}_\phi \cdot \vec{n})|_{\Gamma_R} = [\tau] \phi, \end{array} \right. \quad (5.6)$$

où  $S_d = -[\chi_d] \frac{\partial c}{\partial t}$ . Le quasi-statique amélioré (IQS) considère donc la décomposition (5.3). Les travaux [Dahmani, 1999] ont adapté cette approche au contexte mixte du solveur MINOS. Ainsi le courant est aussi décomposé :

$$\vec{p}_\phi = a(t) \vec{p}_f \quad \text{avec} \quad \vec{p}_f = -D \nabla f, \quad (5.7)$$

et on définit deux problèmes. Le premier est l'adjonction d'une cinétique point (i.e. indépendant de l'espace) monogroupe et des équations de précurseurs :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{da(t)}{dt} = \left( \frac{\rho}{\Lambda}(t) - \frac{\beta^{eff}}{\Lambda}(t) \right) a(t) + \lambda c(t), \\ \frac{dC}{dt} = -\lambda C + \frac{\beta^{eff}}{\Lambda}(t) a(t), \end{array} \right. \quad (5.8)$$

avec :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} [\Sigma] f \phi_0^* \vec{dr} - \sum_{g=1}^G \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f \phi_0^* \vec{dr}}{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} [\chi \nu \Sigma_f] f \phi_0^* \vec{dr}}, \\ \Lambda &= \frac{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} V^{-1} f \phi_0^* \vec{dr}}{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} [\chi \nu \Sigma_f] f \phi_0^* \vec{dr}}, \\ \beta^{eff} &= \frac{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} [\chi_d \beta \nu \Sigma_f] f \phi_0^* \vec{dr}}{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} [\chi \nu \Sigma_f] f \phi_0^* \vec{dr}}, \\ C &= \frac{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} \chi_{dc} \phi_0^* \vec{dr}}{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} V^{-1} f \phi_0^* \vec{dr}}. \end{aligned}$$

Ces équations sont donc condensées en espace et en énergie. Le système sur la forme est quand à lui une formulation mixte standard :

$$\left\{ \begin{array}{l} V^{-1} \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{f}{a} \frac{da}{dt} \right) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f - [\Sigma] f + \frac{1}{a} S_d, \\ -D^{-1} \vec{p}_f = \vec{\nabla} f, \\ \frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c + [\beta \nu \Sigma_f] a f, \\ f(t=0) = f_0, f|_{\Gamma_D} = 0, (\vec{p}_f \cdot \vec{n})|_{\Gamma_N} = 0, (\vec{p}_f \cdot \vec{n})|_{\Gamma_R} = [\tau] a f. \end{array} \right. \quad (5.9)$$

L'unicité est garantie par la condition de normalisation (5.5). Le premier problème est un système différentiel résolu en utilisant une méthode Kaps et Rentrop ([Dahmani, 1999]) sur

les pas de temps fins. Le second est traité avec le solveur MINOS sur les pas de temps grossiers.

Cette approche est une innovation du quasi-statique. Son intégration dans le contexte MINOS a permis de bénéficier des avantages du solveur. Néanmoins, en pratique, pour obtenir une précision équivalente à celle de MINOS, on doit discrétiser très finement en temps. Les lecteurs pourront étudier les résultats obtenus sur les mêmes cas test que nous considérerons dans les chapitres 9 et 10 dans la thèse [Dahmani, 1999]. Mais, au bout du compte, le ratio temps / précision de l'approche IQS n'est pas meilleur que celui de MINOS.

## 5.3 Idée de la généralisation locale

Le défaut de la méthode précédente se situe dans la supposition forte d'une amplitude constante en espace et en énergie. Ainsi sur les pas de temps fins, on ne prend pas assez en compte les variations spatiales et énergétiques, liées par exemple à une forte hétérogénéité du milieu. Par conséquent, on recherche d'autres approches reprenant en partie l'idée du quasi-statique, pour son gain en temps de calcul, mais avec une moindre condensation de l'amplitude.

Dans ces approches, on cherche à transposer localement les hypothèses globales du quasi-statique. C'est-à-dire que sur des sous domaines, on retrouvera une décomposition amplitude/forme quasi-statique (amplitude ne dépendant que du temps et forme faiblement dépendante en temps). En adaptant, par exemple, ces sous domaines aux propriétés du milieu, on espère obtenir un modèle plus réaliste. On cherche donc à étendre le principe pour l'améliorer, i.e. améliorer la précision du modèle tout en gardant les avantages du multi-échelle.

### 5.3.1 Cinétique multipoint

Une première idée fut introduite par [Avery, 1958] puis fut développée dans les travaux de [Kobayashi, 1990]. Les derniers travaux [Bosio *et al.*, 2001] sur cette approche se sont focalisés sur des applications physique spécifiques de cœur ayant de fortes hétérogénéités dans leurs données. Ces travaux considèrent les équations de la diffusion en formulation non-mixte et donc ne se fixent pas à un solveur spécifique. La méthode est une décomposition de domaine. C'est-à-dire que l'on pose une factorisation (5.3) sur un ensemble de sous domaines prédéfinis. Ces sous domaines se calent sur les hétérogénéités du cœur. Le couplage des différents problèmes quasi-statique s'effectue par des conditions aux limites. Éventuellement, en sommant les différents systèmes, les conditions des bords internes s'annulent et on obtient un système global pour l'amplitude.

Cette approche, appelée cinétique multipoint, a été étudiée ensuite dans les travaux de [Bosio *et al.*, 2001] pour l'adaptation de la pondération à la représentation locale. La problématique s'est focalisée sur la précision des calculs et non sur le temps. La méthode consiste à déterminer des fonctions de pondération optimales, comme le flux adjoint initial  $\phi_0^*$  l'est pour le quasi-statique standard. Le flux  $\phi_0^*$  est considéré ([Ott et Meneley, 1969]) comme le meilleur choix sur le domaine complet  $\Omega$ . L'approche multipoint définit des problèmes préalables propres à chaque sous domaine, voire à chaque groupe d'énergie, pour déterminer ces pondérations locales.

Nous verrons que si nos travaux ressemblent par leur approche à cette méthode, les techniques et les fins sont différentes. Le multipoint transpose le quasi-statique point sur chaque sous domaine et cherche pas l'adaptation théorique (la pondération) à obtenir la

meilleure précision pour des cas fortement hétérogènes. On discutera tout de même à la fin de l'éventuelle compatibilité, voire coopération, que l'on pourrait tirer des deux approches.

### 5.3.2 Idée quasi-statique locale

Plusieurs pistes ont été étudiées et d'un point de vue théorique, seule celle que nous allons voir par la suite répondait aux contraintes du problème. Entre autre, on verra que l'on peut conserver la discontinuité du flux et la continuité du courant en même temps. De plus, on profitera pleinement des outils existants et optimisés dans l'environnement du code actuel, MINOS.

Comme on l'a dit précédemment, la problématique se situe essentiellement sur l'optimisation du ratio temps/ précision. La méthode de référence répond bien aux attentes de précisions mais s'avère très coûteuse en temps. Par conséquent, à partir des mêmes équations (5.6), on cherche des solutions alternatives de résolution. Pour gagner en temps, on doit :

- soit faire des suppositions ou approximations qui affectent la précision ;
- soit changer les outils de résolution.

Les pistes multi-grilles ou multi-échelles proposées dans le sujet de l'étude peuvent concerner les deux éventualités.

Notre idée est donc de poser des hypothèses permettant de définir une approche quasi-statique locale. Nous avons donc repris la factorisation (5.2) et l'avons introduit dans les équations (5.6). En repartant de zéro, nous avons étudié la reformulation du problème pour aboutir à la méthode que nous présentons dans le chapitre suivant.

## 5.4 Application d'idées multi-échelles

Mais comme nous l'avons dit, il existe des outils de résolution multi-échelles dans leur conception. Par exemple, les méthodes multigrilles classiques de la littérature, parmi d'autres [Hackbusch, 1985, Wesseling, 1992, Désidéri, 1998], sont des techniques permettant d'accélérer les résolutions de systèmes linéaires issus de discrétisations. L'idée est que la vitesse d'inversion d'un système, et donc le temps de résolution, sont proportionnels à la taille de la maille. Plus le maillage est grossier, plus les systèmes sont petits et plus la résolution va vite. Mais inversement, la précision est liée à la finesse de cette maille.

Mais pour les méthodes multigrilles, on fait un autre constat, dans les techniques d'inversion itératives, la vitesse de résolution est aussi liée au nombre d'itérations. Elle est donc meilleure si l'initialisation est bonne, i.e. proche de la solution. De là, la première idée des méthodes multi-grilles est d'optimiser l'initialisation. On choisit pour cela la solution du problème obtenue sur une discrétisation plus grossière. On remonte ensuite l'information grossière pour accélérer le processus fin.

Sur le même principe, on va, pour accélérer les itérations fines, chercher des informations aux échelles grossières. Cependant, ces méthodes ne répondent pas à notre problématique puisque :

- le solveur actuel (MINOS, [Baudron et Lautard, 2007]) est en partie direct ;
- ce même solveur est déjà optimisé.

Une approche multi-grille, qui pourrait certes être adaptée, n'apporterait donc finalement rien d'innovant. Et c'est pourquoi on considère une autre voie, c'est-à-dire une technique multi-échelle développée à partir de l'idée quasi-statique. Pour plus de détails sur les théories multigrilles, les lecteurs pourront étudier une application à un problème non multi-échelle à l'origine comme par exemple les travaux [Chauvet et Nachaoui, 2008].

Le multigrille est dit additif car les informations des différentes échelles se combinent par addition. On corrige la solution fine en lui ajoutant une estimation grossière de l'erreur. La variable temporelle nous amène à privilégier une correction multiplicative comme le quasi-statique.





## Chapitre 6

# La méthode quasi-statique locale, principe théorique et propriétés

*Quasi-statique local est le nom de notre approche. Cependant, il faut la mettre en place et en cohérence avec les problématiques mathématiques et numériques. Dans ce chapitre, nous exposons les équations de notre méthode et décrivons en particulier les spécificités de modélisation. La formulation mixte est choisie pour s'intégrer au solveur MINOS. Nous discutons ensuite des résultats théoriques en référence au chapitre sur la mathématique des équations. Nous posons les conditions et justifications du bon fonctionnement de l'algorithme de la méthode. Nous exposons le traitement des deux fonctions d'amplitude et de forme d'un point de vue théorique. Nous intégrons aussi l'équation des précurseurs au processus. Les hypothèses et les choix justifiés sont totalement nouveaux par rapport aux précédentes approches quasi-statiques. Nous discutons de ces différences et du bénéfice à en tirer. Pour cet exposé, nous exploitons l'ensemble des résultats et propriétés développés dans les chapitres précédents.*

Comme on l'a dit précédemment, notre problématique se situe essentiellement sur l'optimisation du ratio temps/ précision de la résolution des équations de la cinétique. La méthode de référence de MINOS (cf. chapitre 4) répond bien aux attentes de précisions mais s'avère très coûteuse en temps. Par conséquent, à partir des mêmes équations (5.6), on cherche des solutions alternatives de résolution. Suivant l'idée multi-échelle introduite au chapitre précédent, nous allons étudier notre approche quasi-statique, ses propriétés, son traitement pour l'amplitude et la forme.

## 6.1 Formulation mixte de la décomposition quasi-statique

On repart de la factorisation quasi-statique (5.2). Dans notre cas, on considère une amplitude grossière en espace et une forme grossière en temps :

$$\phi^g(\vec{r}, t) = a^g(\vec{R}, t) f^g(\vec{r}, T). \quad (6.1)$$

Avant de voir les équations qui en découlent, intéressons nous au courant

$$\vec{p}_\phi = -D\vec{\nabla}\phi = -Df\vec{\nabla}a - Da\vec{\nabla}f \quad (6.2)$$

selon la définition de la loi de Fick (2.6). Puisque nous avons intégré à notre problématique le choix du solveur MINOS, nous désirons adapter la définition (6.1) au point de vue mixte. Ainsi, nous pourrions utiliser les atouts de MINOS pour les deux fonctions, d'amplitude et de forme. On définit donc des courants d'amplitude et de forme :

$$\vec{p}_a = -fD\vec{\nabla}a, \quad \vec{p}_f = -aD\vec{\nabla}f \quad \text{et donc} \quad \vec{p}_\phi = \vec{p}_a + \vec{p}_f. \quad (6.3)$$

En effet, si on gardait la définition classique (loi de Fick) du courant ( $\vec{p}_a = -D\vec{\nabla}a$  et  $\vec{p}_f = -D\vec{\nabla}f$ ), on devrait poser des conditions fortes sur l'amplitude et la forme pour garantir la continuité du courant reconstruit. Pour rappel, c'est la représentation mixte de MINOS qui impose cette continuité, comme précisé dans la remarque 4.1. On nomme cette approche quasi-statique locale (LQS) et on schématise son principe sur la figure 6.1.

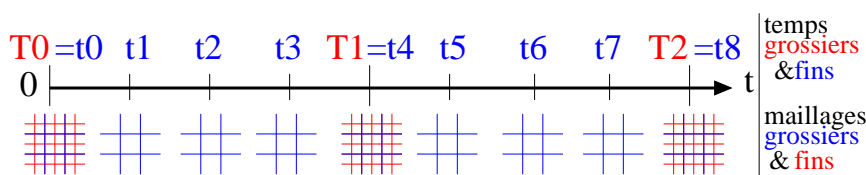


FIG. 6.1 – Deux échelles, en temps et espace, emboîtées pour la représentation quasi-statique locale du flux de neutrons.

Contrairement aux approches quasi-statiques introduites dans le chapitre précédent, où l'amplitude est monogroupe, nous considérons une décomposition amplitude-forme multigroupe. En effet, nous adoptons pour les problèmes suivants, sur l'amplitude et sur la forme, les conventions d'écriture à  $G$  groupes introduites à la section 3.1. Nous présenterons une approche pour la fonction d'amplitude reposant sur les méthodes de résolution multigroupe de MINOS, comme pour le flux de forme. Nous verrons à la fin du chapitre que le traitement multi-échelle peut aussi s'appliquer à la variable d'énergie.

Ainsi, on intègre la décomposition (6.1) et la définition (6.3) des courants au problème (5.6). Ce qui nous donne deux problèmes symétriques à résoudre :

– l'un pour l'amplitude  $a$  en connaissant  $f$

$$\begin{cases} (V^{-1}f) \frac{\partial a}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a - ([\Sigma]f) a + V^{-1} \frac{\partial f}{\partial t} a + \left( S_d - \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f \right), \\ -(fD)^{-1} \vec{p}_a = \vec{\nabla} a, \\ \frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c + ([\beta\nu\sigma_f]f) a; \end{cases} \quad (6.4)$$

– l'un pour la forme  $f$  en connaissant  $a$

$$\begin{cases} (V^{-1}a) \frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f - ([\Sigma]a) f + V^{-1} \frac{\partial a}{\partial t} f + \left( S_d - \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a \right), \\ -(aD)^{-1} \vec{p}_f = \vec{\nabla} f, \\ \frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c + ([\beta\nu\sigma_f]a) f; \end{cases} \quad (6.5)$$

où  $S_d = -[\chi_d] \frac{\partial c}{\partial t}$ . Nous conservons la formulation multigroupe introduite à la section 3.1. En effet, contrairement aux méthodes quasi-statiques précédentes, dans notre cas, l'amplitude dépend de l'énergie. Nous le verrons dans la section suivante.

On remarque que si on résout ces problèmes de sorte que  $\vec{p}_a$  et  $\vec{p}_f$  soient continus, on garantit bien la continuité du courant total  $\vec{p}_\phi$ . On verra plus loin quelle condition de normalisation on choisira pour rendre le produit (5.2) unique. En effet, cette condition nous permettra de simplifier les équations comme dans l'approche quasi-statique. Mais on peut déjà commencer à caractériser la factorisation en précisant les conditions aux limites.

Pour l'amplitude, on reprend la condition initiale quasi-statique et on pose une condition unique en espace :

- Initiale :  $a(t=0) = 1$  ;
- Neumann :  $\vec{p}_a \cdot \vec{n} = 0$  si  $\vec{r} \in \partial\Omega$  ;

d'où, on déduit les conditions pour la forme qui sont finalement similaires à celle du flux :

- Initiale :  $f(t=0) = \phi(t=0) = \phi_0$  ;
- Dirichlet :  $f = 0$  si  $\vec{r} \in \Gamma_D$  ;
- Neumann :  $\vec{p}_f \cdot \vec{n} = 0$  si  $\vec{r} \in \Gamma_N$  ;
- Robin :  $\vec{p}_f \cdot \vec{n} = [\tau]af$  si  $\vec{r} \in \Gamma_R$  .

À  $t = 0$ , la condition de Neumann unique sur  $a$  est vérifiée avec l'initialisation ( $a(\vec{r}, 0) = 1$ ). Ensuite, on supposera pour la discrétisation que  $a$  varie faiblement en espace, voire qu'elle est constante par morceaux ( $RT_0$ ). La condition est donc cohérente avec cette représentation. De même, la condition de Dirichlet  $af = 0$  aurait posé problème car si  $f = 0$  sur  $\Gamma_D$  alors on ne peut déduire aucune information pour  $a$  : le problème aurait été incomplet. La condition de Neumann sur  $f$ , équivalente à celle de  $\phi$ , permettra aussi de conserver les mêmes espaces de fonctions dans la formulation faible du problème (6.5). Finalement, la solution  $\phi$  reconstituée selon l'égalité (5.2) reste bien compatible avec les conditions aux limites originelles. En effet, en intégrant simplement la décomposition (5.2), les conditions aux limites sur  $\phi$  deviennent :  $af = 0$  sur  $\Gamma_D$  (Dirichlet) ;  $\vec{p}_a \cdot \vec{n} + \vec{p}_f \cdot \vec{n} = 0$  sur  $\Gamma_N$  (Neumann) et  $\vec{p}_a \cdot \vec{n} + \vec{p}_f \cdot \vec{n} = [\tau]af$  sur  $\Gamma_R$  (Robin).

On peut écrire  $(fD)^{-1}$  et  $(aD)^{-1}$ , sauf sur le bord du domaine  $\Gamma_D$ , si  $\phi$  est non nul. Or physiquement, et dans certaines conditions mathématiques abordées au chapitre 3, le flux est strictement positif (c'est une densité volumique) donc  $a$  et  $f$  sont aussi non nuls (définition (5.2)). Plus précisément, lorsque l'on alternera la résolution de ces problèmes,  $a$  étant initialisé à 1 ( $\neq 0$  et  $\in L^\infty(\Omega)$ ), la forme  $f$  solution de (6.5) aura les bonnes propriétés



**Remarque 6.1** Cette méthode est similaire à l'approximation aux éléments finis de Raviart-Thomas. Néanmoins, on ne considèrera pas par la suite que la représentation (6.7) est une approximation. On supposera que l'amplitude s'exprime réellement et littéralement dans cette base.

On substitue les flux et courants test du système (6.6) par des éléments de la base précédente. D'où on obtient le système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N \frac{\partial a_i}{\partial t} \int_{\Omega} V^{-1} f \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} = - \sum_{d=x,y,z} \sum_{j_d=1}^{M_d} p_{a,d,j_d} \int_{\Omega} \frac{\partial B_{j_d}^{(1,d)}}{\partial d} \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr} \\ - \sum_{i=1}^N a_i \int_{\Omega} [\Sigma] f \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} - \sum_{i=1}^N a_i \int_{\Omega} V^{-1} \frac{\partial f}{\partial t} \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} \\ + \int_{\Omega} S_d \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr} - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr}, \\ \sum_{d=x,y,z} \sum_{j_d=1}^{M_d} p_{a,d,j_d} \int_{\Omega} (fD)^{-1} B_{j_d}^{(1,d)} B_{j'_d}^{(1,d)} \vec{dr} - \sum_{i=1}^N a_i \int_{\Omega} \frac{\partial B_{j'_d}^{(1,d)}}{\partial d} \psi_0 B_i^{(0)} \vec{dr} = 0, \end{array} \right. \quad (6.8)$$

$\forall i' = 1, \dots, N$  et  $\forall j'_d = 1, \dots, M_d$ . Ainsi, les intégrales des équations précédentes forment les termes condensés d'un système grossier. Système que l'on veut résoudre pour déterminer les valeurs locales de l'amplitude. Suivant la même inspiration que pour le quasi-statique (condition (5.5)), on pose une condition de normalisation locale :

$$\int_{\Omega} V^{-1} f \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} \text{ constante en temps et donc } \int_{\Omega} V^{-1} \frac{\partial f}{\partial t} \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} = 0, \quad (6.9)$$

$\forall i, i' = 1, \dots, N$ . Cette condition permet donc :

- de garantir l'unicité de la factorisation (6.1) ;
- de concrétiser l'hypothèse de variation temporelle grossière pour la forme.

On comprend donc que le poids  $\psi_0$  ait été inséré dans la base (6.7) pour retrouver cette condition de normalisation pondérée. C'est donc une transposition locale de la condition IQS (5.5) dans l'espace des éléments finis grossiers de l'amplitude. On discutera plus loin et dans le chapitre suivant des choix possibles pour ce flux de poids ( $\phi_0^*$ , 1, ...). Néanmoins, on peut déjà noter que cette condition :

- est plus restrictive ;
- permet, comme la précédente, de simplifier le terme de la dérivée en temps de la forme dans le système (6.8) ;
- devrait garantir une plus forte indépendance, que pour l'approche IQS, de la forme envers la variable temporelle.

C'est pour cette dernière raison que l'on s'autorise à supposer une constance en temps des

termes suivants sur chaque intervalle grossier  $\Delta T_K$ . Ainsi,  $\forall t \in \Delta T_K$ , on pose :

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} [\Sigma](t) f(t) \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} &= \int_{\Omega} [\Sigma](t) f(T_K) \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr}; \\
\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f(t) \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr} &= \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f(T_K) \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr}; \\
\int_{\Omega} (f(t) D(t))^{-1} B_{j_d}^{(1,d)} B_{j'_d}^{(1,d)} \vec{dr} &= \int_{\Omega} (f(T_K) D(t))^{-1} B_{j_d}^{(1,d)} B_{j'_d}^{(1,d)} \vec{dr}; \\
\int_{\Omega} [\chi_d] [\beta \nu \Sigma_f](t) f(t) \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr} &= \int_{\Omega} [\chi_d] [\beta \nu \Sigma_f](t) f(T_K) \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr};
\end{aligned} \tag{6.10}$$

$\forall i, i' = 1, \dots, N$ ,  $\forall j_d, j'_d = 1, \dots, M_d$  et  $\forall d = x, y, z$ . Le dernier terme sera utilisé dans le paragraphe 6.4.1 sur le traitement des précurseurs. Pour le deuxième, la divergence du courant de forme, puisque dans le modèle de la diffusion on néglige la dérivée en temps du courant ( $\frac{\partial \vec{p}_f}{\partial t}$ ), cette supposition paraît raisonnable. Néanmoins, on peut remarquer que :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f = -(Df)^{-1} \vec{p}_a \cdot \vec{p}_f^{Fick} + a \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f^{Fick},$$

où  $\vec{p}_f^{Fick} = -D \vec{\nabla} f$ . Avec cette égalité, on pourrait se ramener à des termes dont on pourrait mieux expliciter la dépendance en temps. Cependant, cela compliquerait fortement le système que l'on va construire. Ainsi, on se satisfait de cette supposition.

Le choix du flux de poids  $\psi_0$  reste encore à déterminer. Si on posait  $\psi_0 = \sqrt{\phi_0^*}$ , on obtiendrait une condition de normalisation (6.9) qui serait la transposition locale de celle du quasi-statique (5.5). Cependant, cette racine serait difficile à évaluer et compliquerait l'assemblage du système linéaire (en particulier les matrices aux différences, définies (4.19), ne seraient plus unitaires). De plus, les travaux [Bosio *et al.*, 2001] (cf. section 5.3) montrent qu'une pondération locale peut être plus sophistiquée. L'autre choix pourrait être de se passer de pondération :  $\psi_0 = 1$ . Néanmoins, la vérification initiale de la condition de normalisation est une garantie supplémentaire pour l'indépendance de la forme envers le temps. Dans le cas d'un poids unitaire, cela ferait défaut, sauf configuration de cœur critique. Inversement, un poids non unitaire complique les espaces de discrétisation. Devant ce dilemme, notre choix de  $\psi_0$  sera essentiellement numérique comme nous le verrons dans le chapitre suivant.

## 6.2.2 Discrétisation en temps

Pour discrétiser le système condensé (6.8), l'amplitude est développée selon un  $\theta$ -schéma, définition (3.15), sur les intervalles de temps fins  $\Delta t_k = [t_k, t_{k+1}]$  ( $\delta t_k = t_{k+1} - t_k$ ). Pour alléger la rédaction, on écrit tout d'abord les équations (6.8) sous forme vectorielle :

$$\begin{cases} \langle V^{-1} f \psi_0^2 \rangle \frac{\partial a}{\partial t} = - \langle B \psi_0 \rangle \vec{p}_a - \langle \Sigma f \psi_0^2 \rangle a + \langle S_d \psi_0 \rangle - \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f \psi_0 \rangle, \\ \langle (Df)^{-1} \rangle \vec{p}_a - \langle {}^t B \psi_0 \rangle a = 0, \end{cases} \tag{6.11}$$

où  $a$  est le vecteur des  $a_i$ ,  $\langle \Sigma f \psi_0^2 \rangle$  est la matrice des termes condensés  $\int_{\Omega} [\Sigma] f \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr}$  et ainsi de suite. On a bien sûr simplifié le terme lié à la condition de normalisation. Ainsi





On a donc bien une matrice symétrique. De plus, dans le cas particulier de bases éléments finis d'ordre 0 ( $RT_0$ ) où les  $B_i^{(0)}$  sont constants par morceaux et les  $B_j^{(1,d)}$  sont linéaires par morceaux, et pour  $\psi_0 = 1$  :

- la matrice  $[\Sigma f \psi_0^2]^q$  est diagonale ;
- les matrices  $B_d$  sont des matrices aux différences.

Rappelons que l'intérêt numérique des matrices aux différences, composées de deux diagonales de 1 et de  $-1$ , réside dans le fait que l'on n'a pas besoin de les stocker. Si l'on pose  $f^g \in L^\infty(\Omega)$  et  $f^g$  non nul sur  $\Omega - \Gamma_D$  ( $f^g \neq 0$  presque partout), comme pour la formulation continue, mais qu'en plus on ajoute  $\psi_0 \in L^\infty(\Omega)$ , le théorème 3.5 s'applique. Ainsi, ces conditions garantissent existence et unicité de la solution du problème. De même, sous ces conditions, les théorèmes 3.2 et 3.3 peuvent s'appliquer. Ainsi, les propriétés de la solution sont liées à celles de  $D$  et  $[\Sigma]$ .

Le système (6.13) est défini pour chaque groupe d'énergie  $g$ . On verra dans le paragraphe 6.4, après l'intégration des précurseurs, comment on peut compléter la condensation en espace par une condensation en énergie. L'idée est que si  $a$  varie faiblement en espace, il peut aussi dépendre faiblement de la variable d'énergie.

### 6.3 Résolution de la forme

Le traitement de la forme est plus standard puisque calqué sur la méthode de référence. La seule particularité réside dans la remontée de l'information de l'amplitude.

#### 6.3.1 Discrétisation en espace

Avant de préciser les spécificités de la discrétisation en temps, on peut voir les données spatiales. Tout d'abord, résoudre le problème (6.5) équivaut à trouver pour chaque groupe  $g$  :  $f^g \in L^2(\Omega)$  et  $\vec{p}_f^g \in H(\text{div}, \Omega, \Gamma_N) = \{\vec{q} \in (L^2(\Omega))^3 / \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \in L^2(\Omega) / \vec{q} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_N\}$  tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} V^{-1} \frac{\partial(af)}{\partial t} \psi \vec{d}r = - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f \psi \vec{d}r - \int_{\Omega} ([\Sigma]a) f \psi \vec{d}r + \int_{\Omega} (S_d - \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a) \psi \vec{d}r, \\ \int_{\Omega} (aD)^{-1} \vec{p}_f \cdot \vec{q} \vec{d}r - \int_{\Omega} f \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \vec{d}r + \int_{\Gamma_R} (a[\tau])^{-1} (\vec{p}_f \cdot \vec{n}) (\vec{q} \cdot \vec{n}) ds = 0, \end{array} \right. \quad (6.14)$$

$\forall \psi \in L^2(\Omega)$  et  $\forall \vec{q} \in H(\text{div}, \Omega, \Gamma_N)$ . De la même façon que pour l'amplitude, en lien avec le chapitre 3, théorème 3.1, l'existence et l'unicité de la solution sont vérifiées si l'on pose  $a^g \in L^\infty(\Omega)$  et  $a^g$  non nul sur  $\Omega$ . On a vu juste avant, les conditions pour cela.

À noter que l'on applique la formule de Green sur chaque maille  $m_i$  :

$$\int_{\Omega} (aD)^{-1} \vec{p}_f \cdot \vec{q} \vec{d}r + \int_{\Omega} \vec{\nabla} f \cdot \vec{q} \vec{d}r = \sum_{m_i \subset \Omega} \int_{m_i} (aD)^{-1} \vec{p}_f \cdot \vec{q} \vec{d}r - \int_{m_i} f \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \vec{d}r + \sum_{m_i \subset \Omega} \int_{\partial m_i} f \vec{q} \cdot \vec{n}_{|m_i} ds = 0, \quad (6.15)$$

et donc on ne retrouve le système (6.14) que sous la condition que  $f$  soit continue aux interfaces. C'est ce qui est supposé dans MINOS pour la résolution du flux  $\phi$  et ceci dans le but d'obtenir un flux continu à la convergence. Néanmoins, dans notre cas, nous verrons dans la section 8.4 que cette hypothèse est discutable.



où :

$$\begin{aligned}
[\Sigma a]^q &= \frac{1}{\theta \delta T_i} V^{-1} a(T_q) + \frac{(-1)^{q-i+1}}{\theta \delta T_i} \sum_{\Delta t_k \subset \Delta T_i} \left[ \int_{\Delta t_k} [\Sigma] a \omega_q dt + [\chi_d] e^{-\lambda \delta T_i} d_q(t_k) \right], \\
\int_{\Delta t_k} [\Sigma] a \omega_q dt &= \begin{pmatrix} [\Sigma](t_k) \\ [\Sigma](t_{k+1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \int_{\Delta t_k} l_k \omega_k \omega_q dt & \int_{\Delta t_k} l_k \omega_{k+1} \omega_q dt \\ \int_{\Delta t_k} l_{k+1} \omega_k \omega_q dt & \int_{\Delta t_k} l_{k+1} \omega_{k+1} \omega_q dt \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t_k) \\ a(t_{k+1}) \end{pmatrix}, \\
S_d &= \frac{1 - e^{-\lambda \delta T_i}}{\theta \delta T_i} [\chi_d] c(T_i), \quad \int_{\Delta T_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a dt = \sum_{\Delta t_k \subset \Delta T_i} \delta t_k ((1 - \theta) \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a(t_k) + \theta \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a(t_{k+1})), \\
[aD]^q &= \frac{(-1)^{q-i}}{\theta \delta T_i} \sum_{\Delta t_k \subset \Delta T_i} \int_{\Delta t_k} (aD)^{-1} \omega_q dt.
\end{aligned}$$

Attention, les  $\omega_k$  et les  $\omega_q$  ne sont pas les mêmes : les uns sont définis sur  $\Delta t_k$ , les autres sur  $\Delta T_i$  ; de même pour les  $\theta$ . On remarque aussi, que si les pas de temps sont réguliers, des simplifications seront possibles. Néanmoins, le dernier terme  $\int_{\Delta t_k} (aD)^{-1} \omega_q dt$  est difficile à calculer. Et de façon générale, cet assemblage en temps est visiblement compliqué et donc coûteux en temps de calcul. On verra dans le chapitre 8 comment on simplifie le traitement numérique de ce problème. Pour la forme, on utilise donc un  $\theta$ -schéma sur les pas de temps grossiers. Nous privilégions pour ce  $\theta$ -schéma une forme implicite ( $\theta = 1$ ) pour sa stabilité. C'est-à-dire que ce schéma est plus adapté à des pas de temps longs. Finalement, on constate que pour résoudre ce système, on doit connaître l'amplitude jusqu'au temps  $T_{i+1}$ . On verra dans la section suivante comment on doit enchaîner les résolutions pour permettre cela.

### 6.3.3 Assemblage du système linéaire

On obtient ainsi un système linéaire proche du premier (6.13) mais sans la condensation spatiale. En reprenant les notations du système (4.7) :

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} T_{i+1} & B_x & B_y & B_z \\ {}^t B_x & -A_{x,i+1} & 0 & 0 \\ {}^t B_y & 0 & -A_{y,i+1} & 0 \\ {}^t B_z & 0 & 0 & -A_{z,i+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ P_{f,x} \\ P_{f,y} \\ P_{f,z} \end{pmatrix} (T_{i+1}) = \begin{pmatrix} S \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&+ \begin{pmatrix} T_i & -\frac{(1-\theta)}{\theta} B_x & -\frac{(1-\theta)}{\theta} B_y & -\frac{(1-\theta)}{\theta} B_z \\ -\frac{(1-\theta)}{\theta} {}^t B_x & -A_{x,i} & 0 & 0 \\ -\frac{(1-\theta)}{\theta} {}^t B_y & 0 & -A_{y,i} & 0 \\ -\frac{(1-\theta)}{\theta} {}^t B_z & 0 & 0 & -A_{z,i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ P_{f,x} \\ P_{f,y} \\ P_{f,z} \end{pmatrix} (T_i), \quad (6.20)
\end{aligned}$$

où  $T_q = [\Sigma a]^q$ ,  $A_{d,q} = [aD]_d^q$  et  $S = S_d - \frac{1}{\theta \delta T_i} \int_{\Delta T_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a dt$ .

## 6.4 Bilan de la méthode

Pour conclure cette présentation de la méthode quasi-statique locale, deux éléments restent à voir : le traitement des précurseurs du problème condensé et l'algorithme global.

### 6.4.1 Traitement des précurseurs condensés

Si on traite les précurseurs de façon analytique pour la forme, suivant le modèle de référence de MINOS, pour le problème condensé, plusieurs choix sont possibles. Tout d'abord, il nous intéresse de connaître une concentration de précurseurs condensée de façon judicieuse pour s'intégrer aux équations :  $\langle \chi c \psi_0 \rangle_{i=1, \dots, N} = \int_{\Omega} c [\chi_d] \psi_0 B_i^{(0)} \vec{dr}$ . Alors :

- soit on fait évoluer de façon standard (cf. section 3.5) les concentrations et on les condense ensuite pour obtenir  $\langle \chi c \psi_0 \rangle$  ;
- soit on cherche à faire évoluer directement  $\langle \chi c \psi_0 \rangle$ , puisque les concentrations aux temps fins ( $t_k$ ) ne sont pas nécessaires pour le calcul sur le maillage fin au temps grossier ( $T_i$ ).

La deuxième possibilité sera évidemment moins coûteuse en temps de calcul puisque sur un maillage grossier. Ainsi, on intègre l'équation (2.10) multipliée par  $[\chi_d] \psi_0 B_i^{(0)}$  :

$$\frac{\partial \langle \chi c \psi_0 \rangle_i}{\partial t} = \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} [\chi_d] \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr} = -\lambda \int_{\Omega} c [\chi_d] \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr} + \int_{\Omega} [\beta \nu \Sigma_f] a f [\chi_d] \psi_0 B_{i'}^{(0)} \vec{dr}.$$

On en déduit une formulation condensée et vectorisée :

$$\frac{\partial \langle \chi c \psi_0 \rangle}{\partial t} = -\lambda \langle \chi c \psi_0 \rangle + \langle [\chi_d] [\beta \nu \Sigma_f] \psi_0^2 \rangle a, \quad (6.21)$$

où  $\langle [\chi_d] [\beta \nu \Sigma_f] \psi_0^2 \rangle_{i,i'} = \int_{\Omega} [\beta \nu \Sigma_f] f [\chi_d] \psi_0^2 B_i^{(0)} B_{i'}^{(0)} \vec{dr}$ . On résoud cette équation de façon analytique, comme dans la section 3.5, en intégrant sur  $\Delta t_k$  et en tenant compte de la dernière supposition (6.10) :

$$\langle \chi c \psi_0 \rangle (t_{k+1}) = e^{-\lambda \Delta t_k} \langle \chi c \psi_0 \rangle (t_k) + \sum_{p,q=k}^{k+1} b_{pq} \langle \chi \Sigma(t_p) f(T_i) \psi_0^2 \rangle a(t_q), \quad (6.22)$$

sachant que  $\Delta t_k \subset \Delta T_i$  et que  $b_{pq} = e^{-\lambda \Delta t_k} \int_{\Delta t_k} e^{-\lambda(t_k-s)} l_p(s) \omega_q(s) ds$ , suivant les définitions déjà introduites.

Grâce à cela, on peut expliciter l'intégrale en temps de la source des précurseurs

$$\langle S_d \psi_0 \rangle = - \langle [\chi_d] \frac{\partial c}{\partial t} \psi_0 \rangle \quad (6.23)$$

dans le système (6.13).

### 6.4.2 Algorithme global

Finalement, l'enchaînement LQS est résumé dans l'algorithme 3. Les interdépendances entre la forme, l'amplitude, les précurseurs et les concentrations condensées sont illustrées sur la figure 6.2. On reconstruira le flux et le courant globaux à chaque pas de temps suivant les définitions (6.1) et (6.3) :

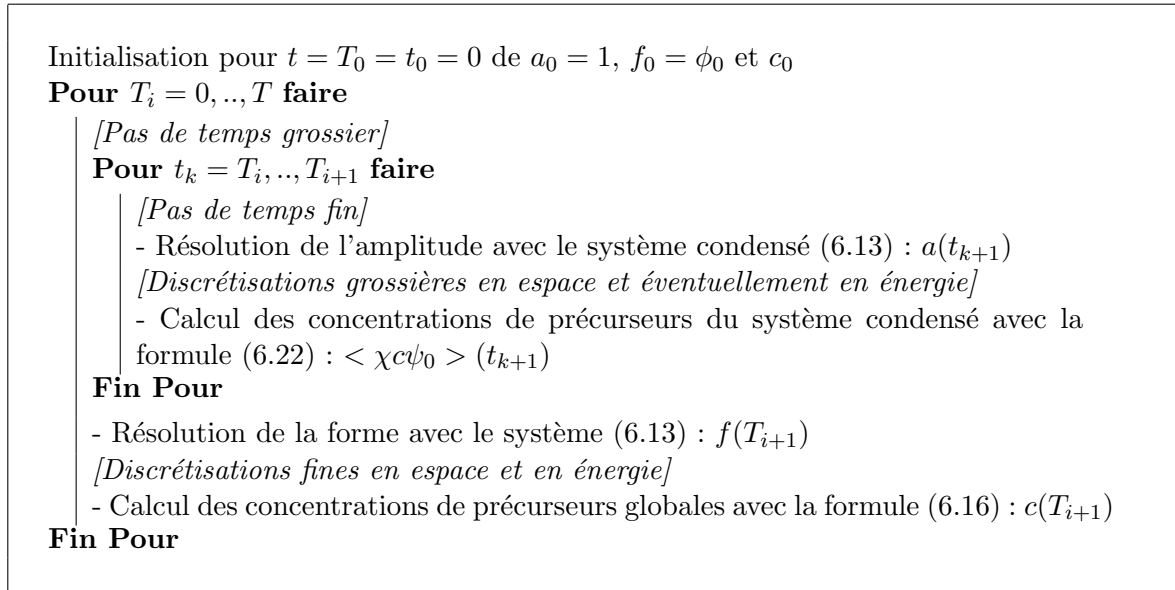
- pour les pas de temps grossiers, on connaît  $a$  et  $f$  ;
- pour les pas de temps fins, on connaît  $a$  et on reconstruit  $f$  grâce au schéma en temps et aux valeurs grossières les plus proches ( $f = f_i \omega_i + f_{i+1} \omega_{i+1}$ ).

Nous avons abordé dans cette présentation les problèmes d'existence et d'unicité des solutions. En lien avec le chapitre 3, nous avons vu que les théorèmes ne s'appliquent que si  $a$  et  $f$  sont strictement positifs et  $L^\infty(\Omega)$ . Or si dans certaines conditions (théorèmes 3.2 et 3.3), les solutions des équations de la diffusion le sont, on ne peut le garantir quelque

soit la situation. Si physiquement, un flux est toujours positif et borné, numériquement, il nous appartient d'être attentif à ce problème pour s'assurer du bon fonctionnement de la méthode. On pourra en particulier tester la positivité des solutions après chaque résolution et avant de passer aux suivantes.

On peut noter que dans ce schéma on a conservé la même discrétisation multigroupe pour toutes les résolutions. Cependant, puisque l'on suppose que l'amplitude concentre surtout la dépendance en temps, on pourrait, comme pour la variable d'espace, condenser aussi en énergie. Ainsi, on définirait de nouveaux groupes d'énergie  $l = 1, \dots, L$ , plus grossiers, de sorte que pour chaque groupe fin  $g$ , il existe un  $l$  tel que  $g \subset l$ . La condensation aurait été assez simple à intégrer dans les équations. Cependant, dans la pratique, cette condensation n'aurait que peu d'intérêt puisque l'on ne résout les équations que sur un nombre restreint de groupe (entre 2 et 4). Du fait de ce nombre limité, le comportement des éléments du problème peut varier significativement d'un groupe à l'autre. Il serait donc préjudiciable de trop condenser l'amplitude au risque de perdre en information. L'option théorique reste tout de même envisageable même si nous ne l'étudierons pas. Mais pour les mêmes raisons, on peut supposer que la représentation multigroupe de l'amplitude sera un plus dans la modélisation pour un coût en temps de calcul raisonnable.

Finalement, avant de voir la mise en œuvre de la méthode, on peut constater les similitudes entre cette approche et les nombreuses méthodes numériques multi-échelles. On divise le domaine en sous-domaines comme dans les méthodes de décomposition de domaines. On corrige le flux de forme fin par un calcul d'amplitude grossier, comme une sorte de calcul multigrille, non pas additif comme dans la théorie, mais multiplicatif. On condense les données comme dans les techniques d'homogénéisation mais de façons plus simple. On se rapproche donc de nombreuses méthodes multi-échelles mais sans être équivalent à l'une d'elles.



Algorithme 3: Méthode LQS, quasi-statique généralisée par développement local de l'amplitude.

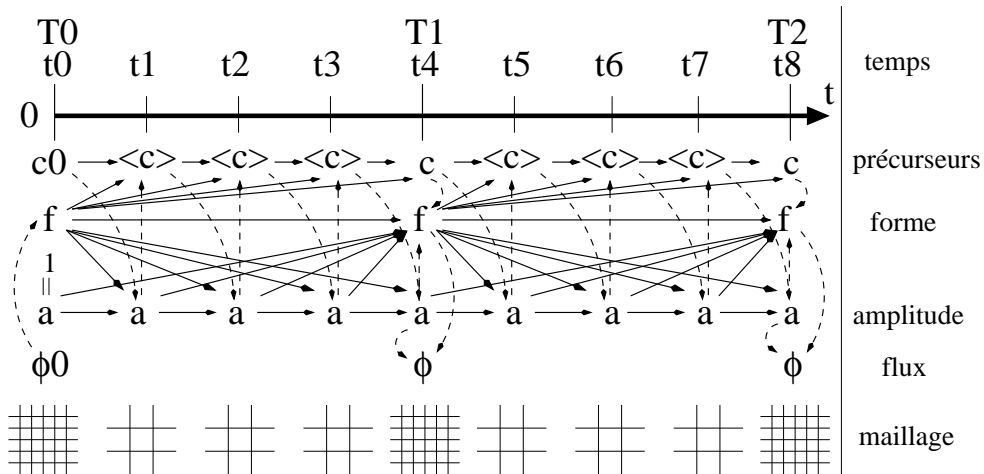


FIG. 6.2 – Enchaînements et interdépendances des fonctions inconnues sur les différents niveaux de discrétisations



## Chapitre 7

# Implémentation étape par étape pour le traitement de la fonction d'amplitude

*Une part importante du travail consiste dans l'implémentation de la méthode précédente. Deux problèmes différents sont traités en parallèle. Dans ce chapitre, nous exposons les détails du travail effectué pour le traitement de l'amplitude. Posée comme fonction grossière en espace et fine en temps, il faut adapter les équations mathématiques aux critères de fonctionnement du solveur MINOS. De plus, certaines approximations sont nécessaires pour le bon fonctionnement numérique. Nous discutons donc les aspects mathématiques et numériques de l'implémentation de ce problème particulier dans notre contexte de code. Les opérateurs d'interpolation et de condensation transposent les données et résultats des maillages grossiers et fins, en temps et en espace. Nous argumentons aussi sur la condition de normalisation, garantissant l'unicité de la factorisation, pour ses implications dans le traitement de l'amplitude. Les choix et hypothèses sont justifiés mathématiquement, du fait de la modélisation ou par des illustrations numériques simples.*



Pour obtenir une nouvelle méthode, de la modélisation précédente il faut déduire une implémentation. Mais au nouveau concept multi-échelle, il faut associer une nouvelle représentation numérique, tout ceci avec l'exigence de s'insérer au mieux dans l'outil actuel : DESCARTES/APOLLO3; et en particulier, on veut tirer profit du solveur MINOS ([Baudron et Lautard, 2007]). Ainsi, nous allons voir les éléments clés de l'implémentation en commençant par ceux liés à l'amplitude, puis ceux de la forme dans le chapitre suivant.

La spécificité des équations sur l'amplitude réside dans la condensation qui n'est autre qu'une intégration pondérée. Pour la réaliser nous avons donc développé deux outils distincts. Le premier insère un flux dans la maille, c'est-à-dire dans les matrices de sections efficaces. Cet outil sert à intégrer la forme dans l'équation de l'amplitude et inversement pour l'équation sur la forme. Le second réalise l'intégration sur les sous domaines en fonction des bases éléments-finis choisies.

## 7.1 Techniques proposées

Tout d'abord, comme nous l'avons vu précédemment, les flux et leurs courants associés, la forme et l'amplitude sont développées dans des bases de Raviart-Thomas. D'où, l'idée pour effectuer la condensation consiste à exprimer la base grossière en fonction de celle fine.

### 7.1.1 Coefficients de condensation

Soient  $(b_i)_{1 \leq i \leq N}$  les fonctions de base définies sur le maillage fin et  $B_j$  une fonction de base définie sur le maillage grossier. Alors l'égalité

$$B_j(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} b_i(\vec{r}), \quad \forall \vec{r} \in \Omega \quad (7.1)$$

est exacte si l'ordre de la base grossière est inférieur ou égal à celui de la base fine et les maillages sont emboîtés. Pour cela, on définit les  $\beta_{ji}$  comme la valeur de la fonction grossière  $B_j$  évaluée au nœud fin  $\vec{n}_i$ , degré de liberté associé à la fonction fine  $b_i$  :

$$\beta_{ji} = B_j(\vec{n}_i) = B_j(b_i^{-1}(1)) . \quad (7.2)$$

On remarque tout de suite que les  $\beta_{ji}$  sont nuls si  $B_j$  et  $b_i$  ont des supports disjoints. On peut donc voir l'ensemble des  $\beta_{ji}$ , associés à une fonction  $B_j$  donnée, comme un vecteur dont la dimension est égale au nombre de nœuds fins inclus dans la maille grossière. Il y a bien entendu des  $\beta_{ji}$  liant les bases des flux mais il y a aussi leurs équivalents liant les bases des courants.

Comme dit précédemment, cette expression d'une base en fonction de l'autre n'est exacte que si les ordres de discrétisation sont compatibles (ordre fin supérieur ou égal à celui grossier). Mais dans la pratique, par définition des problèmes, la forme sera toujours d'ordre supérieur à l'amplitude. En effet, l'amplitude représente un facteur multiplicatif local dépendant fortement du temps mais faiblement de l'espace. Ainsi, une représentation d'ordre supérieur à celui de la forme et donc du flux reconstitué n'aurait pas de sens dans la modélisation. De plus, dans cette problématique locale, il paraît plus judicieux de conserver une représentation Raviart-Thomas d'ordre 0 pour l'amplitude. Cet ordre 0 est compatible avec l'idée d'une factorisation quasi-statique locale, c'est-à-dire une valeur unique de  $a$  par sous domaine.

### 7.1.2 Insertion de flux dans la maille

Avant de voir comment on utilise la formule (7.1) pour calculer les intégrales, voyons rapidement comment on intègre les flux (forme et poids) dans la maille. Pour la forme, le plus simple est de l'intégrer directement dans les données neutroniques. Ainsi, en entrée du processus d'assemblage du système associé à l'amplitude, au lieu de considérer des sections  $\Sigma^{gg'}$ , on aura des termes de la forme  $\Sigma^{gg'} f^g$ . Ce qui suppose bien sûr que l'on ait une structure contenant les sections pour chaque nœud du maillage fin. Ces valeurs sont des taux de réactions locaux.

Pour le poids, on pourrait réaliser la même opération mais il paraît plus approprié de faire la pondération en même temps que la condensation. Ainsi, dans la théorie, lorsque l'on intègre un flux de poids, on redéfinit simplement la base Raviart-Thomas grossière. On peut donc intégrer la pondération à la condensation dès la définition des équivalences de bases, c'est-à-dire des  $\beta_{ji}$  :

$$B_j(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} b_i(\vec{r}), \quad \forall \vec{r} \in \Omega \quad \text{avec} \quad \beta_{ji} = B_j(\vec{n}_i)\psi(\vec{n}_i). \quad (7.3)$$

Cette expression est exacte si le flux de poids a une représentation constante par maille, donc si  $\psi$  est défini dans une base Raviart-Thomas d'ordre 0 (RT0). Mais ce constat s'applique aussi à l'intégration de la forme dans les données. Ainsi, l'opération est simplifiée si l'on dispose d'une valeur moyenne unique sur la maille. À défaut on peut prendre la valeur moyenne du flux sur la maille si la représentation n'est pas RT0 mais là on effectue une approximation.

## 7.2 Formules obtenues et implémentées

Voyons donc comment, avec les propositions précédentes, on réalise effectivement la condensation. En fait, chaque terme est traité différemment, par exemple la source liée aux précurseurs :

$$\langle S_d \psi_0 \rangle_j = \int_{\Omega} S_d \psi_0 B_j^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \int_{\Omega} S_d \psi_0 b_i^{(0)} \vec{dr}. \quad (7.4)$$

On voit donc que l'on peut construire le système condensé à partir des termes du système fin. En particulier, si on ne pondère pas la condensation ( $\psi_0 = 1$ ), on retrouve dans l'égalité précédente les termes de source fins  $\int_{\Omega} S_i b_i^{(0)} \vec{dr}$ . Et comme on l'a dit dans la section précédente, lorsque la pondération est différente de 1, on l'intègre directement dans les  $\beta_{ji}$  à partir du moment où l'on dispose d'un flux de pondération moyenné sur chaque maille. D'où l'égalité :

$$\int_{\Omega} S_d B_j^{(0)} \psi_0 \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \int_{\Omega} S_d b_i^{(0)} \vec{dr} \quad (7.5)$$

et on cherche, comme dans ce cas le plus simple, à retrouver pour chaque condensation, une expression du terme grossier comme combinaison linéaire des termes fins. Ainsi, le processus de condensation pourra se faire en deux étapes :

1. assemblage du système fin ;

2. condensation de chaque terme du système linéaire ;  
sans réel surcoût en temps. On a juste une matrice de plus à stocker et c'est aux pas de temps où le système linéaire fabriqué est petit, d'où de l'espace mémoire libre.

### 7.2.1 Couplages pairs

Voyons maintenant les autres termes, tout d'abord, le taux de réaction de la forme :

$$\int_{\Omega} [\Sigma] f \psi_0^2 B_j^{(0)} B_{j'}^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \sum_{i'=1}^N \beta_{j'i'} \int_{\Omega} [\Sigma] f b_i^{(0)} b_{i'}^{(0)} \vec{dr}. \quad (7.6)$$

On constate bien alors que si l'on s'autorise à ne considérer que la forme moyennée par maille, on peut sortir le terme  $f$  de l'intégrale et ainsi retrouver comme voulu, les termes de la matrice fine  $\int_{\Omega} \Sigma b_i^{(0)} b_{i'}^{(0)} \vec{dr}$  multipliés par  $f$ , ce qu'on a appelé l'intégration du flux dans la maille. De plus, si on considère le cas particulier où les discrétisations Raviart-Thomas sont d'ordre 0, les flux sont constants par maille et les supports des fonctions de base sont disjoints. D'où dans ce cas  $RT_0$ , sachant que par hypothèse de modélisation, les données neutroniques sont constantes sur les mailles fines :

$$\int_{\Omega} [\Sigma] f \psi_0^2 B_j^{(0)} B_{j'}^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji}^2 f_i \int_{m_i} [\Sigma] \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji}^2 f_i [\Sigma]_i h_i \quad (7.7)$$

où  $f_i$  est la valeur de la forme sur la maille fine  $m_i$  et  $h_i$  est le volume de cette maille. Un point important pour ce calcul est que la matrice associée à ces termes est supposée diagonale dans MINOS. Cette hypothèse est bien vérifiée pour une matrice fine puisque les fonctions de base Raviart-Thomas sont définies orthogonales. Mais pour la matrice condensée, si c'est vérifiée dans le cas  $RT_0$  vu précédemment, cela ne l'est pas pour les ordres supérieurs. On a en effet un phénomène de remplissage à l'intérieur des mailles car l'égalité devenue

$$\int_{\Omega} [\Sigma] f \psi_0^2 B_j^{(0)} B_{j'}^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \beta_{j'i} f_i \int_{\Omega} [\Sigma] (b_i^{(0)})^2 \vec{dr} \quad (7.8)$$

ne peut être simplifiée. Ainsi, la matrice grossière est dans ce cas diagonale par bloc, où les blocs sont des termes de couplage entre les nœuds d'une même maille grossière. En effet, comme illustré sur la figure 7.1, la contribution d'un même nœud fin à droite et à gauche n'est pas forcément la même. Et, si sur l'ensemble de la maille grossière il y a symétrie des  $\beta_{ji}$ , il n'y a pas de symétrie pour  $f$  et  $\Sigma$ .

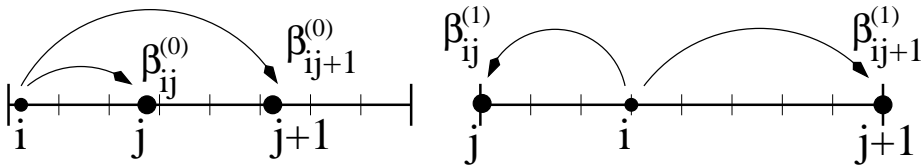


FIG. 7.1 – Illustration 1D du remplissage lié à la contribution des nœuds fins (flux et courant)

Ensuite, passons au terme de vitesse :

$$\int_{\Omega} V^{-1} f \psi_0^2 B_j^{(0)} B_{j'}^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \beta_{j'i} f_i \int_{\Omega} V^{-1} (b_i^{(0)})^2 \vec{dr} \quad (7.9)$$

où on a les mêmes observations que pour le taux de réaction précédent.

### 7.2.2 Couplages impairs

Le terme de diffusion avec les bases de courant :

$$\int_{\Omega} (Df)^{-1} B_{j_d}^{(1)} B_{j'_d}^{(1)} \vec{dr} = \sum_{i_t=1}^{N_t} \beta_{j_d i_t}^{(0)} \beta_{j'_d i_t}^{(0)} \sum_{i_d=1}^{M_d} \beta_{j_d i_d}^{(1)} \sum_{i'_d=1}^{M_d} \beta_{j'_d i'_d}^{(1)} \int_{\Omega} (Df)^{-1} b_{i_d}^{(1)} b_{i'_d}^{(1)} \left( b_{i_t}^{(0)} \right)^2 \vec{dr} \quad (7.10)$$

où  $d$  est la direction du courant considérée ( $x$ ,  $y$  ou  $z$ ) et  $t$  la direction transverse correspondante (respectivement  $yz$ ,  $zx$  ou  $xy$ ). On effectue donc une condensation 1D dans la direction considérée puis une condensation sur les directions transverses. La seconde est identique à celles présentées précédemment mais la première est plus complexe puisque associée aux nœuds de courants. Tout d'abord, il n'y a plus d'orthogonalité des fonctions de base. Ensuite, certains nœuds étant à la frontière de la maille, ils ont une double contribution, une à gauche et une à droite, avec la difficulté que la valeur  $(Df)$  est différente de chaque côté. Ce dernier point n'est pas gênant dans la phase de condensation puisqu'on retrouve bien dans l'égalité précédente les termes de la matrice fine :

$$\int_{\Omega} (Df)^{-1} b_{i_d}^{(1)} b_{i'_d}^{(1)} \left( b_{i_t}^{(0)} \right)^2 \vec{dr}$$

sans se soucier de quel côté ils sont. Il faut juste ne pas les prendre deux fois en compte. Le problème se situe au moment où on intègre la forme dans la maille. Il faut le faire dès l'assemblage. On ne peut pas se contenter de multiplier la matrice par le flux à cause des termes à double contribution.

Autre difficulté, les termes de la matrice au différence ne seront plus forcément normalisés :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial B_{j_d}^{(1,d)}}{\partial d} \psi_0 B_j^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \sum_{i_d=1}^{M_d} \beta_{j_d i_d}^{(1)} \sum_{i_t=1}^{N_t} \beta_{j_d i_t}^{(0)} \int_{\Omega} b_i^{(0)} \frac{\partial b_{i_d}^{(1)}}{\partial d} b_{i_t}^{(0)} \vec{dr}. \quad (7.11)$$

En effet, en plus du phénomène de remplissage, la présence d'un poids différent de 1 annule la propriété qui permettait d'obtenir une matrice dont les termes valaient 1 ou  $-1$ . Néanmoins, sans poids ( $\psi_0 = 1$ ) et avec une représentation  $RT_0$ , on a bien une matrice de termes normalisés. Dans les cas plus complexes, il faudra soit modifier le solveur pour qu'il accepte cette spécificité soit choisir une normalisation judicieuse des lignes de la matrice pour faire réapparaître les 1 et  $-1$ .

Finalement, il reste une remarque à faire sur la source issue de la divergence du courant de forme :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f \psi_0 B_j^{(0)} \vec{dr} = \sum_{i=1}^N \beta_{ji} \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_f b_i^{(0)} \vec{dr} \quad (7.12)$$

qui est donc traitée comme la source liée aux précurseurs. Le solveur MINOS stocke la fuite totale  $\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_\phi$  avec le flux  $\phi$  et il n'est donc pas nécessaire de l'évaluer avant la condensation. Ce stockage vient de la méthode de résolution qui calcule la divergence à chaque itération. Elle est donc stockée pour le bon fonctionnement et sa valeur physique.

### 7.2.3 Condensation des concentrations de précurseurs

Avant de conclure cette section sur la condensation spatiale, voyons rapidement comment elle est appliquée pour le traitement des précurseurs. Comme on l'a vu dans la théorie, pour les pas de temps d'amplitude, on n'a besoin que d'une concentration de précurseurs condensée solution de l'équation (6.21). On rappelle les choix : on peut calculer une concentration fine avec la forme intégrée dans la maille puis la condenser pour les besoins de l'assemblage. C'est entre autre utile pour calculer une source fine qu'il ne reste plus qu'à condenser pour l'intégrer au système linéaire. L'inconvénient est le surcoût de calcul et de stockage mémoire. L'autre possibilité est de traiter directement l'équation condensée puisqu'elle a la même forme que celle fine. Il faut juste adapter le solveur pour ce cas particulier. Les deux solutions ont été testées mais la seconde est plus pertinente en matière de performances et est donc privilégiée. Aucune différence n'a été constatée sur la précision mais pour les cas test avec une forte composante des précurseurs (cf. chapitre 9).

## 7.3 Aspects numériques de la condition de normalisation

Donc comme on l'a vu à plusieurs reprises dans le chapitre précédent, tout est plus facile si on a une représentation  $RT_0$  et que l'on n'effectue pas de pondération ( $\psi_0 = 1$ ). L'ordre 0 de la base peut, comme on l'a aussi dit, avoir un sens dans le cadre de la représentation que l'on souhaite pour l'amplitude (i.e. de la décomposition de domaine). Par contre, l'intégration d'une fonction de poids paraît nécessaire à étudier vu son rôle dans les modèles quasi-statiques décrits dans le chapitre 5. Le cas le plus simple, serait un poids  $RT_0$  sur le maillage grossier, par exemple le flux adjoint initial condensé. Ainsi, en divisant les lignes du système par  $\int_{\Omega_i} \phi_0^* \vec{dr}$ , on se débarrasserait de toutes les difficultés (matrice aux différences  $B$ , carré du poids, ...). Néanmoins, il s'avèrerait intéressant d'étudier un poids plus fin.

Du fait de la structure du code MINOS (matrice  $B$  non stockée, pré-conditionnement non intégré, ...), nous laissons ce problème ouvert. Dans la suite des travaux, et en particulier pour les applications numériques, nous n'utilisons pas de pondérations. Nous conservons donc le poids unitaire. La condition de normalisation à l'état initial est bien vérifiée si l'on démarre d'un système critique (section 1.4 :  $\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$ ). Nous laissons tout de même la piste ouverte pour une condensation dans notre programmation. En plus de la difficulté numérique, il faut intégrer qu'une approche quasi-statique locale et multigroupe nécessite une pondération plus sophistiquée que pour la méthode IQS ( $\psi_0 = \phi_0^*$ ). Pour cela, une pondération inspirée des travaux de [Bosio *et al.*, 2001] (cf. section 5.3, page 45) semble très intéressante, puisque développée dans cette optique. Ces travaux pourront faire l'objet d'une suite à cette thèse.

Finalement, plusieurs remarques nous amènent à constater qu'une limite de l'implémentation actuelle se situe dans les matrices aux différences. C'est le seul vrai frein à l'intégration d'un poids complexe, et dans une moindre mesure, une cause du remplissage des matrices lié aux ordres supérieurs de bases d'éléments finis.

## 7.4 Remarques globales sur le traitement de l'amplitude

Une première remarque concerne l'intégration de la forme dans la maille. Avec les suppositions de stationnarité (6.10), on insère la même forme au début et à la fin des pas de temps fins. Cependant, rien dans l'implémentation ne l'impose et si dans de futurs développements on envisageait que les termes (6.10) aient une évolution en temps moins constante, linéaire

IT	1	ERS	1.08744E-03	ERF	2.23678E-05	RN	3.94528E+00	TAUEX	2.23902e-08
IT	2	ERS	1.09461E-03	ERF	2.83454E-05	RN	3.94536E+00	TAUEX	1.26724
IT	3	ERS	1.10280E-03	ERF	2.75779E-05	RN	3.94543E+00	TAUEX	0.972923
IT	4	ERS	1.11223E-03	ERF	2.69227E-05	RN	3.94551E+00	TAUEX	0.976241
IT	5	ERS	1.12765E-03	ERF	2.62924E-05	RN	3.94558E+00	TAUEX	0.976588
IT	6	ERS	1.13641E-03	ERF	2.57225E-05	RN	3.94566E+00	TAUEX	0.978327
IT	7	ERS	1.14942E-03	ERF	2.52131E-05	RN	3.94573E+00	TAUEX	0.980195
IT	8	ERS	1.16580E-03	ERF	2.47742E-05	RN	3.94580E+00	TAUEX	0.982594
IT	9	ERS	1.18044E-03	ERF	2.43601E-05	RN	3.94587E+00	TAUEX	0.983284
IT	10	ERS	1.19504E-03	ERF	2.40299E-05	RN	3.94594E+00	TAUEX	0.986444
IT	11	ERS	1.20877E-03	ERF	2.36867E-05	RN	3.94601E+00	TAUEX	0.985718
IT	12	ERS	1.23066E-03	ERF	2.34598E-05	RN	3.94608E+00	TAUEX	0.990421
IT	13	ERS	1.24398E-03	ERF	2.32089E-05	RN	3.94615E+00	TAUEX	0.989304
IT	14	ERS	1.26166E-03	ERF	2.29695E-05	RN	3.94622E+00	TAUEX	0.989687
IT	15	ERS	1.28132E-03	ERF	2.28754E-05	RN	3.94628E+00	TAUEX	0.995901
IT	16	ERS	1.30015E-03	ERF	2.27576E-05	RN	3.94635E+00	TAUEX	0.994852
IT	17	ERS	1.32117E-03	ERF	2.27108E-05	RN	3.94642E+00	TAUEX	0.997943
IT	18	ERS	1.34218E-03	ERF	2.26928E-05	RN	3.94648E+00	TAUEX	0.999209
IT	19	ERS	1.36056E-03	ERF	2.26539E-05	RN	3.94655E+00	TAUEX	0.998286
IT	20	ERS	1.38338E-03	ERF	2.26635E-05	RN	3.94662E+00	TAUEX	1.00042
IT	21	ERS	1.40484E-03	ERF	2.26968E-05	RN	3.94668E+00	TAUEX	1.00147
IT	22	ERS	1.42715E-03	ERF	2.27643E-05	RN	3.94675E+00	TAUEX	1.00297
IT	23	ERS	1.45067E-03	ERF	2.28768E-05	RN	3.94681E+00	TAUEX	1.00495
IT	24	ERS	1.47481E-03	ERF	2.30002E-05	RN	3.94688E+00	TAUEX	1.00539
IT	25	ERS	1.50165E-03	ERF	2.31713E-05	RN	3.94694E+00	TAUEX	1.00744

FIG. 7.2 – Copie d'un listing de résolution d'un problème d'amplitude avec dans l'ordre, le numéro d'itération, les différents erreurs et le taux de convergence.

par exemple, l'implémentation en serait très simple. Par exemple, à la fin de chaque pas grossier (calcul de  $f(T_{i+1})$  dans l'algorithme 3), on vérifie la condition de normalisation. On verra dans les tests comment elle se comporte. Cependant, si elle venait à ne pas être suffisamment constante, on pourrait itérer, c'est-à-dire reprendre les pas de temps fins ( $t_k < T_{i+1}$ ) avec une nouvelle valeur de forme. Par contre, il faudra choisir comment on change la forme, par exemple l'interpolation linéaire de la forme de début et de la première estimation de la forme de fin. Cette option est intégrée à notre algorithme mais nous verrons dans les tests que cela n'a pas beaucoup d'intérêt en comparaison du surcoût en temps de calcul.

Une seconde remarque concerne la résolution du système linéaire (6.13) sur l'amplitude. Dans la pratique, la forme insérée dans la maille peut être très proche de 0, par exemple à l'approche du bord Dirichlet  $\Gamma_D$ . Il est difficile de le démontrer mathématiquement mais on peut craindre un mauvais conditionnement du système dans ce genre de cas. Les condensations résolvent en partie ce problème puisque regroupant les termes des matrices. Nous verrons que numériquement, la résolution du système (6.13) converge mais lentement. On suppose que cela est lié au conditionnement du système. Sur la figure 7.2, nous avons repris une copie de listing d'un test de notre méthode LQS avec le solveur MINOS. Ce sont les itérations du solveur pour l'amplitude, après un certain nombre de pas de temps, dans le cas test 3D (cf. chapitre 9).

En mettant un critère d'arrêt volontairement excessif, on voit que le solveur ne réussit

pas à converger en 25 itérations. De plus, le taux de convergence est très proche de 1 et finit même par être supérieur à 1. En pratique cela implique une sur-convergence qui peut créer une légère erreur pour  $a$ . Ainsi, en plus d'une convergence difficile, une résolution non-contrôlée de l'amplitude peut introduire de petites erreurs s'accumulant dans le temps de façon exponentielle, du fait du système parabolique. Par conséquent, nous limitons volontairement le nombre d'itérations pour ces résolutions d'amplitude. En pratique, du fait de la finesse des pas de temps associés à  $a$ , une seule itération du solveur suffit. C'est une précaution qui, en plus de rendre la méthode plus robuste, permet de gagner du temps de calcul sans perte significative de précision. Nous le reverrons dans les tests.

## Chapitre 8

# Implémentation étape par étape pour le traitement du flux de forme

*Dans ce chapitre, nous détaillons les éléments d'intégration du problème sur la forme dans l'algorithme. De la même façon, nous abordons les détails des opérateurs de changement d'échelle en temps et en espace. Un élément important est l'utilisation de l'information grossière fournie par l'amplitude pour le cadre fin en espace de la forme. En particulier, l'amplitude, simplement interpolée selon son modèle de représentation, introduit des discontinuités fortes dans la forme. Pour résoudre cette difficulté, nous discutons de choix numériques et nous introduisons un nouvel élément théorique. Ainsi, nous faisons une utilisation judicieuse de la théorie sur les coefficients de discontinuités intégrée au solveur MINOS. Nous en démontrons l'intérêt numérique par des résultats 1D obtenus avec notre code, l'intérêt théorique apparaissant simplement en détaillant les équations. Finalement, comme pour l'amplitude, nous détaillons les innovations numériques apportées au code pour l'intégration de notre méthode dans MINOS.*



Pour la forme, on effectue aussi une condensation, en temps celle-ci. Le fait que ce soit à une dimension et sans pondération rend les calculs plus faciles. Et pour la contribution de l'amplitude, il suffit d'utiliser le développement (6.7) pour interpoler  $a$  et l'insérer dans la maille de la même façon que pour la forme. Néanmoins, cette opération introduit des discontinuités dont nous devons tenir compte.

## 8.1 Technique pour l'intégration en temps

Pour simplifier le stockage et l'assemblage de la matrice, on cherche comme précédemment une formule liant le système condensé et l'ensemble des systèmes fins. En particulier, l'intégrale grossière en temps peut se décomposer en une somme des intégrales fines. Et pour permettre tout cela, on peut supposer que les fonctions de base du  $\theta$ -schéma grossier  $\omega_r$  sont constantes par intervalle de temps fins  $\Delta t_k$ . En fait on les approxime par leur valeur au milieu de l'intervalle, ainsi les termes principaux de l'équation (6.19) deviennent :

$$\begin{aligned} [\Sigma a]^r &= \frac{1}{\theta \delta T_i} V^{-1} a(T_r) + \frac{(-1)^{r-i+1}}{\theta \delta T_i} \sum_{\Delta t_k \subset \Delta T_i} \left[ \int_{\Delta t_k} [\Sigma] a \omega_r dt + [\chi_d] e^{-\lambda \delta T_i} d_r(t_k) \right] \\ &= \frac{1}{\theta \delta T_i} V^{-1} a(T_r) \\ &\quad + \frac{(-1)^{r-i+1}}{\theta \delta T_i} \sum_{\Delta t_k \subset \Delta T_i} \omega_r(\Delta t_k) \left[ \sum_{p=k}^{k+1} \sum_{q=k}^{k+1} [a_{pq}[\Sigma]](t_p) a(t_q) + e_{ik} [\chi_d] [\beta] \nu \Sigma_f(t_p) a(t_q) \right] \end{aligned}$$

où  $\omega_r(\Delta t_k) = \omega_r((t_k + t_{k+1})/2)$  et  $e_{ik} = e^{-\lambda(T_{i+1}-t_{k+1})}$ . On retrouve donc une expression de la matrice grossière en temps en fonction des termes de la matrice fine. Néanmoins, du fait de l'exponentielle  $e^{-\lambda(T_{i+1}-t_{k+1})}$ , on ne peut réellement exprimer l'une en fonction de l'autre. Sans précurseur et donc sans ce terme, on pourrait éventuellement appliquer cette formule. Dans la pratique, une méthode de calcul plus directe serait coûteux en temps de calcul et stockage mémoire.

Comme l'évolution des sections  $[\Sigma]$  est linéaire et celle de l'amplitude étudiée sur des pas de temps fins, on propose une autre approche pour ce calcul. L'idée est de reprendre le système (6.5) et de lui appliquer un schéma en temps grossier comme dans la méthode de référence décrite section 3.5. Pour tenir compte de l'amplitude, on ne supposera plus que les sections  $[\Sigma]$  sont linéaires mais que c'est le produit  $[\Sigma]a$  qui évolue linéairement dans le temps :

$$[\Sigma](t)a(t) = ([\Sigma]a)(t) = [\Sigma](T_i)a(T_i)l_i(t) + [\Sigma](T_{i+1})a(T_{i+1})l_{i+1}(t), \quad (8.1)$$

avec

$$l_i(t) = \frac{T_{i+1} - t}{T_{i+1} - T_i} \quad \text{et} \quad l_{i+1}(t) = \frac{t - T_k}{T_{i+1} - T_i}.$$

Ainsi, les termes des équations (6.19) deviennent :

$$\begin{aligned}
[\Sigma a]^q &= \frac{1}{\theta \delta T_i} V^{-1} + (-1)^{q-i+1} \sum_{p=i}^{i+1} \left( \frac{a_{pq}}{\theta \delta T_i} [\Sigma](T_p) a(T_p) + \frac{b_{pq}}{\theta \delta T_i} [\chi_d][\beta \nu \Sigma_f] a(T_p)(T_p) \right), \\
a_{pq} &= \int_{\Delta T_i} l_p(t) \omega_q(t) dt, \quad b_{pq} = e^{-\lambda \delta T_i} \int_{\Delta T_i} e^{-\lambda(T_i-t)} l_p(t) \omega_q(t) dt, \\
[aD]^q &= (-1)^{q-i} \sum_{p=i}^{i+1} \frac{a_{pq}}{\theta \delta T_i} (a(T_p) D(T_p))^{-1}.
\end{aligned} \tag{8.2}$$

Cette représentation en temps est une approximation certes, mais limitée du fait des arguments précédents. De plus, une discrétisation en temps trop précise pour la forme serait peu cohérente avec les hypothèses pour le calcul d'amplitude et la condition de normalisation. Il en est de même pour le flux reconstruit qui serait décrit finement en temps selon ces deux composantes,  $a$  et  $f$ . Rappelons que l'on privilégie un  $\theta$ -schéma implicite pour la forme ( $\theta = 1$ ). Ce dernier étant plus stable, il est le plus adapté pour des pas de temps grossiers.

## 8.2 Technique pour l'interpolation de l'amplitude

Ensuite, pour ces calculs, il nous faut une expression fine en espace de l'amplitude. On utilise donc la formule (6.7). Il nous faut une valeur moyennée de  $a$  sur chaque maille fine pour la sortir des intégrales en espace. Pour cela, il faut exprimer  $a$  dans une base fine  $(b_i)_{i=1,\dots,N}$  suivant l'équivalence (7.1) :

$$a(\vec{r}) = \sum_{j=1}^M a_j B_j(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \beta_{ji} a_j b_i(\vec{r}) \tag{8.3}$$

où  $a_j$  est une valeur sur le maillage grossier. Ainsi, la valeur de  $a$  sur la maille fine  $i$  est

$$a_i = \sum_{j=1}^M \beta_{ji} a_j \tag{8.4}$$

Ensuite, on interpole le courant  $\vec{p}_a$  dans chaque direction :

$$\vec{p}_a = \begin{pmatrix} p_{a,x} \\ p_{a,y} \\ p_{a,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j_x=1}^{M_x} p_{a,x,j_x} B_{j_x}^{(1)} \\ \sum_{j_y=1}^{M_y} p_{a,y,j_y} B_{j_y}^{(1)} \\ \sum_{j_z=1}^{M_z} p_{a,z,j_z} B_{j_z}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j_x=1}^{M_x} \sum_{i_x=1}^{m_x} \beta_{j_x i_x}^{(1)} p_{a,x,j_x} b_{i_x}^{(1)} \\ \sum_{j_y=1}^{M_y} \sum_{i_y=1}^{m_y} \beta_{j_y i_y}^{(1)} p_{a,y,j_y} b_{i_y}^{(1)} \\ \sum_{j_z=1}^{M_z} \sum_{i_z=1}^{m_z} \beta_{j_z i_z}^{(1)} p_{a,z,j_z} b_{i_z}^{(1)} \end{pmatrix}, \tag{8.5}$$

et donc :

$$p_{a,d,i_d} = \sum_{j_d=1}^{M_d} \beta_{j_d i_d}^{(1)} p_{a,d,j_d}, \tag{8.6}$$

suivant la définition (6.7). Il faut en plus différencier l'interpolation dans la direction de la composante considérée et dans les directions transverses. Néanmoins, nous allons voir que l'information impaire associée au courant était délicate à intégrer dans le système fin. C'est pourquoi, en pratique, nous n'aurons pas besoin de la formule (8.6).

### 8.3 Source de divergence

Si l'on n'utilise qu'une partie de l'information d'amplitude pour les matrices de la forme, on en utilise plus pour la source de divergence. Comme on l'a vu, on utilise la formule suivante en temps :

$$\int_{\Delta T_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a dt = \sum_{\Delta t_k \subset \Delta T_i} \delta t_k ((1 - \theta) \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a(t_k) + \theta \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a(t_{k+1})). \quad (8.7)$$

Dans ce cas, il n'y a aucune difficulté numérique.

Mais on distingue aussi le traitement de cette source par son interpolation en espace. Les tests ont montré une forte sensibilité de la méthode aux données impaires, i.e. celles associées au courant. En fait, la remontée d'information du courant d'amplitude grossier donne des résultats peu concluants. Pour cette raison, on ne réinitialise pas le produit (6.1) après chaque pas de temps grossier. Pour la même raison, la précision des résultats est sensible au traitement de la source de divergence du courant d'amplitude.

Plusieurs formules sont possibles pour exprimer finement la divergence du courant d'amplitude. En premier, on peut l'estimer suivant la formule impaire (8.6) :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a b_i^{(0)} \vec{dr} &= \sum_{d=x,y,z} \sum_{j_d=1}^{M_d} p_{a,d,j_d} \int_{\Omega} \frac{\partial B_{j_d}^{(1)}}{\partial d} b_i^{(0)} \vec{dr} \\ &= \sum_{d=x,y,z} \sum_{i_d=1}^{m_d} \left( \sum_{j_d=1}^{M_d} \beta_{j_d i_d}^{(1)} p_{a,d,j_d} \right) \int_{\Omega} \frac{\partial b_{i_d}^{(1)}}{\partial d} b_i^{(0)} \vec{dr} \\ &= \sum_{d=x,y,z} \sum_{i_d=1}^{m_d} p_{a,d,i_d} \int_{\Omega} \frac{\partial b_{i_d}^{(1)}}{\partial d} b_i^{(0)} \vec{dr}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Comme la divergence est calculée et stockée par le solveur, on peut aussi directement appliquer la formule pair :

$$(\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)_i = \sum_{j=1}^M \beta_{ji} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)_j \quad (8.9)$$

Les deux formules précédentes devraient donner le même résultat. C'est-à-dire que dans le cas  $RT_0$  par exemple, la divergence est constante par maille grossière, même en représentation fine. Ainsi, pour mieux remonter l'information, on peut effectuer une interpolation linéaire. Dans ce cas, chaque terme fin est une combinaison linéaire des valeurs grossières les plus proches. Par exemple en 1D pour le cas  $RT_0$ , on aboutit à la formule :

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)(x_i) &= \frac{x_i - X_{j-1}}{X_j - X_{j-1}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)(X_{j-1}) + \frac{X_j - x_i}{X_j - X_{j+1}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)(X_j) \quad \text{si } x_i < X_j, \\ &= \frac{x_i - X_j}{X_{j+1} - X_j} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)(X_j) + \frac{X_{j+1} - x_i}{X_{j+1} - X_j} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_a)(X_{j+1}) \quad \text{si } x_i > X_j, \end{aligned} \quad (8.10)$$

où  $x_i$  et  $X_j$  sont, respectivement, l'abscisse du  $i$ -ème nœud fin et l'abscisse du  $j$ -ème nœud grossier. Dans certains cas grossiers (très peu de sous domaines), l'interpolation standard donne de bons résultats. Néanmoins, c'est cette dernière solution que nous privilégierons dans nos tests numériques. Elle s'avère plus efficace dans la majorité des cas.

## 8.4 Coefficients de discontinuité

Cette section est subdivisée en trois parties. Tout d'abord, nous exposons la théorie des coefficients de discontinuité que nous utilisons pour améliorer le traitement de l'amplitude. Ensuite, nous illustrons le gain de cette amélioration sur un cas numérique simple.

### 8.4.1 Condition de raccordement

Donc le flux de forme est discrétisé par une méthode aux éléments finis. Lorsque nous écrivons la formulation variationnelle mixte duale, nous appliquons la formule de Green sur la loi de Fick. Le flux n'étant pas continu a priori ( $f \in L^2(\Omega)$ ), la formule s'applique sur chaque maille  $m_i$  de la discrétisation fine :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (aD)^{-1} \vec{p}_f \cdot \vec{q} \, d\vec{r} + \int_{\Omega} \vec{\nabla} f \cdot \vec{q} \, d\vec{r} &= \sum_{m_i \subset \Omega} \int_{m_i} (aD)^{-1} \vec{p}_f \cdot \vec{q} \, d\vec{r} - \int_{m_i} f \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \, d\vec{r} \\ &+ \sum_{m_i \subset \Omega} \int_{\partial m_i} f \vec{q} \cdot \vec{n}_{|m_i} \, ds = 0, \end{aligned} \quad (8.11)$$

( $\cup m_i = \Omega$ ). Dans un premier temps, nous supposons que les termes de bord s'annulent sur les interfaces internes entre mailles ( $\partial m_i$ ). C'est une supposition vérifiée et utilisée dans MINOS pour le flux  $\phi$ , puisque l'on veut un flux continu à la convergence :

$$\int_{\partial m_i \cap \partial m_j} \phi \vec{q} \cdot \vec{n}_{|m_i} \, ds + \int_{\partial m_i \cap \partial m_j} \phi \vec{q} \cdot \vec{n}_{|m_j} \, ds = 0, \quad (8.12)$$

( $\vec{n}_{|m_i} = -\vec{n}_{|m_j}$ ). Cette continuité est liée à la modélisation. Cependant, l'hypothèse précédente ne peut être faite pour le flux de forme  $f$ . En effet, l'amplitude est discontinue par sa représentation grossière (Raviart-Thomas). Pour avoir un flux reconstruit ( $\phi = af$ ) continu, la forme doit compenser ces discontinuités sur le bord des sous domaines (les mailles grossières  $\partial \Omega_i$ ) :

$$\phi_{|\Omega_i} = a_{|\Omega_i} f_{|\Omega_i} = a_{|\Omega_j} f_{|\Omega_j} = \phi_{|\Omega_j} \quad (8.13)$$

sur  $\partial \Omega_i \cap \partial \Omega_j$ .

Ainsi, pour corriger ceci et introduire une condition de raccordement, nous prenons inspiration de la théorie des coefficients de discontinuité telle qu'elle est implémentée dans MINOS ([Baudron et Lautard, 2007]). Dans cette approche, on détermine des coefficients normalisés  $\gamma_{m_i}$  tels que

$$\gamma_{m_i} \phi_{|m_i} = \gamma_{m_j} \phi_{|m_j} \text{ sur } \partial m_i \cap \partial m_j \quad (8.14)$$

quand  $m_i$  et  $m_j$  sont des mailles adjacentes. On peut prouver que la formulation variationnelle du problème (6.14), où on remplace les fonctions test  $\vec{q}$  par un  $\gamma_{m_i} \vec{q}$  normalisé, a une solution unique qui vérifie les conditions de raccordement (8.13). Nous reformulons donc la formulation faible (8.11) de sorte que les termes de bord s'annulent, du fait de ces conditions :

$$\sum_{m_i \subset \Omega} \int_{m_i} D^{-1} \vec{p}_f \cdot \vec{q} \, d\vec{r} - \int_{m_i} a f \vec{\nabla} \cdot \vec{q} \, d\vec{r} + \int_{\partial m_i \cap \partial \Omega} a f \vec{q} \cdot \vec{n} \, ds = 0. \quad (8.15)$$

L'intégration dans le code de ces formules est plus compliquée que la simple utilisation de l'implémentation des coefficients de discontinuité de MINOS. En effet, dans notre cas et contrairement à la théorie implémentée, nos coefficients de raccordement  $\gamma_{m_i} = a_{|m_i}$  dépendent du temps. Si on reprend l'intégration en temps de la seconde équation du système (6.19), et avec les définitions (8.2), on obtient :

$$[D^{i+1}] \vec{p}_f(T_{i+1}) + [a^{i+1}] \vec{\nabla} f(T_{i+1}) = -\frac{1-\theta}{\theta} [a^i] \vec{\nabla} f(T_i) + [D^i] \vec{p}_f(T_i), \quad (8.16)$$

où :

$$[D^q] = (-1)^{q-i} \sum_{p=i}^{i+1} \frac{a_{pq}}{\theta \delta T_i} D^{-1}(T_p), \quad [a^q] = (-1)^{q-i} \sum_{p=i}^{i+1} \frac{\tilde{a}_{pq}}{\theta \delta T_i} a(T_p),$$

avec les notations de la section 3.5. Ensuite, nous avons mis au point une programmation judicieuse pour intégrer ces coefficients différents au début et à la fin du pas de temps.

### 8.4.2 Illustration du gain

Pour montrer l'intérêt des conditions de raccordement, nous considérons le cas test le plus simple (1D homogène). La figure 8.1 montre l'efficacité réelle de cette option. On voit que, sans raccordement, une erreur s'accumule sur le bord des sous domaines. On constate

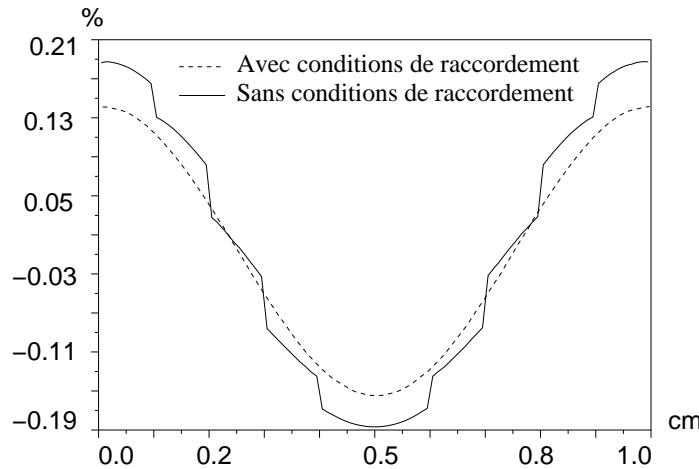


FIG. 8.1 – Erreur relative finale (%) sur le flux obtenu avec la méthode LQS (10 mailles grossières pour 100 fines en temps et espace) en comparaison des résultats référence MINOS pour le cas test 1D homogène.

que l'erreur, issue de l'approximation numérique, est suffisante pour créer des discontinuités qui croient durant l'évolution. Ceci induit des interférences exponentielles sur le bord des sous domaines. Ainsi, cette rectification est nécessaire pour stabiliser notre méthode LQS.

## 8.5 Algorithme global

Pour en conclure sur l'implémentation, on peut décrire certains éléments propre à l'ensemble de l'algorithme, tels le stockage, le temps de calcul a priori.

### 8.5.1 Performances a priori

Que ce soit en espace mémoire ou en temps de calcul, on voit que l'élément déterminant de cette méthode et de son implémentation réside dans l'assemblage des matrices. Puisque l'on traite plusieurs problèmes en parallèle, on doit stocker autant de matrices. De plus, pour effectuer l'assemblage, on construit plusieurs structures intermédiaires comme, par exemple, les matrices avec un flux intégré dans la maille. Tout ceci implique donc une certaine vigilance dans la gestion de la mémoire. Par exemple, pour ne pas stocker des éléments propres aux pas de temps fins déjà parcourus, on effectue l'assemblage du pas de temps grossier au fur et à mesure que l'on dispose des informations fines.

De la même manière, toutes ces manipulations vectorielles peuvent s'avérer pénalisantes en temps de calcul. Pour l'amplitude, on rend le problème grossier, et donc l'inversion du système est rapide, mais c'est l'assemblage qui peut demander du temps. Ainsi, intuitivement, on voit que si les données cinétiques évoluent peu dans le temps, la méthode aura une limite. En effet, l'initialisation à chaque pas de temps sera proche de la solution et il faudra peu d'itérations du solveur. Ainsi, le coût en temps de calcul sera en partie concentré sur les assemblages, là où notre méthode est la plus coûteuse. Néanmoins, dans des situations de grands changements du cœur, par exemple les accidents, la résolution du système redeviendra centrale et notre méthode s'avèrera bien plus performante. Il se trouve que ces derniers cas sont ceux qui intéressent le plus les utilisateurs d'outils comme celui-ci.

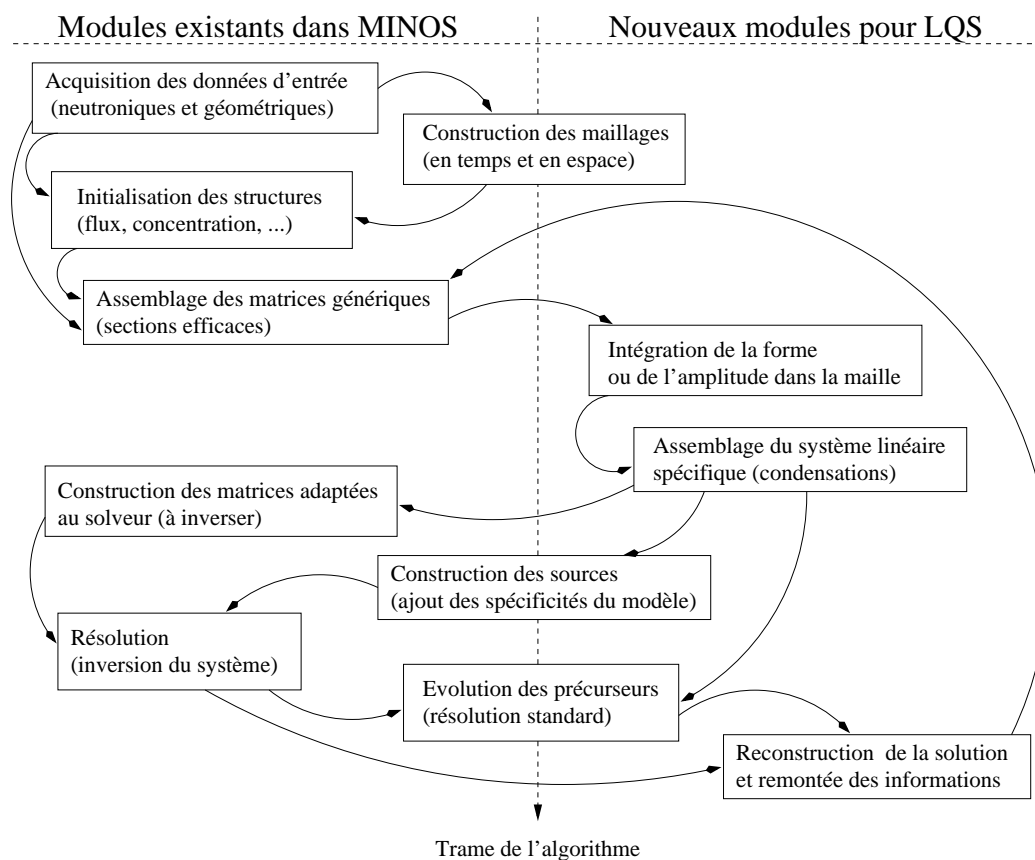


FIG. 8.2 – Représentation schématique des nouveautés apportées par l'implémentation de la méthode LQS et de leurs interactions avec les éléments existants du solveur MINOS

### 8.5.2 Perspectives de l'implémentation

L'implémentation de la méthode et de ces techniques a été réalisée dans DESCARTES/APOLLO3. Cependant divers améliorations sont envisageables. Tout d'abord, il serait intéressant d'étudier la parralélisation du code puisque comme nous l'avons vu, les assemblages sont aisément parallélisables, en particulier la condensation. Autre optimisation envisagée, réécrire certains parties de l'algorithme qui sont actuellement faites avec des outils MINOS pour les rendre plus spécifiques à la méthode LQS. Par exemple, pour l'assemblage, actuellement, on assemble un système avec l'assembleur MINOS puis on déduit les matrices du LQS avec des condensations et des combinaisons linéaires. Il pourrait être plus performant d'effectuer ces opérations en une seule étape.

Finalement, d'un point de vue plus théorique, on exploite au mieux les possibilités du solveur MINOS, comme par exemple les coefficients de discontinuité ou le rebalancing. D'un côté, il ne faut pas que la méthode LQS soit trop corrélée à MINOS. Et d'un autre côté, il faut exploiter au mieux les performances de ce solveur. Ce travail pourra alors servir plus tard s'il on désire porter la méthode LQS dans un autre environnement et avec un autre solveur.

## Chapitre 9

# Résultats et analyses de validation de la méthode LQS sur différents cas test

*Du fait de la complexité du problème, du grand nombre de composants formant notre approche, nous détaillons la validation du modèle en plusieurs étapes. Pour cela, nous utilisons trois cas test différents. Le premier cas est à une dimension. Il permet d'évaluer l'impact de l'alternance des problèmes dans le temps. Ainsi, on en déduit plusieurs éléments sur le traitement des éléments de réglage en temps. Le deuxième cas est un benchmark à deux dimensions issu de la littérature. Plus complexe, c'est un cas concret tel qu'un futur utilisateur pourrait étudier. Permettant des représentations graphiques de l'ensemble du flux, il nous permet, en particulier, d'étudier l'impact spatial de la méthode. Le niveau de condensation du maillage grossier, les coefficients de discontinuité ou l'importance donnée au courant d'amplitude sont discutés sur ce cas précis. Le dernier test est effectué sur un benchmark à trois dimensions, encore plus complexe dans ces données, et identique à une application industrielle du code. C'est avec ce cas que l'on peut réellement conclure sur les performances de notre méthode, sur une longue évolution et avec des paramètres méthode variés. En particulier, on expose des résultats très performants.*



Maintenant que l'on a développé une méthode sur le plan théorique, il reste à la valider par des tests numériques. Voyons en détail en quoi ils consistent et leurs résultats. Nous les prenons dans l'ordre de complexité.

## 9.1 Tests à 1 dimension

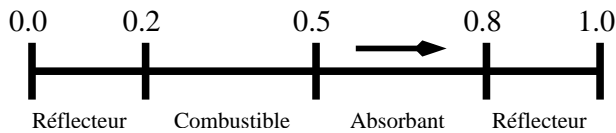
Ces premiers tests se limitent à un modèle de cœur 1D. L'intérêt de ce cas simplifié est de pouvoir effectuer les derniers réglages de la méthode. Ensuite, on a pu plus facilement repérer les difficultés pour mieux les anticiper dans le développement du code final.

### 9.1.1 Présentation du cas test

Les résultats suivants n'ont pas été obtenus avec notre code final mais avec une maquette réalisée sous Scilab ([INRIA, 2008]). À cet effet, une version simplifiée du solveur MINOS a été implémentée dans ce même environnement. Les données utilisées sont résumées dans le tableau 9.1.

TAB. 9.1 – Données neutroniques 1D à deux groupes d'énergie et un de précurseurs.

Données	Réflecteur		Absorbant		Combustible	
	Groupe 1	Groupe 2	Groupe 1	Groupe 2	Groupe 1	Groupe 2
$D$	1.634227	0.264002	1.423913	0.356306	1.425611	0.350574
$\sigma_t$	0.2039700	1.2626167	0.2340967	0.9355255	0.2338179	0.9508216
$\nu\sigma_f$	0.0	0.0	0.0064777	0.1127328	0.0075033	0.1378004
$\sigma_s^{12}$	0.02759693		0.01755550		0.01717768	



Constantes	Groupe 1	Groupe 2
$V$	$1.25 * 10^7$	$2.5 * 10^5$
$\chi_p$	1.0	0.0
$\chi_d$	1.0	0.0
$\beta$	0.0075	
$\lambda$	0.0800	

Ce cas 1D est une représentation axial de 200cm d'un cœur de réacteur critique. Les valeurs numériques choisies sont dérivées d'un benchmark TWIGL et ajustées pour garantir la criticité ([Aboanber et Nahla, 2005]). Cette représentation n'intègre que trois milieux : réflecteur, combustible et absorbant ; répartis sur le segment axial du cœur. Pour l'évolution, on simulera l'éjection d'une barre de contrôle : quelques instants après le début de la simulation, tout l'absorbant disparaît, ne laissant que le combustible. L'éjection dure  $T = 1ms$ .

### 9.1.2 Résultats numériques

Ce développement SCILAB se voulant simple, les résultats se limitent à une première validation du schéma. Tout d'abord, nous observerons une cohérence du modèle dans le cas stationnaire puis nous comparerons les résultats aux calculs de référence.

**Cas stationnaire :** cette expérience consiste à faire tourner le code sans modifier les données : les compositions restent inchangées. Théoriquement, puisque la simulation est

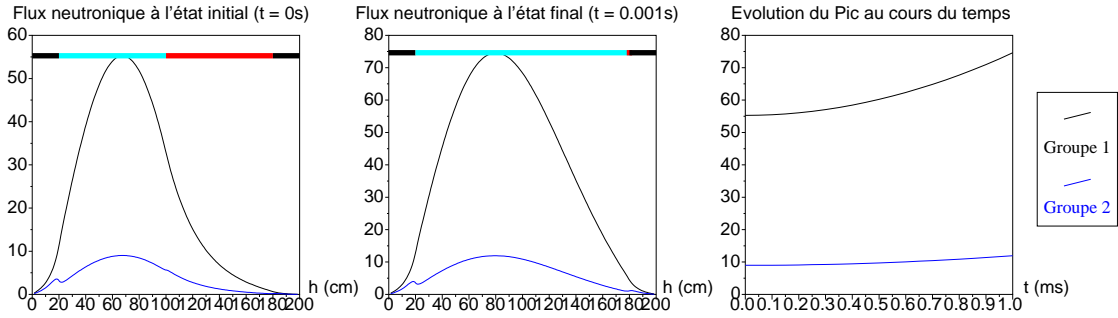


FIG. 9.1 – Simulation de l'éjection effectuée avec le code CRONOS2 : résultats de référence.

initialisée par un état stationnaire critique :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial a}{\partial t} f + a \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad \text{et} \quad \begin{cases} a(\vec{r}, 0) = 1 \\ f(\vec{r}, 0) = \phi(\vec{r}, 0) > 0 \end{cases} \quad \forall \vec{r} \in \Omega$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial a}{\partial t}(\vec{r}, 0) = \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{r}, 0) = 0. \quad (9.1)$$

On en déduit donc que les flux doivent rester constants pendant la simulation. Les résultats de la figure 9.2 ont été obtenus pour deux sous domaines grossiers pour l'amplitude. Les pas de temps étant  $\delta T = 0.001/8$  et  $\delta t = 0.001/40$  avec donc un ratio de 5 fins pour 1 grossiers. Et il n'y a pas de fonction de pondération dans la condensation. On observe bien une stabilité du flux excepté un petit pic au début mais qui reste inférieur à  $6 \cdot 10^{-4}$ . On est donc de l'ordre de l'erreur machine en simple précision.

**Validation de l'enchaînement :** on simule donc l'éjection présentée précédemment avec la méthode pour deux sous domaines. Les résultats apparaissent sur la figure 9.2. On observe

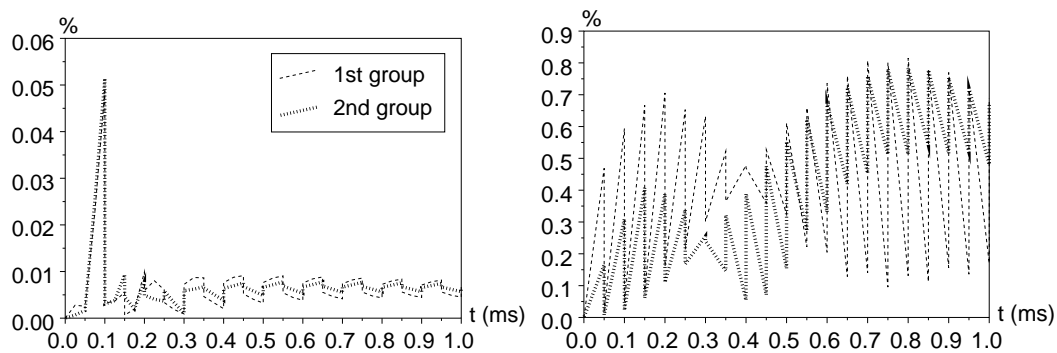


FIG. 9.2 – Erreur sur le pic de flux pour une simulation statique (à gauche) et une éjection de barre (à droite) effectuée avec le schéma quasi-statique local à deux sous domaines.

tout d'abord des résultats satisfaisants pour le pic avec une erreur restant inférieur au pourcent. Ensuite, on voit qu'à chaque pas de temps grossier, le calcul de forme recadre les résultats, ce sont les oscillations visibles sur la figure. On peut donc supposer qu'une

erreur est induite par le calcul d'amplitude mais qu'elle est ensuite corrigée par le calcul de forme. Pour ce qui est du temps, notre schéma, bien que non optimisé, est aussi rapide que le schéma de référence (que l'on a transposé et simplifié sous Scilab) pour le double de pas de temps. En effet les deux codes effectuent la même simulation en des temps équivalents mais pour des discrétisations différentes :

- quasi-statique généralisé : 40 pas de temps fins et 8 grossiers ;
- cinétique de référence : 20 pas de temps.

Derniers points lors de ces tests, le schéma devenait plus instable pour plus de deux sous domaines. En effet, on observe une erreur parasite apparaître lorsque le mouvement traverse une frontière entre sous domaines, cette erreur s'amplifiant dans le système condensé. Le cas à seulement deux sous domaines évite ce problème puisque le mouvement reste dans le sous domaine supérieur ( $\Omega_i = [100, 200]$ ). Il faut noter que dans cette maquette les coefficients de discontinuité n'étaient pas pris en compte pour la résolution.

## 9.2 Tests en 2 dimensions

Dans une simulation 2D, on peut représenter l'ensemble du flux plus facilement et ainsi mieux observer la représentation spatiale. À partir de là, l'ensemble des résultats sont obtenus avec le code final disposant de toutes les options présentées dans le chapitre précédent.

### 9.2.1 Présentation du cas test

Nous considérons une géométrie carrée de  $160\text{cm}$  de côté. Nous différencions trois compositions disposées comme sur la figure 9.3. Les données neutroniques associées sont résumées dans le tableau 9.2 ([Aboanber et Nahla, 2005]). C'est donc une représentation à deux

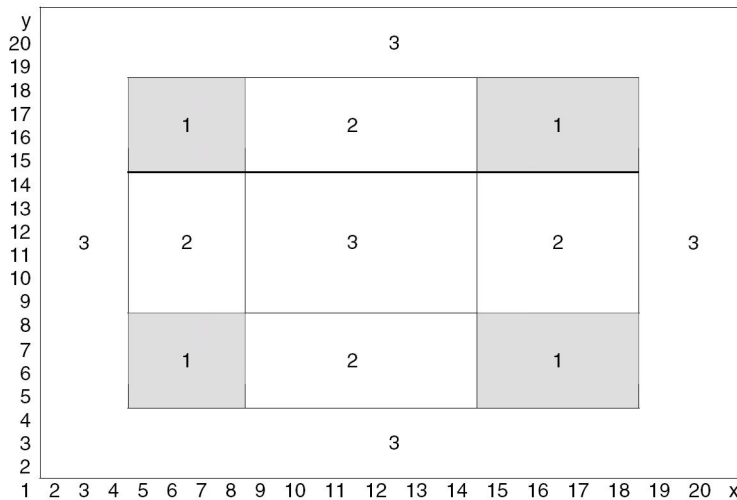


FIG. 9.3 – Disposition des assemblages de combustibles pour le cœur du benchmark 2D (1-Barre de contrôle, 2-Combustible, 3-Couverture).

groupes d'énergie et un groupe de précurseur. Le flux initial est représenté sur la figure 9.4. Ce flux est critique. La simulation consiste à diminuer l'absorption  $\Sigma_a$  de  $0.0035\text{cm}^{-1}$  dans le groupe 2 pour les barres en bas à gauche et en haut à droite. Ceci provoque instantanément une augmentation du flux. La symétrie de la représentation initiale est brisée du fait de la

perturbation non-symétrique. On peut voir ce cas comme l'observation d'une coupe transverse de cœur pendant l'éjection d'une barre de contrôle. La simulation dure 0.2s. Le pic du flux (le maximum) final a augmenté de près de 50% par rapport à l'état initial.

TAB. 9.2 – Données neutroniques pour le cœur du benchmark 2D.

Propriétés des matériaux	Combustible et couverture		Barre de contrôle	
	Groupe 1	Groupe 2	Groupe 1	Groupe 2
$D$ (cm)	1.4	0.4	1.3	0.5
$\Sigma_a$ (cm <sup>-1</sup> )	0.01	0.15	0.008	0.05
$\nu$	2.1877	2.1877	2.1877	2.1877
$\Sigma_f$ (cm <sup>-1</sup> )	0.0035	0.1	0.0015	0.03
$\Sigma_s^{j \rightarrow j+1}$ (cm <sup>-1</sup> )	0.01	0.0	0.01	0.0
$V$ (cm.s <sup>-1</sup> )	$1.0 * 10^7$	$2.0 * 10^5$	$1.0 * 10^7$	$2.0 * 10^5$
$\chi_p$	1.0	0.0	1.0	0.0
Précurseurs	$\chi_d^1$	$\chi_d^2$	$\lambda$ (s <sup>-1</sup> )	$\beta$
	1.0	0.0	0.08	0.0075

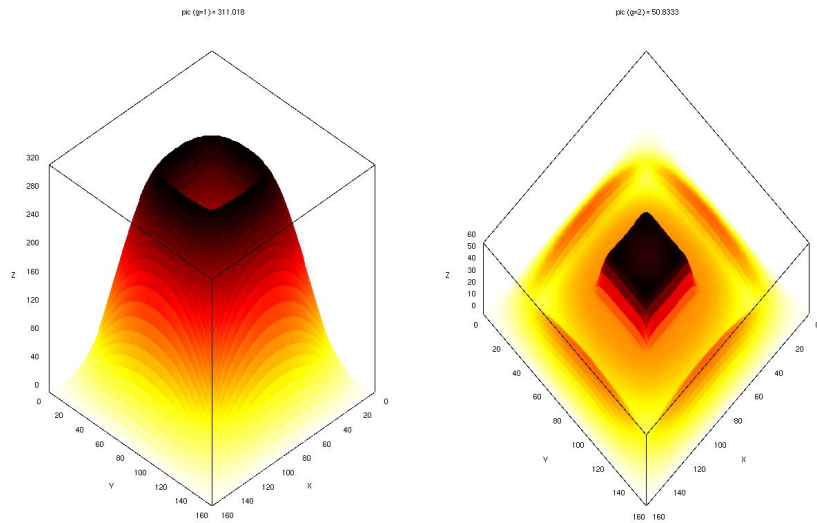


FIG. 9.4 – Répartition flux de neutrons 2D pour les deux groupes d'énergie à l'état initial.

## 9.2.2 Résultats numériques

Pour étudier ce cas, nous utilisons le solveur MINOS comme référence. Nous passons un cas avec un pas en temps très petit de 0.1ms (2000 pas). Ce sont les valeurs issues de ce calcul qui nous servent ensuite pour évaluer l'erreur des autres calculs. En premier lieu, sur la figure 9.5, nous représentons les flux à l'état final à deux groupes, et les erreurs associées, pour les calculs MINOS avec un pas de temps de 1ms (200 pas) et 0.2ms (1000 pas). À moins de 200 pas, MINOS a du mal à converger. Dans les deux cas, l'écart à la référence

est de l'ordre du dixième de pourcent. On peut donc considérer que les valeurs MINOS à 2000 pas sont une bonne référence. Pour tous ces calculs, le maillage est de  $80 \times 80$  et la représentation est  $RT_0$ .

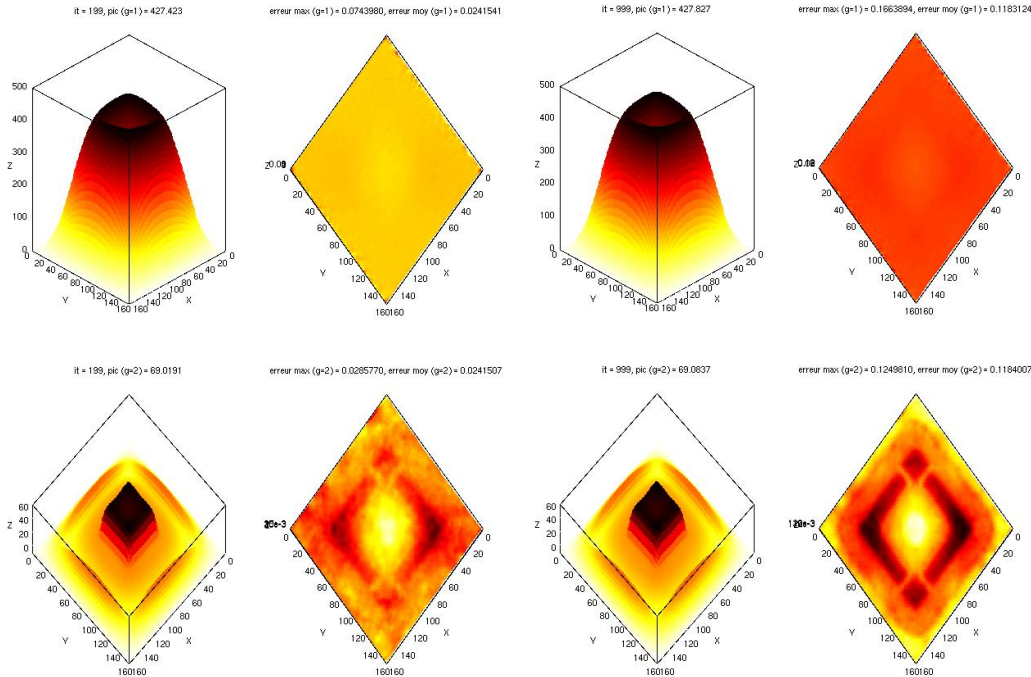


FIG. 9.5 – Flux et erreurs 2D avec MINOS ( $\delta t = 1ms$  et  $\delta t = 0.2ms$ ) à l'état final ( $t = 0.2s$ ).

Pour l'approche LQS, nous conservons le même maillage spatial fin. Nous considérons deux stratégies différentes en temps :

- 100 pas de temps grossiers divisés en 2, 5 ou 10 sous pas de temps fins ;
- 200 pas de temps grossiers divisés en 2, 5 ou 10 sous pas de temps fins ;

et deux en espace :

- $2 \times 2$  sous domaines, 40 mailles fines par maille grossière dans chaque direction ;
- $20 \times 20$  sous domaines, 4 mailles fines par maille grossière dans chaque direction.

La condensation spatiale  $2 \times 2$  est la plus extrême et celle  $20 \times 20$  colle à la géométrie de calcul. Pour ces calculs, à chaque fois nous représentons les flux et leurs erreurs à l'état médian, après  $0.1s$ , et l'état final, après  $0.2s$ .

Nous représentons sur les figures 9.6 et 9.7 deux cas parmi les précédents. Nous en présenterons d'autres dans le chapitre suivant. On voit dans ces deux cas que l'erreur est minimale ( $< 1\%$ ) et homogène. Sur l'ensemble des cas précédents, tableau 9.3, on observe d'aussi bons résultats à l'exception de cas extrêmes où l'erreur est de l'ordre de  $2 - 3\%$ . Nous discuterons de ces différents cas ainsi que des performances en temps de calcul dans le chapitre suivant. On peut déjà remarquer que l'erreur est plus importante là où les perturbations sont introduites. Ensuite, du fait de l'utilisation des coefficients de discontinuité, même dans le cas à 4 sous-domaines (figure 9.7), aucune ligne d'erreur n'apparaît au bord de ses domaines. Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, l'introduction de cette théorie corrige bien les singularités que les frontières internes pourraient induire. On l'illustre sur la figure 9.8 où nous passons le même cas mais sans condition de raccordement. La frontière des sous-domaines est alors bien visible.

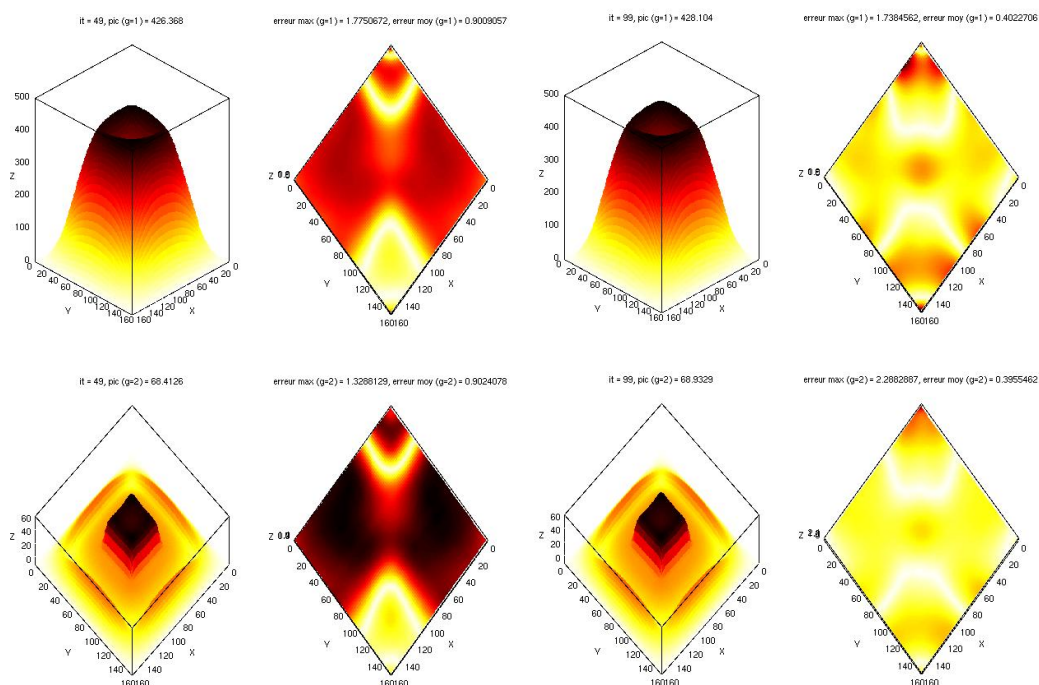


FIG. 9.6 – Flux et erreurs 2D avec LQS ( $\delta t = 0.2\text{ms}$  et maillage grossier  $20 \times 20$ ) à l'état médian ( $t = 0.1\text{s}$ ) et final ( $t = 0.2\text{s}$ ).

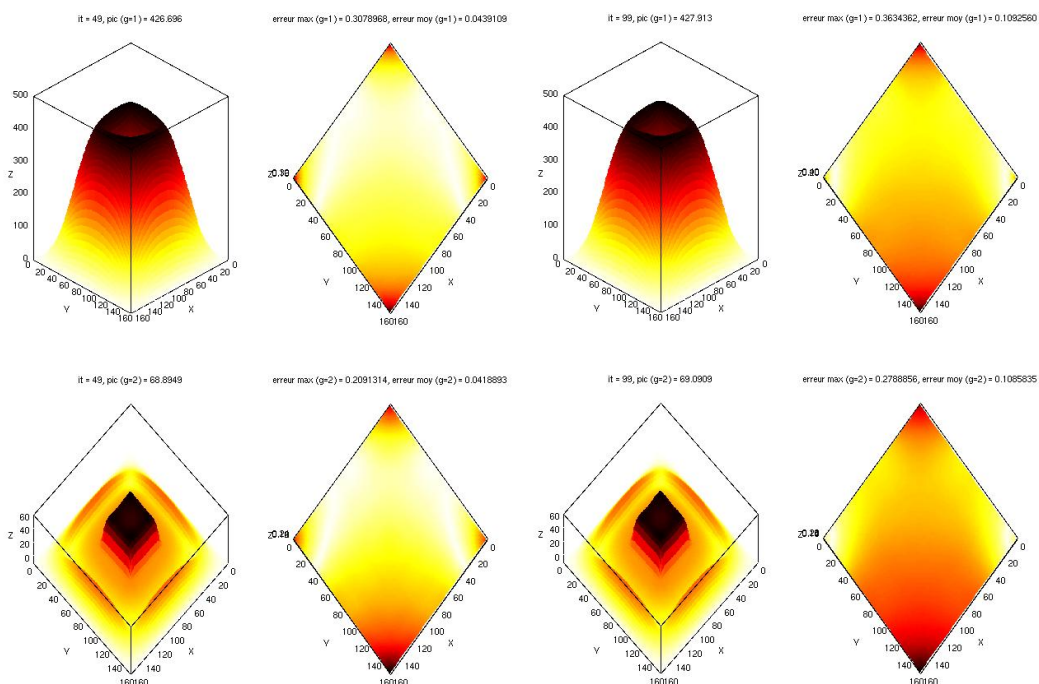


FIG. 9.7 – Flux et erreurs 2D avec LQS ( $\delta t = 1\text{ms}$  et maillage grossier  $2 \times 2$ ) à l'état médian ( $t = 0.1\text{s}$ ) et final ( $t = 0.2\text{s}$ ).

TAB. 9.3 – Erreurs relatives moyennées entre le MINOS référence et les résultats de la méthode LQS pour le benchmark 2D après 0.1s et 0.2s.

Pas de temps (ms / sous pas)	Nombre de sous domaines ( $x \times y$ )	Erreur à 0.1s (%)	Erreur à 0.2s (%)
2.0 / 2	$2 \times 2$	0.043	0.109
2.0 / 5	$2 \times 2$	0.250	0.319
2.0 / 10	$2 \times 2$	0.071	0.138
1.0 / 2	$2 \times 2$	0.028	0.076
1.0 / 5	$2 \times 2$	0.250	0.319
1.0 / 10	$2 \times 2$	0.109	0.177
2.0 / 2	$20 \times 20$	1.283	1.436
2.0 / 5	$20 \times 20$	2.282	1.611
2.0 / 10	$20 \times 20$	0.902	0.399
1.0 / 2	$20 \times 20$	0.641	0.998
1.0 / 5	$20 \times 20$	4.071	3.278
1.0 / 10	$20 \times 20$	3.124	2.152

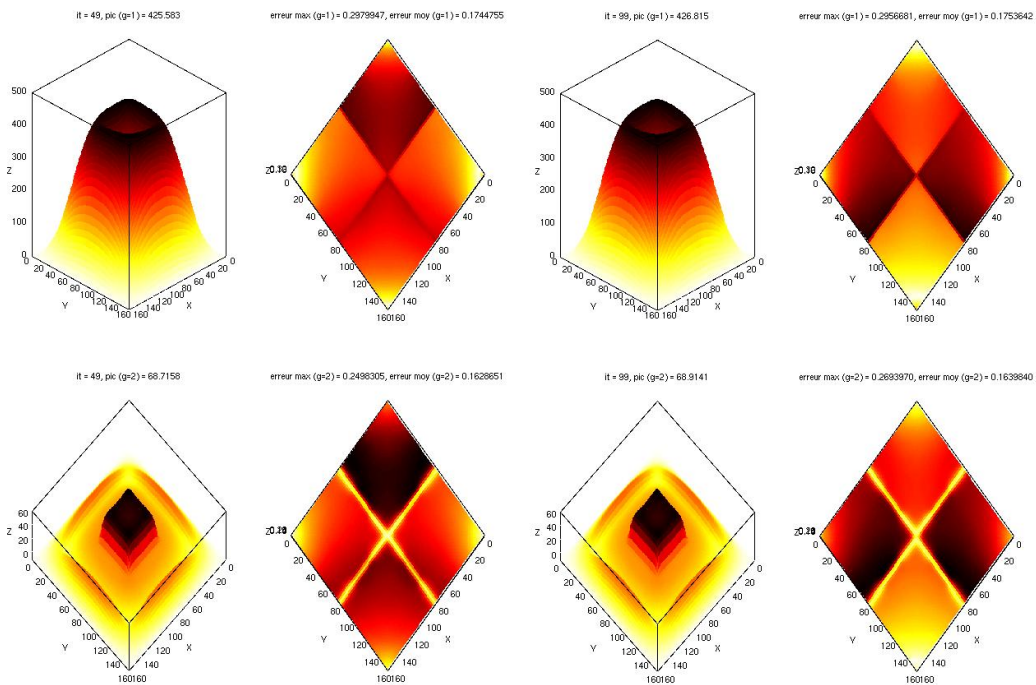


FIG. 9.8 – Flux et erreurs 2D avec LQS ( $\delta t = 1ms$  et maillage grossier  $2 \times 2$ ) à l'état médian ( $t = 0.1s$ ) et final ( $t = 0.2s$ ) sans utiliser des coefficients de discontinuité.

### 9.3 Tests en 3 dimensions

L'intérêt du test 3D est qu'il est le plus complexe et donc le plus à même de mettre en valeur les atouts de notre méthode. Nous en tirerons en particulier les informations de performance.

#### 9.3.1 Présentation du cas test

Ce benchmark TWIGL ([Langenbuch *et al.*, 1977]) est une configuration à trois dimensions pour laquelle nous disposons de valeurs de référence, fournies par la littérature. Nous pouvons donc comparer nos résultats LQS, ceux de MINOS, et ainsi étudier les performances en temps et précision. La disposition des assemblages est représentée sur la figure 9.9. C'est une représentation à 2 groupes d'énergie et à 6 groupes de précurseurs. Les données neutroniques sont rappelées dans le tableau 9.9. On simule donc un quart de cœur, le reste

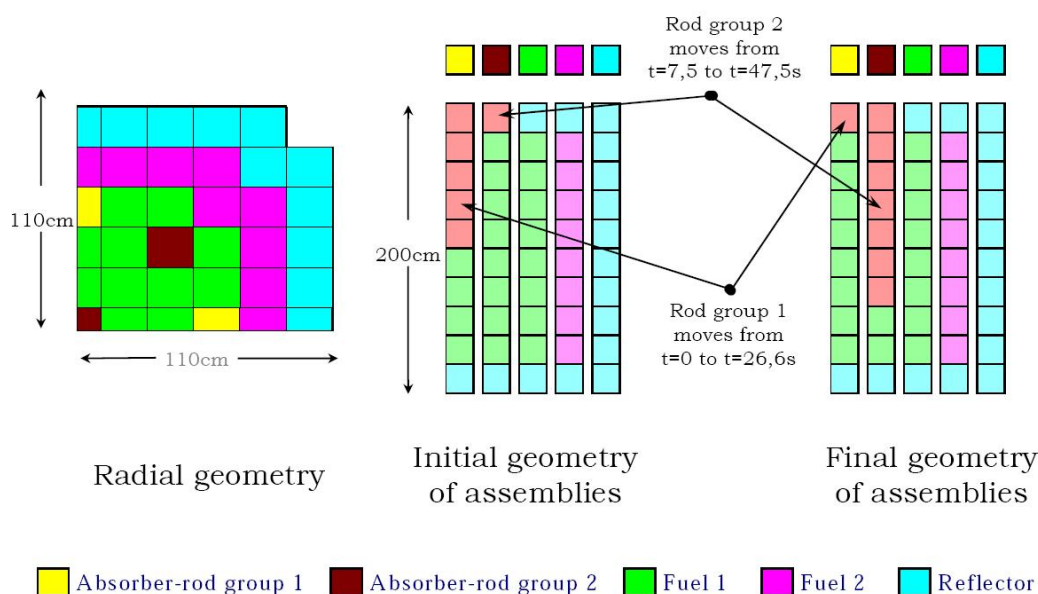


FIG. 9.9 – Disposition des assemblages de combustibles à l'état initial et final pour le cœur du benchmark 3D

se déduisant par symétrie (les conditions aux limites de Neumann sont adaptées, cf. section 2.7). Une barre de contrôle est éjectée ( $t = 0 \rightarrow 26.6s$ ,  $z = 100 \rightarrow 180cm$ ) et une autre est insérée ( $t = 7.5 \rightarrow 47.5s$ ,  $z = 180 \rightarrow 60cm$ ) pendant la simulation durant 65s. On étudie, comme observable de ces calculs, la puissance totale intégrée sur le cœur :

$$P = \sum_{g=1}^G \int_{\Omega} \kappa \Sigma_f^g \phi^g \vec{dr}, \quad (9.2)$$

où  $\kappa$  est la puissance moyenne émise par fission <sup>1</sup>, dans notre cas 3D :  $\kappa = 3.204$ .

La discrétisation spatiale repose sur un maillage fin  $RT_0$   $11 \times 11$  en radial. Le nombre de mailles axiales dépend du pas de temps choisi. Il est lié à la vitesse d'insertion des barres, de sorte qu'à chaque pas temps, la barre gagne au moins une cellule. Car nous rappelons que

<sup>1</sup>La puissance s'exprime en Joule ou en Watt avec l'équivalence  $1W = 1J.s^{-1}$ .



TAB. 9.4 – Données neutroniques pour le cœur du benchmark 3D.

Propriétés des matériaux	Combustible 1		Absorbant			
	Groupe 1	Groupe 2	Groupe 1	Groupe 2		
$D$ (cm)	1.423913	0.3563060	1.423913	0.3563060		
$\Sigma_a$ ( $cm^{-1}$ )	0.01040206	0.08766217	0.01095206	0.09146217		
$\nu\Sigma_f$ ( $cm^{-1}$ )	0.00647769	0.1127328	0.00647769	0.1127328		
$\Sigma_s^{j \rightarrow j+1}$ ( $cm^{-1}$ )	0.01755550	0.0	0.01755550	0.0		
$V$ ( $cm.s^{-1}$ )	$1.25 * 10^7$	$2.5 * 10^5$	$1.25 * 10^7$	$2.5 * 10^5$		
$\chi$	1.0	0.0	1.0	0.0		
Propriétés des matériaux	Combustible 2		Réflecteur			
	Groupe 1	Groupe 2	Groupe 1	Groupe 2		
$D$ (cm)	1.425611	0.3505740	1.634227	0.260020		
$\Sigma_a$ ( $cm^{-1}$ )	0.01099263	0.09925634	0.00266057	0.04936351		
$\nu\Sigma_f$ ( $cm^{-1}$ )	0.00750328	0.1378004	0.0	0.0		
$\Sigma_s^{j \rightarrow j+1}$ ( $cm^{-1}$ )	0.01717768	0.0	0.02759693	0.0		
$V$ ( $cm.s^{-1}$ )	$1.25 * 10^7$	$2.5 * 10^5$	$1.25 * 10^7$	$2.5 * 10^5$		
$\chi$	1.0	0.0	1.0	0.0		
Précurseurs	Groupe 1	Groupe 2	Groupe 3	Groupe 4	Groupe 5	Groupe 6
$\lambda$ ( $s^{-1}$ )	0.0127	0.0317	0.115	0.311	1.4	3.87
$\beta$	0.000247	0.0013845	0.001222	0.0026455	0.000832	0.000169

les cellules d'une géométrie doivent avoir une composition unique homogène. Par exemple, un pas de temps de 0.083s équivaut à une maille axiale de 0.625cm, d'où un total de 320 mailles pour l'axe  $z$ .

### 9.3.2 Résultats numériques

Sur la figure 9.10 nous représentons l'évolution de la puissance durant les 65s. Les valeurs pointées ( $\oplus$ ), issues de la littérature, nous servent de référence. On voit que notre approche, avec un pas de temps grossier de 0.208s divisé en 8 pas de temps fins, fait aussi bien que MINOS avec un pas de temps de 0.083s. Dans ce cas, notre approche repose sur un maillage grossier  $2 \times 2 \times 2$ . Les calculs MINOS sont effectués avec une représentation Raviart-Thomas d'ordre 1 sur le même maillage régulier que celui de la forme. Pour ce benchmark 3D, la différence entre les stratégies (MINOS et LQS) apparaît dans la capacité d'un calcul à obtenir une bonne estimation du pic de puissance. Par conséquent, sur la figure 9.11, on zoome au voisinage du pic, i.e. pour un temps proche de  $t = 20s$ . Nous représentons les mêmes courbes que précédemment (cas B) plus un calcul MINOS d'ordre 1 avec un maillage plus adapté (moins raffiné dans les réflecteurs, cas A). On constate que ce dernier donne un meilleur résultat. Ceci montre qu'un maillage trop fin, dans des zones où le flux est proche de zéro, peut nuire à la précision. Cette considération se retrouve dans nos choix de condensation pour l'amplitude.

On constate donc une bonne estimation du pic par la méthode LQS avec, néanmoins, un léger décalage en temps. Dans le tableau 9.5, nous résumons la précision au voisinage du pic de puissance (la valeur obtenue à  $t = 20s$ ) pour différentes stratégies LQS. Nous voyons que réduire le pas de temps, avec des sous pas d'amplitude, offre de meilleurs résultats, même si ces calculs additionnels sont sur un maillage grossier. Les résultats sont au niveau de ceux

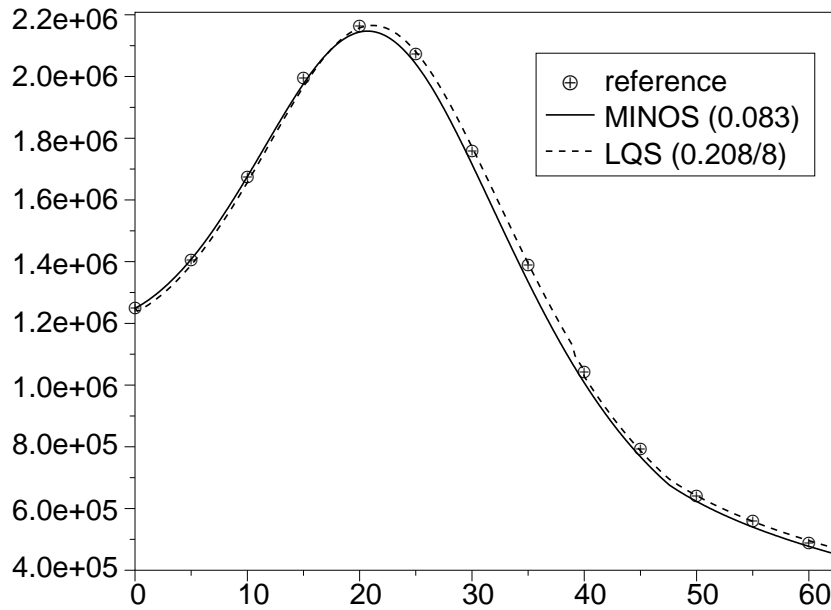


FIG. 9.10 – Puissance intégrée totale pour une simulation avec la méthode LQS et le solveur MINOS en comparaison des valeurs de référence.

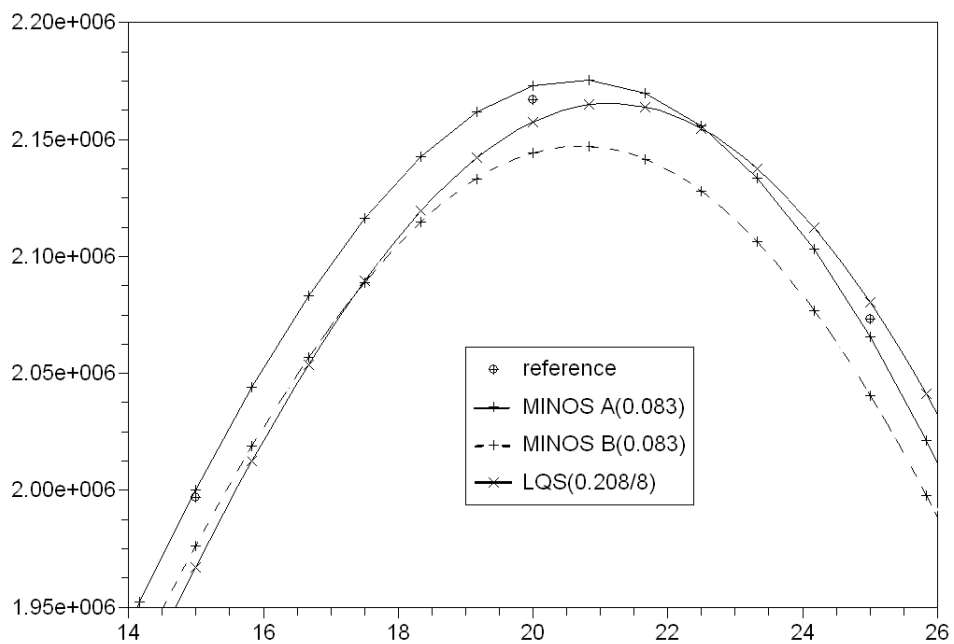


FIG. 9.11 – Pic de puissance intégrée totale pour différentes simulations avec la méthode LQS et le solveur MINOS en comparaison des valeurs de référence.

obtenus avec MINOS. Nous verrons la performance en temps de ces calculs dans le chapitre suivant.

TAB. 9.5 – Erreurs relatives entre les valeurs références et les résultats de la méthode LQS pour le benchmark 3D après 20s (proche du pic de puissance).

Pas de temps ( $s$ / sous pas)	Nombre de sous domaines ( $x \times y \times z$ )	Erreur (%)
0.208 / 2	$2 \times 2 \times 2$	1.1629517
0.208 / 5	$2 \times 2 \times 2$	1.3193964
0.208 / 8	$2 \times 2 \times 2$	0.4384143
0.208 / 5	$6 \times 6 \times 16$	1.2257142
0.208 / 5	$3 \times 3 \times 8$	0.9880474
0.208 / 5	$3 \times 3 \times 4$	1.7933453

Finalement, il faut noter que l'ensemble de ces tests sont effectués sans réinitialisation du produit (6.1). En théorie à la fin de chaque pas de temps grossier, on pourrait réinitialiser le produit :

$$\tilde{a} = 1, \quad \tilde{f} = \phi = af, \quad \vec{p}_{\tilde{a}} = 0, \quad \vec{p}_{\tilde{f}} = \vec{p}_{\phi} = \vec{p}_a + \vec{p}_f, \quad (9.3)$$

et réamorcer l'algorithme LQS tel quel. Cependant, les tests montrent qu'une telle opération nuit gravement aux résultats, allant jusqu'à provoquer la divergence de certaines résolutions. Plusieurs explications sont proposées :

- le courant reconstruit hérite de fortes approximations (calcul grossier et interpolation) pénalisant les nouveaux calculs ;
- réinitialiser le produit casse la condition de normalisation sur  $f$ .

Pour vérifier la première hypothèse, nous avons essayer de réinitialiser le produit seulement sur la composante paire dans la ligne (9.3) (ce qui implique que  $\vec{p}_{\tilde{f}} = \vec{p}_{\phi} = \vec{p}_f$ ). Dans ces tests, les résultats n'étaient pas concluant non plus. On peut en déduire que l'information fournit par le courant d'amplitude est nécessaire mais sujet à approximation. Sans réinitialisation, elle ne sert que pour les calculs grossiers et ne pose donc aucun problème. Cette remarque est cohérente avec les observations faites sur l'interpolation de la source de divergence (8.10).

Pour la deuxième hypothèse, comme nous l'avons dit, la condition de normalisation (6.9) sans pondération ( $\psi_0 = 1$ ) est vérifiée pour une configuration initiale critique ( $\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$ ). Nous avons vérifié lors des tests, la constance de cette condition sur chaque sous domaine. Par exemple, pour les tests 3D, les valeurs intégrées sur chaque maille grossière évoluait très lentement : moins de 1% par sous domaine et par pas de temps grossier. Nous avons testé des itérations de point fixe sur les pas de temps grossiers (cf. section 7.4) mais sans gain visible. On peut donc supposer que la condition est suffisamment stable dans ces cas là. Par contre, avec réinitialisation, le nouveau flux n'est plus critique. La condition n'est donc pas vérifiée comme à l'état initial critique. Cela semble montrer que sans pondération, il est nécessaire d'amorcer l'approche LQS avec un flux critique.

Les résultats précédents ont permis de montrer la validité de l'approche LQS et d'affiner les derniers réglages de l'algorithme. Dans le chapitre suivant, nous allons étudier les performances de l'approche afin de voir si nous répondons à la problématique d'optimisation du ratio temps/précision.

## Chapitre 10

# Étude du comportement de la méthode et de ses résultats

*La simple validation ne répond pas à la problématique initiale qui est d'optimiser le ratio temps / précision. Dans ce chapitre, nous étudions plus précisément les performances en temps du code. Le cas 3D étant le plus compliqué et le plus long, il fournit la majorité des résultats. On constate un gain non négligeable en temps de calcul pour obtenir des résultats très précis en comparaison de la résolution standard par MINOS. Nous illustrons aussi le gain possible par la parallélisation de la méthode. La théorie s'inspirant de la décomposition de domaine, une part importante du temps de calcul est passé dans des procédures disjointes. Ainsi, une programmation parallèle, vectorielle, voire multithread est facilement intégrable. Dans un deuxième temps, nous introduisons des éléments d'échelle adaptative en temps et en espace. Là encore, la méthode LQS apporte un plus. L'amplitude fournit à moindre coup une observable temps et espace de l'évolution du cœur. Nous détaillons différentes pistes, avec illustrations numériques simples, qui utiliseraient l'amplitude pour des pas de temps adaptatifs ou des maillages adaptés. Nous discutons même quelques éléments d'automatisation de ces méthodes.*

Pour l'étude de performance et l'analyse de la méthode, nous utilisons les mêmes benchmarks que dans le chapitre précédent. Nous nous référons donc aux résultats précédents et les complétons par de nouveaux cas.

## 10.1 Performance et temps de calcul

Pour étudier le ratio temps / précision de l'approche LQS, nous commençons par étudier les erreurs avant de parler du temps de calcul. Le point de comparaison reste le solveur MINOS et son approche cinétique de référence.

### 10.1.1 Temps et précisions

Nous avons résumé l'ensemble des résultats obtenus pour les benchmarks 2D et 3D dans les tableaux 10.1 et 10.2. D'un point de vue précision, on voit dans le cas 3D et sur la figure 9.10 que MINOS ne dépasse pas une certaine précision (1%) même en diminuant le pas de temps. Par contre, on arrive avec notre approche LQS à aller un peu plus loin. Ces erreurs étant minimales, de l'ordre du pourcent, on ne peut en déduire une meilleure précision de la méthode. On ne peut pas faire la même analyse pour les résultats 2D puisque l'on utilise MINOS comme référence pour le calcul d'erreur.

Par contre dans les tests, on observe que là où MINOS sous évalue, l'approche LQS sur évalue. Cela vient probablement du coefficient multiplicateur ( $\phi = af$ ). D'un point de vue pratique c'est intéressant car on obtient alors des résultats conservatifs. C'est-à-dire que si on étudie un cœur, on cherche à le contrôler en évitant qu'il s'emballé ou qu'il s'éteigne. Ainsi, si on pose des critères à ne pas dépasser pour la puissance, une sur-évaluation est conservative.

Pour le cas 2D, les temps de calcul sont équivalents entre MINOS et notre méthode, à l'exception des cas les plus fins. Les résultats 3D donnent plus d'informations puisque les maillages sont plus complexes. On voit dans le tableau 10.2 qu'un calcul MINOS grossier en temps donne une bonne précision pour une performance en temps de calcul faible. Par contre, si on effectue un calcul plus précis en temps, seule la stratégie LQS à 288 sous domaines est plus lente. En pratique, on ne connaît pas la précision obtenue. Dans le doute, on privilégie des discrétisations fines pour garantir cette précision.

On observe que trop de sous pas de temps ou trop de sous domaines pénalisent le temps de calcul. On voit aussi que le nombre de sous domaines doit être décomposé pour être analysé. Puisque le flux a plus de variation sur le plan radial, une condensation moins forte en  $x$  et  $y$  demande moins de travail. Si le calcul est plus précis, on passe moins de temps dans les itérations pour converger. Si l'amplitude est plus précise, la forme doit moins compenser. Et donc, le temps de calcul peut s'en ressentir. Ainsi, le cas à 72 sous domaines n'est pas plus rapide que celui à 64. Les différences restent tout de même assez limitées entre les différentes stratégies pour le temps de calcul. Nous allons voir que l'important est plus dans le temps passé dans les condensations.

### 10.1.2 Condensations et parallélisme

Comme nous l'avons vu, l'approche LQS ressemble par beaucoup d'éléments à la décomposition de domaine. Cette dernière est un outil numérique usuel pour introduire une programmation parallèle. L'évolution de l'informatique actuelle tend à développer les calculs multi-processus. L'idée est de répartir la charge d'un code sur plusieurs unités de calculs. Une unité est :

TAB. 10.1 – Indice du temps CPU en fonction des paramètres pour le benchmark 2D avec indication de l'erreur moyenne finale.

Cas	$\delta t$ (ms)		$\delta x$ (cm)		Erreur (%)	Temps CPU	Part des condensations
	grossier	fin	grossier	fin			
MINOS 50	4.0		0.25		0.1	8.60	
MINOS 100	2.0		0.25		0.1	14.08	
MINOS 200	1.0		0.25		0.1	23.33	
MINOS 1000	0.2		0.25		0.2	15.23	
MINOS 2000	0.1		0.25		0.0	28.91	
LQS 50 10 2	4.0	0.4	10.0	0.25	0.1	13.76	5.20 (38%)
LQS 50 10 20	4.0	0.4	1.0	0.25	1.0	43.63	34.14 (78%)
LQS 100 2 2	2.0	1.0	10.0	0.25	0.1	8.26	2.24 (27%)
LQS 100 5 2	2.0	0.4	10.0	0.25	0.3	15.06	5.22 (35%)
LQS 100 10 2	2.0	0.2	10.0	0.25	0.1	25.84	9.71 (38%)
LQS 100 2 20	2.0	1.0	1.0	0.25	1.4	18.94	13.09 (69%)
LQS 100 5 20	2.0	0.4	1.0	0.25	1.6	42.32	32.19 (76%)
LQS 100 10 20	2.0	0.2	1.0	0.25	0.4	81.05	64.66 (80%)
LQS 200 2 2	1.0	0.5	10.0	0.25	0.3	14.41	4.58 (32%)
LQS 200 5 2	1.0	0.2	10.0	0.25	1.1	27.27	10.04 (37%)
LQS 200 10 2	1.0	0.1	10.0	0.25	0.6	47.47	18.74 (39%)
LQS 200 2 20	1.0	0.5	1.0	0.25	2.8	35.11	25.22 (72%)
LQS 200 5 20	1.0	0.2	1.0	0.25	3.3	80.77	62.27 (77%)
LQS 200 10 20	1.0	0.1	1.0	0.25	3.5	148.67	119.25 (80%)

TAB. 10.2 – Indice du temps CPU en fonction des paramètres pour le benchmark 3D avec indication de l'erreur à  $t = 20s$ .

Cas	$\delta t$ (ms)		nombre de sous-domaines	Erreur (%)	Indice temps	Part des condensations
	grossier	fin				
MINOS 0.208	208			1.098	20	
MINOS 0.083	83			1.049	100	
LQS 0.208/2 222	208	104	8	1.627	56	9 (16%)
LQS 0.208/5 222	208	41.6	8	3.177	76	19 (25%)
LQS 0.208/8 222	208	26	8	0.438	91	29 (32%)
LQS 0.208/5 444	208	41.6	64	2.329	77	26 (34%)
LQS 0.208/5 338	208	41.6	72	0.988	76	23 (30%)
LQS 0.208/5 448	208	41.6	128	4.043	87	31 (36%)
LQS 0.208/5 668	208	41.6	288	1.186	124	67 (54%)

- soit un des cœurs d'un microprocesseur ;
- soit un des processeurs d'un ordinateur ;
- soit un des ordinateurs d'un parc informatique.

Néanmoins, pour réellement diviser les temps de calcul par le nombre d'unités, il faut que la programmation du code informatique soit adaptée. C'est-à-dire qu'il faut que l'on puisse découpler des sous-ensembles de calculs pour les effectuer indépendamment, les uns des autres, sur ces différents unités.

Le solveur MINOS s'avère être mal adapté à la programmation parallèle. Différentes études ont été faites ([Guérin, 2007]) pour paralléliser le solveur de diffusion. Aucune de ces approches n'a pour l'instant été transposées pour la cinétique. L'intégration de la variable temps rajoute une difficulté. Cependant, notre approche offre une première réponse. Une part importante des calculs de l'approche LQS tient dans :

- les opérations matricielles (addition, multiplication matrice-vecteur, etc...);
- les condensations du système grossier et les interpolations pour le système fin.

Les premières sont évidemment parallélisables. Mais, si plus nombreuses dans la méthode LQS, elles ne lui sont pas spécifiques. Par contre, les secondes sont la base du fonctionnement multi-échelle.

Dans les tableaux 10.1 et 10.2, nous avons précisé pour chaque temps de calcul la part passée dans les fonctions de condensation et d'interpolation. On constate qu'en moyenne cette part est de l'ordre de 30%. Cela atteint même les 70 à 80% pour les stratégies les plus fines. Il paraît antinomique que les cas fins demandent plus de temps dans les condensations. Mais ces dernières sont des intégrales sur le domaine. Pour un grand nombre de petites intégrales ou un petit nombre de grandes, on fait le même nombre de calculs sur le domaine. La différence vient donc de la complexité du système obtenu. Lorsque l'on augmente les calculs d'amplitude, on augmente la part des condensations.

Ces calculs sont donc des intégrales locales. Chacune est indépendante des autres, en calcul comme en stockage mémoire. Ainsi, ces condensations sont naturellement parallélisables. Nous laissons les tests ouverts mais on peut postuler que le temps de condensation pourra presque arithmétiquement être divisé par le nombre d'unité de calcul. On peut même adapter la stratégie LQS aux ressources informatiques. Si un utilisateur dispose de  $n$  unités, il choisira un nombre de domaines multiple de  $n$ . Les charges de calcul se répartissent alors équitablement sur les unités. Par exemple, pour le cas LQS 2D 200 2 20, avec seulement 4 unités, on pourrait hypothétiquement ramener le temps de simulation au cas MINOS les plus simples (15-16 de temps CPU). De tels gains ouvrent de nombreuses perspectives à l'utilisation de notre méthode.

## 10.2 Échelles adaptatives

Parmi les autres perspectives, étudions celles des échelles adaptatives. C'est-à-dire des échelles de calculs adaptées aux problèmes, son comportement et sa physionomie.

### 10.2.1 Variable d'espace

Tout d'abord, rappelons que la méthode autorise toutes les tailles de maillages grossiers compris entre 1 sous domaine et le maillage fin. La seule condition actuelle du code est que les maillages soient emboîtés. Adapter le maillage pourrait avoir deux formes :

- raffiner ou condenser les mailles actuelles ;
- définir un nouveau maillage différent sans lien au précédent.

L'adaptation de maillage aurait pour but d'améliorer l'efficacité du code en ratio temps / précision en fonction des données calculées à l'instant considéré. Par exemple, si on observe des changements importants dans une zone du cœur, il pourrait être pertinent de raffiner cette zone.

Dans l'approche LQS et dans cette optique, c'est le maillage grossier associé à l'amplitude qui pourrait s'adapter. Une solution simple pour réaliser ses opérations serait de réinitialiser le produit (6.1). Nous avons discuté des problèmes d'une ré-initialisation dans la sous-section 9.3.2. Néanmoins, on pourrait transposer l'amplitude d'un maillage à l'autre sans la réinitialiser. Nous avons montré l'intérêt de la décomposition pour le parallélisme. Les travaux [Bosio *et al.*, 2001] (cf. section 5.3) ont montré l'intérêt d'une amplitude locale pour des données hétérogènes. Mais les résultats montrent que trop de raffinement peut poser problème.

Certaines stratégies très raffinées ont étonnamment des erreurs plus marquées que les autres. Par exemple, sur la figure 10.1, on voit une erreur significative apparaître au coin supérieur du domaine. Nous avons discuté du conditionnement des matrices du problème d'amplitude dans la section 7.4. Dans cet exemple, les valeurs du flux, et donc de la forme, sont très proches de zéro. Sans une condensation suffisante, cela nuit à la résolution du système. Si  $f$  est proche de 0,  $a$  peut avoir de larges valeurs différentes sans impacter sur le flux reconstruit. Dans la pratique numérique, on observe que l'amplitude ne s'éloigne pas trop de 1.

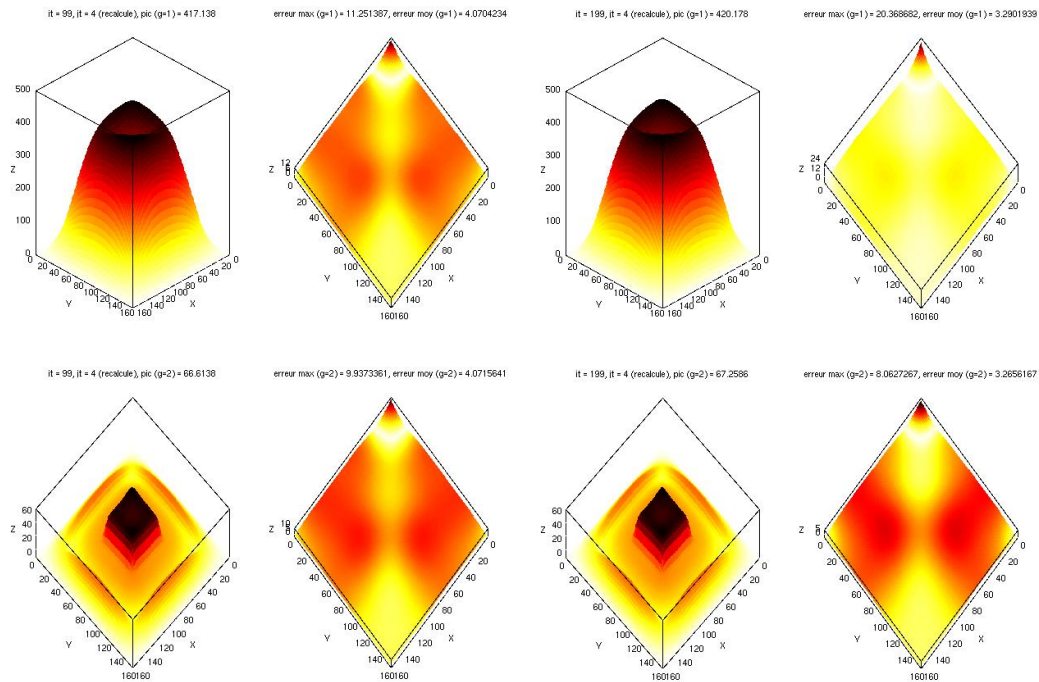


FIG. 10.1 – Flux et erreurs sur benchmark 2D avec LQS ( $\delta t = 0.2ms$  et maillage grossier  $20 \times 20$ ) à l'état médian ( $t = 0.1s$ ) et final ( $t = 0.2s$ ).

Par conséquent, un raffinement dynamique et adaptatif pourrait rapidement aboutir à ce genre de problème. Il nous paraît donc peu judicieux d'utiliser une adaptation automatique en espace. Par contre, un maillage pré-adapté aux données (hétérogénéités) et aux ressources informatiques (unités de calcul) reste pertinent et justifie bien notre approche locale. Nous



allons voir qu'une amplitude locale pourrait aussi servir pour l'adaptation en temps.

### 10.2.2 Variable de temps

L'autre adaptation des échelles de discrétisation considère la variable temporelle. Nous avons vu que la précision et le temps de calcul sont fortement corrélés à la taille du pas de temps. Nous avons étudié des cas tests où les données évoluaient rapidement pour mettre à l'épreuve notre méthode. De futurs utilisateurs pourraient simuler des situations où le flux serait plus stable. Dans ces cas, adapter de façon dynamique le pas de temps a un intérêt évident.

Une difficulté des échelles adaptatives est de définir des critères d'adaptation qui soient :

- réellement bénéfiques en précision ;
- peu coûteux en temps de calcul pour leurs évaluations ;

et de trouver un bon compromis entre les deux. Une idée simple est d'obtenir une observable rapidement estimable sur l'évolution de la situation. Et à partir de simples critères sur cette observable, on déduit l'adaptation du pas de temps. Par exemple, si le cœur s'emballe, on réduit le pas de temps. Inversement, s'il se stabilise, on relâche la discrétisation.

Avec une simulation LQS, il est évident que les valeurs d'amplitude sont de bons candidats pour cette observable. Sur la figure 10.2, on voit que les valeurs d'amplitude se modifient bien là où la perturbation a été introduite (cf sous-section 9.2.1). Un premier critère serait donc de lier le pas de temps au différentiel des valeurs d'amplitude. Si ces dernières se stabilisent ou évoluent, on peut ajuster le pas de temps. Mieux, on peut recommencer le dernier calcul grossier avec des pas de temps plus fins. Cette dernière idée ne serait pas trop coûteuse puisque sur l'échelle grossière en espace.

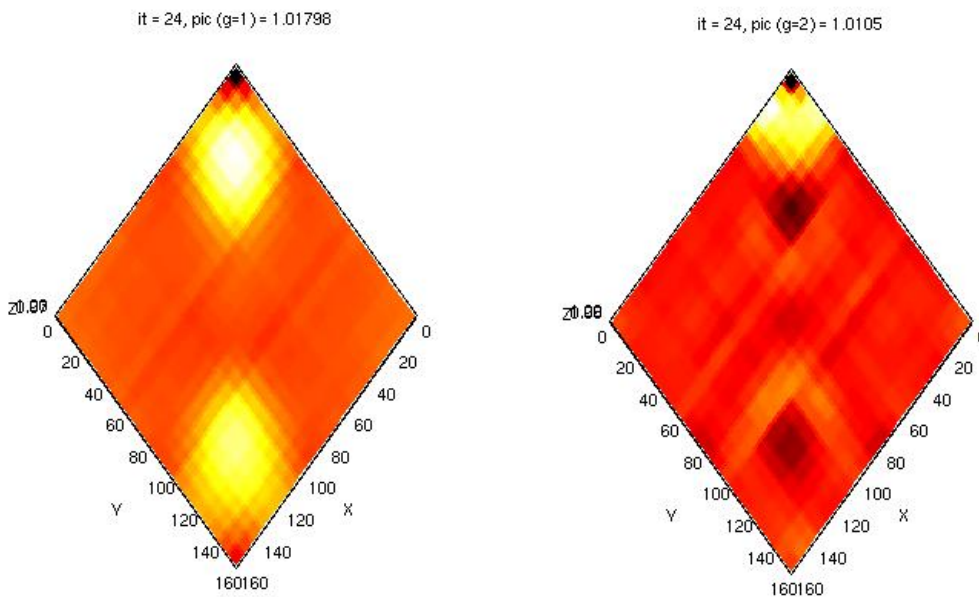


FIG. 10.2 – Représentation de l'amplitude (2 groupes d'énergie) sur benchmark 2D avec LQS ( $\delta t = 0.4ms$  et maillage grossier  $20 \times 20$ ) à l'état médian ( $t = 0.1s$ ).

Ensuite, si on fixe un critère local pour l'adaptation du pas de temps, le quasi-statique a

encore plus d'intérêt. Différents cas physiques pourraient tirer partie d'un critère local. Une observable globale moyenne ne pourrait pas répondre à ce genre de cas, mais un maillage adapté en espace et un critère en temps le pourrait. Finalement, en plus des options d'adaptation du pas de temps, et de reprise du dernier calcul, on peut réinitialiser la forme lorsqu'un critère d'évolution est atteint. Si une valeur locale varie plus que les autres, on peut anticiper le calcul de forme. L'algorithme LQS ne suppose rien qui ne l'empêche. Ainsi, si une zone du domaine varie beaucoup au niveau grossier, on peut réévaluer la forme pour fluidifier la répartition spatiale fine du flux. Finalement, on voit bien les bénéfices multi-échelles de l'approche LQS pour le pas de temps adaptatif.

### 10.3 Perspectives de la méthode

Nous venons d'étudier les perspectives ouvertes par les propriétés de l'approche LQS. Mais en plus, on peut voir d'autres perspectives à nos travaux. En premier lieu, d'un point de vue programmation, nous avons fait le choix de s'intégrer au maximum dans l'environnement DESCARTES / APOLLO3. Dans la pratique, cela s'entend par le fait que nous avons limité le nombre d'éléments ajoutés au code. L'avantage évident est de rendre notre méthode très accessible aux utilisateurs du solveur MINOS. Néanmoins, une amélioration possible des performances de notre code pourrait passer par une programmation plus spécifique. Par exemple, pour l'assemblage du système grossier sur l'amplitude, actuellement, nous assemblons les matrices fines, puis nous insérons le flux dans la maille, et finalement nous condensons le système. Regrouper ces étapes pourrait sûrement apporter un gain en temps de calcul et consommation de mémoire. Notons que les outils développés, l'ont été de sorte à être utilisables pour d'autres applications que l'approche LQS. On pense en particulier aux opérateurs de changement de maillage.

Deuxièmement, nous avons vu dans les chapitres 7 et 8 les choix, et leurs justifications, que nous faisons pour la méthode LQS d'un point de vue théorique. Nous avons laissé ouvert la pondération des condensations. Nous avons aussi limité la représentation  $RT_N$  de l'amplitude à l'ordre 0. Si, nos justifications restent valables, certains contextes spécifiques pourraient rendre intéressant l'étude numérique de ces choix écartés. De plus, certains choix supplémentaires pourraient s'inspirer des méthodes multigrilles (cf. section 5.4, page 46) comme le lissage après interpolation ou la récursivité de la décomposition.

Un autre élément du contexte de nos travaux est l'utilisation du solveur mixte MINOS. Nous avons vu qu'une représentation mixte était bénéfique dans les calculs de neutronique. Mais le courant associé à la fonction d'amplitude grossière a montré des limites dans son intégration au problème. Nous avons dû traiter spécifiquement les contributions impaires de l'amplitude (source de divergence, reconstruction du flux, réinitialisation, ...). Ces constatations nous permettent d'imaginer qu'un solveur non-mixte pourrait aussi bien répondre au besoin de l'amplitude. Cependant, une méthode de résolution différente limiterait les inter-connexions entre les échelles. On ne pourrait assembler le système grossier comme condensation du fin si les approches sont différentes. Et reconstruire une solution mixte, sans contribution mixte de l'amplitude, serait aussi compliqué.

Mais finalement, nos travaux comportent deux parts importantes :

- le développement de théorie et de modélisation de notre approche multi-échelle ;
- son intégration dans le contexte mixte du solveur MINOS.

La première phase a été pensée de sorte qu'elle pourrait très bien être utilisée dans un autre contexte que celui de la seconde phase. Il existe d'autres solveurs pour la cinétique en diffusion. Mais plus que cela, la factorisation quasi-statique du flux n'est pas spécifique aux équations de la diffusion. Si on réintègre le traitement de la variable angulaire (cf. sous-

section 2.3.1, page 14) et que l'on considère des approches  $SP_N$ , la factorisation est tout à fait transposable. La cinétique  $SP_N$  est peu usitée car trop coûteuse. Une méthode multi-échelle et son gain, en particulier pour le parallélisme, pourraient peut-être la rendre plus envisageable. On voit donc l'ensemble des portes qu'ouvrent notre approche quasi-statique locale.

# Conclusions

Nous avons donc étudié les méthodes multi-échelle pour la résolution des équations de la cinétique neutronique. Dans cette étude, nous avons fait le choix d'étudier les approches quasi-statiques pour la décomposition du flux. Nous avons développé l'idée pour obtenir un meilleur ratio temps / précision dans le contexte du solveur mixte dual MINOS. Nous avons pris inspiration dans les travaux quasi-statiques de la littérature et dans les théories plus globales multi-échelles.

Nous avons défini une décomposition du flux multi-échelle, quasi-statique et mixte. De la factorisation, nous avons déduit deux problèmes symétriques sur des échelles distinctes et opposées. Nous avons étudié les propriétés de ces deux problèmes et avons posé les bases théoriques de leur traitement numérique. Chacun a en effet une stratégie de résolution très différente.

Pour l'amplitude, nous appliquons les méthodes standard de résolution du solveur MINOS mais sur une échelle grossière en espace. Pour cela, la fonction et son courant sont développés littéralement dans une base de Raviart-Thomas grossière. Cette expression aboutit à une condensation des équations et l'assemblage d'un système linéaire grossier. Pour la forme, c'est le traitement de la variable temps qui est spécifique. On doit définir un traitement grossier en temps de la forme ,en lien avec la décomposition initiale. Dans les deux cas, la remontée de l'information de l'autre problème suppose un travail d'intégration et de mise en cohérence, en plus des opérations de changement d'échelles.

Et pour conclure, la théorie comme les constatations numériques font que cette nouvelle méthode semble pertinente. Nous obtenons au pire, une approche ayant un ratio temps / précision équivalent à celui de MINOS. Mais en plus nous ouvrons un ensemble de possibilités pour la parallélisation et l'adaptation de maillage. Dans le cadre de l'ensemble des tests, nous avons pu expérimenté l'approche et en déduire un ensemble d'observations et de recommandations pour les futurs utilisateurs. Nous avons aussi démontré de nouvelles possibilités de l'approche quasi-statique et du solveur MINOS. Nous répondons à la problématique en respectant les contraintes choisies dans notre contexte.

Mais de plus, la méthode peut être à la fois considérer comme une nouvelle approche d'approximation de la cinétique, et une nouvelle technique d'accélération des calculs de cinétique. C'est pour cela, que ces travaux pourraient se transposer dans le cadre d'un autre solveur et d'une autre approche de résolution de la cinétique.

Plus nous avançons dans ces travaux, plus nous constatons un grand nombre de similitudes entre notre méthode et des approches multigrilles ou de décomposition de domaine, en plus de celles postulées au début. C'est ce qui nous a permis de montrer l'intérêt de l'approche pour le calcul parallèle. De plus, un problème grossier facilite l'estimation a priori des pas de temps nécessaires à une bonne estimation de l'évolution cinétique. Et la condensation spatiale peut elle aussi être adaptée aux données, comme par exemple, pour un maillage de calcul très fin, le maillage grossier étant la géométrie des assemblages. On en déduit donc l'idée d'adaptation de maillage.

Ainsi, ce manuscrit présente des travaux sur les méthodes multi-échelles pour les équations de la cinétique neutronique. Une approche est choisie, justifiée, conçue et étudiée. Un gros travail d'implémentation mathématique et numérique permet d'obtenir un algorithme performant en temps et précision. Complètement intégré au solveur MINOS, il ouvre par ses innovations plusieurs pistes très intéressantes pour le parallélisme et l'adaptation automatique. Finalement, cette thèse répond aux éléments demandés dans le contrat de collaboration avec le CEA et a donné lieu à plusieurs publications [Chauvet *et al.*, 2007, Chauvet *et al.*, 2008].

# Bibliographie

- [Aboanber et Nahla, 2005] A.E. ABOANBER et A.A. NAHLA. Solution of two-dimensional space-time multigroup reactor kinetics equations by generalized padé and cut-product approximations. *Annals of Nuclear Energy*, 33 :209–222, 2005.
- [Allaire et Kaber, 2002] G. ALLAIRE et S.M. KABER. *Algèbre linéaire numérique - Cours et exercices*. Ellipses, 2002.
- [Avery, 1958] R. AVERY. Theory of coupled reactors. Dans *2nd International Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy*, volume 12, pages 182–191, 1958.
- [Baudron et Lautard, 2007] A.M. BAUDRON et J.J. LAUTARD. Minos : a spn solver for core calculation. *Nuclear Science and Engineering*, 155–2 :250–263, 2007.
- [Baudron et al., 1999a] A.M. BAUDRON, J.J. LAUTARD, M. DAHMANI, et L. ERRADI. Application of the nodal mixed dual technique of spatial reactor kinetics using the improved quasi-static method. Dans *Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, September 27-30 1999.
- [Baudron et al., 1999b] A.M. BAUDRON, J.J. LAUTARD, et D. SCHNEIDER. Mixed dual methods for neutronic reactor core calculations in the cronos system. Dans *American Nuclear Society topical meeting on mathematical methods and supercomputing in nuclear applications*, april 1999.
- [Bosio et al., 2001] P. BOSIO, P. RAVETTO, M.M. ROSTAGNO, et A. BARZILOV. Multipoint methods in nuclear reactor kinetics. Dans *ANS International Meeting on Mathematical Methods for Nuclear Applications*, Salt Lake City, 2001.
- [Brezzi et Fortin, 1991] F. BREZZI et M. FORTIN. *Mixed and hybrid finite element methods*. Springer-Verlag, 1991.
- [Bussac et Reuss, 1985] J. BUSSAC et P. REUSS. *Traité de neutronique*. Hermann Collection enseignement des sciences, 1985.
- [CEA, 2008] CEA. internet. <http://www.cea.fr>, 2008.
- [Chauvet et Nachaoui, 2008] S. CHAUVET et A. NACHAOUI. Application of the multigrid methods for the cauchy problem. Dans *2nd International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications*, Baku, Azerbaijan, june 2008.
- [Chauvet et al., 2007] S. CHAUVET, A. NACHAOUI, A.M. BAUDRON, et J.J. LAUTARD. A multi-scale approach for the neutronic kinetics equation using the mixed dual solver minos. Dans *Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications*, April 15-19 2007.
- [Chauvet et al., 2008] S. CHAUVET, A. NACHAOUI, A.M. BAUDRON, et J.J. LAUTARD. A multi-scale quasi-static method for the neutronic kinetics. Dans *International Conference on the Physics of Reactors*, September 14-19 2008.

- [Dahmani, 1999] M. DAHMANI. *Résolution des équations de la cinétique des réacteurs nucléaires par la méthode nodale mixte duale utilisant le modèle quasi-statique amélioré et implémentation dans le code CRONOS*. PhD thesis, Faculté des sciences de Rabat, Maroc, 1999.
- [Dautray et Lions, 1984] R. DAUTRAY et J.L. LIONS. *Analyse mathématique et calcul numérique*. Masson, 1984. En 9 volumes.
- [Désidéri, 1998] J.-A. DÉSIDÉRI. *Modèles discrets et schémas itératifs*. HERMES, Paris, 1998. Application aux algorithmes multigrilles et multidomaines.
- [Dulla *et al.*, 2008] S. DULLA, E.H. MUND, et Ravetto P.. The quasi-static method revisited. *Progress in Nuclear Energy*, 2008.
- [Guérin, 2007] P. GUÉRIN. *Méthodes de décomposition de domaine pour la formulation mixte duale du problème critique de la diffusion des neutrons*. PhD thesis, Université Paris VI, 2007.
- [Guérin *et al.*, 2007] P. GUÉRIN, A.M. BAUDRON, et J.J. LAUTARD. Domain decomposition methods for core calculations using the minos solver. Dans *Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications*, April 15-19 2007.
- [Hackbusch, 1985] W. HACKBUSCH. *Multigrid Methods and Applications*, volume 4 de *Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [Henry, 1958] A. HENRY. The application of reactor kinetics to the analysis of experiments. *Nuclear Science and Engineering*, 3 :52–70, 1958.
- [INRIA, 2008] INRIA. internet. <http://www.scilab.org>, 2008.
- [Kobayashi, 1990] K. KOBAYASHI. Rigorous derivation of static and kinetic nodal equations for coupled reactors using transport equation. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 28 :389–398, 1990.
- [Langenbuch *et al.*, 1977] S. LANGENBUCH, W. MAURER, et W. WERNER. Coarse-mesh flux expansion method for the analysis of space-time effects in large light water reactor cores. *Nuclear Science and Engineering*, 63 :437–456, 1977.
- [Nédélec, 1986] J.C. NÉDÉLEC. Mixed finite elements in  $\mathbb{R}^3$ . *Numerische Mathematik*, 50 :57–81, 1986.
- [Ott et Meneley, 1969] K.O. OTT et D.A. MENELEY. Accuracy of the quasistatic treatment of spatial reactor kinetics. *Nuclear Science and Engineering*, 36 :402–411, 1969.
- [Planchard, 1995] J. PLANCHARD. *Méthodes mathématiques en neutronique*. Éditions EYROLLES, Collection de la Direction des Études et Recherches d'EDF, 1995.
- [Pomraning, 1993] G.J. POMRANING. Asymptotic and variational derivations of the simplified  $p_n$  equations. *Annals of Nuclear Energy*, 20 :623–637, 1993.
- [Raviart et Thomas, 1977] P.-A. RAVIART et J.M. THOMAS. A mixed finite element method for 2nd order elliptic problems. Dans SPRINGER-BERLIN, éditeur, *Mathematical aspects of finite element methods*, volume 606, pages 292–315. Consiglio Naz. delle Ricerche (C.N.R.), Lecture Notes in Mathematics, 1977.
- [Reuss, 2003] P. REUSS. *Précis de neutronique*. EDP Sciences Collection Génie Atomique, 2003.
- [Roberts et Thomas, 1991] J.E. ROBERTS et J.M. THOMAS. Mixed and hybrid methods. Dans P.G. CIARLER et J.L. LIONS, éditeurs, *Handbook of numerical analysis*, volume 2, Finite element methods (part 1). Elsevier Science, 1991.

- [Sanchez *et al.*, 2003] R. SANCHEZ, C. MAGNAUD, J.J. LAUTARD, D. CARUGE, et OTHERS. Saphyr : A code system from reactor design to reference calculations. Dans *International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications*, 2003.
- [Sanchez *et al.*, 1988] R. SANCHEZ, J. MONDOT, Z. STANKOVSKI, A. COSSIC, et I. ZMIJAREVIC. Apollo ii : a user-oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 1000 :352, 1988.
- [Schneider, 2000] D. SCHNEIDER. *Éléments finis mixtes duaux pour la résolution numérique de l'équation de la diffusion neutronique en géométrie hexagonale*. PhD thesis, Université Paris VI, 2000.
- [Schneider *et al.*, 2003] D. SCHNEIDER, J.C. LE PALLEC, et A.M. BAUDRON. Mixed dual finite element method for the solution of the 3d kinetic simplified pn transport equations. Dans *American Nuclear Society Topical Meeting in Mathematics & Computations*, 2003.
- [Tellier, 1993] H. TELLIER. *Cinétique des réacteurs nucléaires*. INSTN CEA, Collection enseignement, 1993.
- [Wesseling, 1992] P. WESSELING. *An Introduction to Multigrid Methods*. John Wiley & Sons, Chichester, 1992.
- [Yasinsky et Henry, 1965] J.B. YASINSKY et A.F. HENRY. Some numerical experiments concerning space-time reactor kinetics behavior. *Nuclear Science and Engineering*, 22 :171–181, 1965.



**Résumé :** Dans cette thèse et dans le but d'améliorer le ratio temps/précision des calculs de simulation numérique, nous explorons les techniques multi-échelles pour la résolution des équations de la cinétique des réacteurs. Nous choisissons de nous focaliser sur l'approximation mixte duale de la diffusion et sur les méthodes quasi-statiques. Nous introduisons une dépendance spatiale dans la fonction d'amplitude qui ne dépend que de la variable temps dans le contexte quasi-statique standard. Avec cette nouvelle factorisation, nous développons deux problèmes mixtes duaux qui peuvent être résolus avec le solveur MINOS du CEA. Un algorithme est implémenté, effectuant la résolution de ces problèmes définis sur des échelles différentes (en temps et espace). Nous nommons cette approche : la méthode Quasi-Statique Locale. Nous présentons ici cette approche multi-échelle et sa mise en œuvre. Les détails propres aux traitements de l'amplitude et de la forme sont développés et justifiés. Les résultats et performances, comparés à MINOS, sont étudiés. Ils illustrent l'amélioration du ratio temps/précision pour les calculs de cinétique. De plus, nous ouvrons de nouvelles possibilités pour paralléliser les calculs avec MINOS. Pour la suite, nous introduisons aussi quelques pistes d'amélioration avec les échelles adaptatives.

**Mots clés :** neutronique, cinétique, diffusion, mixte dual, quasi-statique, multi-échelle, temps de calcul.

**Summary :** In this PhD thesis and in order to improve the time/precision ratio of the numerical simulation calculations, we investigate multi-scale techniques for the resolution of the reactor kinetics equations. We choose to focus on the mixed dual diffusion approximation and the quasi-static methods. We introduce a space dependency for the amplitude function which only depends on the time variable in the standard quasi-static context. With this new factorization, we develop two mixed dual problems which can be solved with CEA's solver MINOS. An algorithm is implemented, performing the resolution of these problems defined on different scales (for time and space). We name this approach : the Local Quasi-Static method. We present here this new multi-scale approach and its implementation. The inherent details of amplitude and shape treatments are discussed and justified. Results and performances, compared to MINOS, are studied. They illustrate the improvement on the time/precision ratio for kinetics calculations. Furthermore, we open some new possibilities to parallelize computations with MINOS. For the future, we also introduce some improvement tracks with adaptive scales.

**Key words :** neutronic, kinetics, diffusion, mixed dual, quasi-static, multi-scale, computation time.

**Discipline :** Mathématiques Appliquées.

N° : .....