

AEMC : Le meilleur énergétique adaptatif pour la génération des bibliothèques multigroupes

Pietro Mosca

CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA

Encadrant : Claude Mounier

Directeur de thèse : Richard Sanchez

Ecole doctorale

Rayonnements et Environnement

Université Paris Sud XI

Avant-propos



- Cadre : résolution numérique de l'équation de transport en utilisant la représentation **multigroupe** (grandeurs physiques constantes dans un intervalle énergétique dit groupe).

- Objectif : disposer d'une **méthode** générale et mathématiquement formalisée pour **l'obtention des maillages multigroupes optimisés** sur lesquels on construit **les bibliothèques multigroupes**.

- Conditions d'optimisation :
 - nombre de groupes dont dépend le **coût de calcul** ;
 - le champ d'**application neutronique ou filière** de réacteur (RNR, REP, REB ...) ;
 - **méthodes de calcul** des sections efficaces multigroupes.

Plan



Contexte

- représentations des sections efficaces
- les codes de calcul

Développements théoriques

- principes du meilleur AEMC
- modèle physique
- recherche du maillage de référence
- condensation optimisée

Résultats numériques

Conclusions et perspectives

Plan



 Contexte

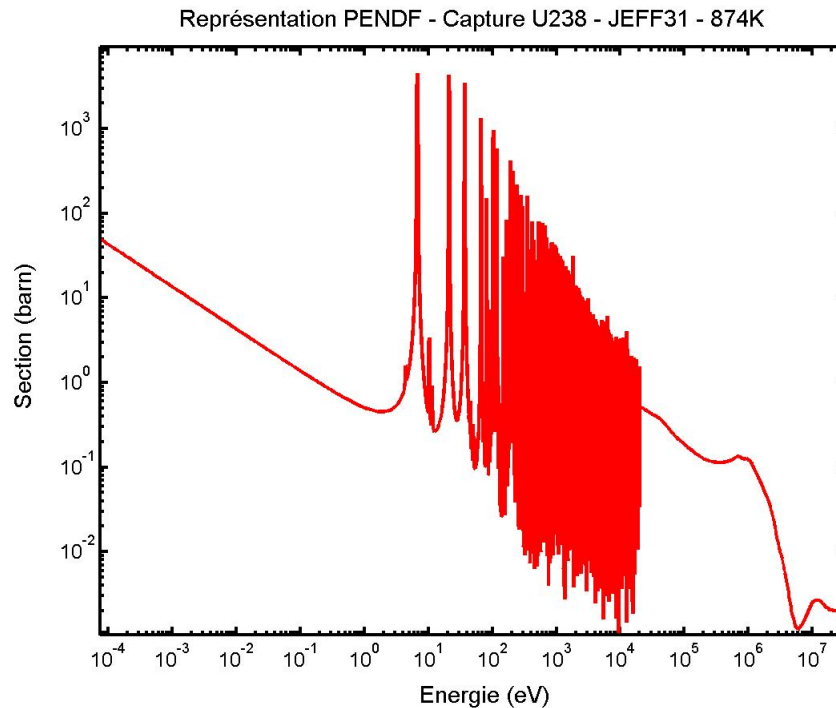
 Développements théoriques

 Résultats numériques

 Conclusions et perspectives



- Les **données nucléaires** caractérisent l'interaction des neutrons avec la matière. Elles sont pour l'essentiel des **sections efficaces**. Plusieurs sortes de représentation discrètes sont utilisées.
- La représentation ponctuelle ou **PENDF** décrit une section efficace par un ensemble de points associés à une loi d'interpolation (linéaire, cubique) dans le domaine entre 10^{-5} eV et 20 MeV et pour toute température.



300 000 valeurs pour une représentation avec une précision de 0.1%

Sections multigroupes et autoprotection (1)

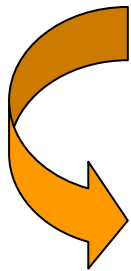


- Représentation constante par morceaux (souvent très condensée avec quelques **centaines de valeurs**). Les sections PENDF sont moyennées sur un maillage énergétique grossier avec une fonction appropriée

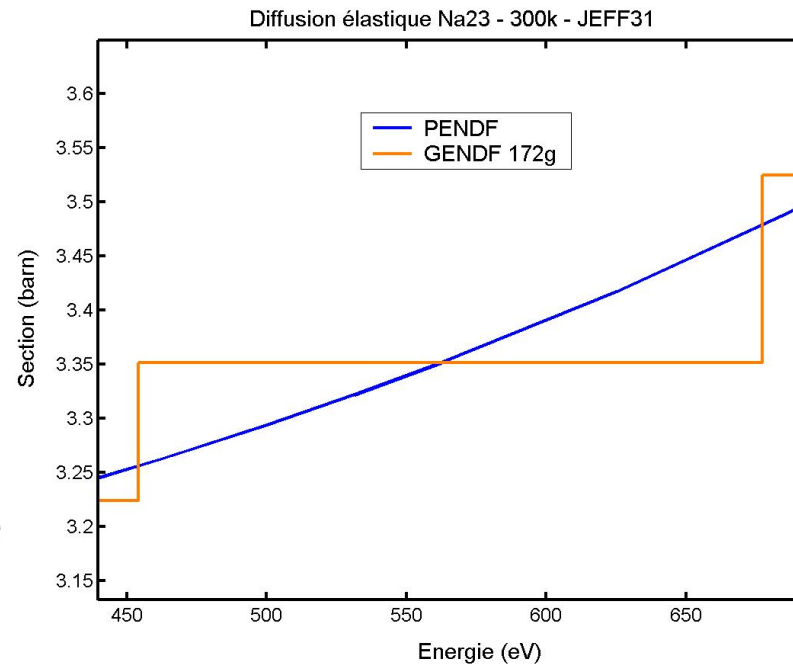
$$\sigma_{\rho,x}^g(\vec{r}) = \frac{\int \sigma_{\rho,x}(E) \Phi(\vec{r}, E) dE}{\Phi^g(\vec{r})}$$

- Pour les sections constantes ou lentement variables on utilise le **spectre macroscopique** du réacteur $w(E)$

$$\sigma_{\rho,x}^g = \frac{\int \sigma_{\rho,x}(E) w(E) dE}{\int w(E) dE}$$



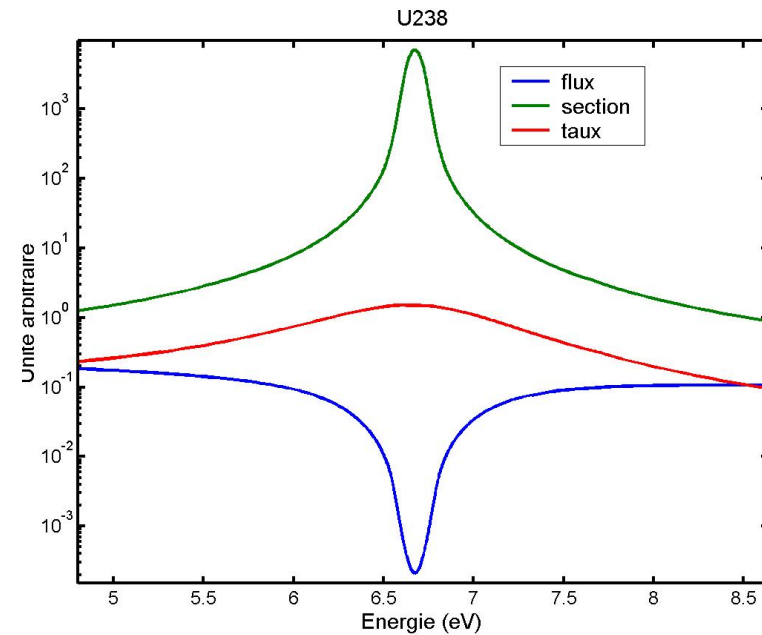
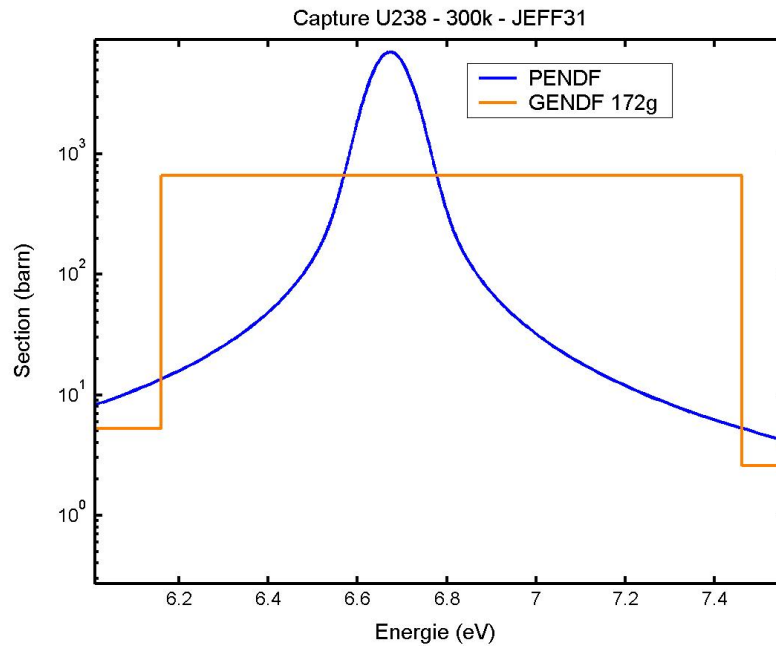
Ces données, appelées **GENDF**, sont les principales composantes d'une **bibliothèque multigroupe**.



Sections multigroupes et autoprotection (2)



Les sections résonnantes demandent un traitement d'**autoprotection** par les codes déterministes



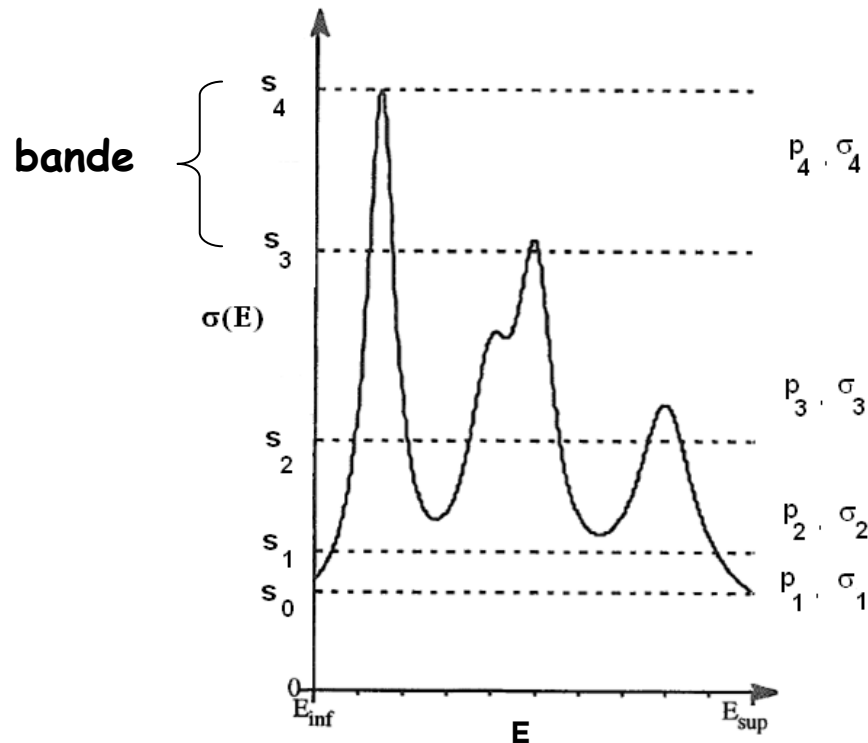
$$\sigma_{\rho,x}^g(\vec{r}) = \frac{\int \sigma_{\rho,x}(E) \phi(\vec{r}, E) dE}{\phi^g(\vec{r})}$$

Flux solution de **l'équation de transport** à source simplifiée (ralentissement pur).

La table de probabilité calculée dans un intervalle énergétique g est définie par :

$$\left\{ (p_i, \sigma_i, \sigma_{\rho,i}), i = 1, N_t \right\}_g$$

- σ_i : paliers de la section efficace totale dans le groupe
 p_i : probabilité que le palier soit atteint
 $\sigma_{\rho,i}$: palier correspondant à la partielle ρ



- 1) Description très **adaptée** d'une section efficace dans le domaine **non résolu**.
- 2) Plusieurs façons de les obtenir. On a utilisé la méthode basée sur la théorie mathématique des moments et de la **quadrature de Gauss**.
- 3) **$N_t=1-20$ par groupe** pour une précision dans leur calcul de 0.01%.



- Deux approches pour la résolution de l'équation linéaire de Boltzmann :
 - Les codes **déterministes multigroupes (APOLLO2)** résolvent cette équation en discrétisant l'espace des phases. Ils utilisent les sections multigroupes et les **tables de probabilité**, calculées sur un maillage énergétique en général large.
 - Les codes **probabilistes Monte Carlo (TRIPOLI4)** fournissent une solution probabiliste en reproduisant statistiquement les interactions neutrons - matière. Ils emploient les sections **PENDF** (domaine résolu) et les **tables de probabilité** (domaine non résolu, calculées sur un maillage fin), pour cela, ils sont utilisés comme **référence numérique**.

Plan



 Contexte

 Développements théoriques

 Résultats numériques

 Conclusions et perspectives



- ✚ Objectif : disposer d'une méthode pour générer des maillages ayant des **finalités d'utilisation différentes** (calcul de conception ou de référence) avec le meilleur compromis coût/précision.
- ✚ Approche : **spécialisation** des maillages par **classe d'applications**.
- ✚ Méthode :
 - 1) Analyse de la **classe d'applications** et déduction d'un ensemble des problèmes simplifiés, reproduisant les caractéristiques neutroniques principales.
 - 2) Création d'une solution multigroupe de référence (le Monte Carlo est inadapté pour calculer des taux de réaction et les variances associées pour une **structure multigroupe quelconque** et les solveurs ponctuels déterministes ne sont **disponibles** que sur des **parties** de l'axe énergétique).
 - 3) Condensation optimale du maillage de référence sur un nombre de groupes donné en utilisant différentes méthodes de mise en groupe (**spectre macroscopique, méthodes d'autoprotection des sous-groupes et Livolant-Jeanpierre**).

- On résout l'équation de transport en milieu homogène infini

$$\Sigma^g \Phi^g = (H\Phi)^g + \frac{1}{\lambda} S^g$$

- Les données multigroupes sont obtenues avec le **spectre macroscopique** ou le **flux d'autoprotection** (sous-groupes).

$$\sigma_{\rho,x}^g = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\int_g \sigma_{\rho,x}(E') w(E') dE'}{\int_g w(E') dE'} \\ \frac{\int_g \sigma_{\rho,x}(E') \frac{w(E')}{\Sigma(E')} dE'}{\int_g \frac{w(E')}{\Sigma(E')} dE'} \approx \frac{\sum_j \sigma_{\rho,x,j} \frac{P_j}{N_x \sigma_{x,j} + \sum_{y \neq x} \Sigma_y^g}}{\sum_j \frac{P_j}{N_x \sigma_{x,j} + \sum_{y \neq x} \Sigma_y^g}} \end{array} \right.$$

- Deux niveaux de calcul :

Référence équivalent au Monte Carlo et effectué sur un maillage multigroupe fin avec une autoprotection en sous-groupes (traitement des **mélanges** avec les **PENDF**).

Approché analogue aux simulations multigroupes actuelles sur un maillage grossier.



- + Raffinement à pas constant en léthargie suivant les principes physiques suivants :
 - localisation des résonances
 - transfert des neutrons

- + Algorithme du maillage SHEM : le découpage multigroupe est obtenu en bornant l'erreur entre les taux de réaction de référence et approchés issus d'un modèle de ralentissement (NR, WR)

$$\left| T_{\rho,x}^g - \sigma_{\rho,x}^g \varphi^g \right| = \varepsilon T_{\rho,x}^g$$

$$T_{\rho,x}^g = \int_g \sigma_{\rho,x}(E) \varphi(E) dE$$

- + Ce modèle est **adapté** au domaine des **résonances résolues**.
 Il est en **défaut** dans les domaines où la **section** est **non résonnante** et le **flux présente des gradients**, provenant de la source de fission et des transferts

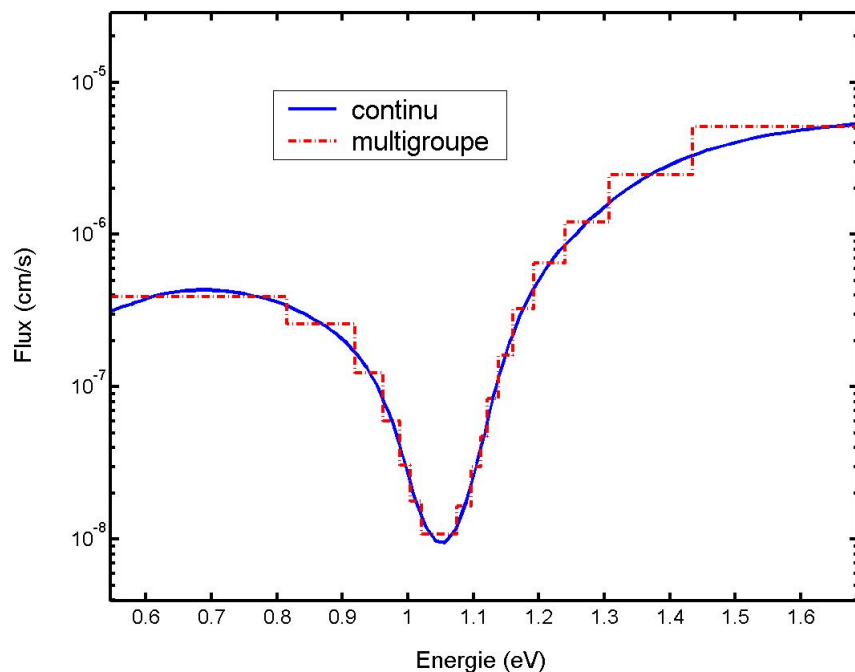
$$\text{si } \sigma_{\rho,x}(E) \approx k \text{ alors } k \left| \varphi^g - \int_g \varphi(E) dE \right| = 0$$

1) Modèle de flux ponctuel

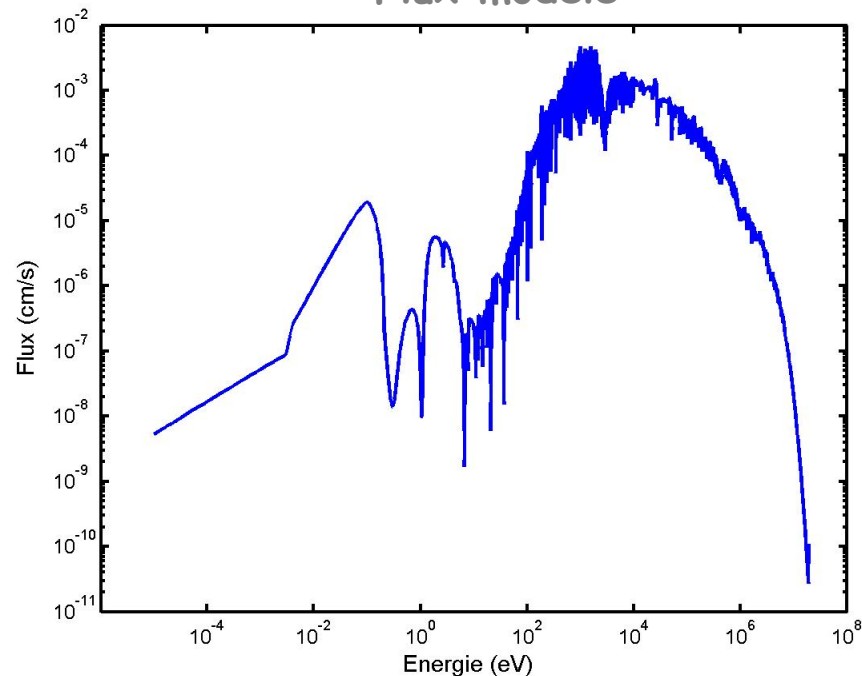


$$\varphi(E) = \frac{\tau(E)}{\Sigma(E)}$$

Adaptation du maillage



Flux modèle



2) Application du critère du flux

$$\max_{\forall E \in g} \left| \frac{\varphi^g}{\varphi(E)} - 1 \right| \leq \varepsilon_f^g$$

$$\varepsilon_f^g = \varepsilon_f \log \left[\frac{T_a / T_a^g}{\max_g (T_a / T_a^g)} \right]$$



Calcul	Δk_{eff}
*7456g autop SG	$-50 \cdot 10^{-5}$
*12695g autop SG	$-52 \cdot 10^{-5}$
*12695g sans autop	$-186 \cdot 10^{-5}$

*calcul AEMC,
référence TRIPOLI4
 $K_{eff} = 1.18869 \pm 35 \cdot 10^{-5}$

=> Nécessité d'une modélisation en sous-groupes pour disposer d'une solution de référence avec un nombre acceptable de groupes.

3) L'hypothèse de **non corrélation des sources et des sections** de la méthode des sous-groupes dans le domaine résolu impose des contraintes sur la largeur moyenne des groupes

$$\left. \begin{array}{l} \langle \sigma_{\rho} \tau \rangle^g \approx \langle \sigma_{\rho} \rangle^g \langle \tau \rangle^g \\ \text{si } \frac{\delta \tau(E)}{\langle \tau \rangle^g} \ll 1, \forall E \in g \end{array} \right\} \Rightarrow \Delta E_g \leq f \frac{\sum_x \overline{\Delta E}_x \Sigma_{sx}(E_g)}{\sum_x \Sigma_{sx}(E_g)} \quad \text{Critère du transfert}$$

4) Un ensemble de maillages est obtenu en utilisant ces deux critères, on garde le plus grossier garantissant une solution **équivalente** au **Monte Carlo** (erreur max sur les taux de réaction **intégraux 0.1%** et par **groupe 1%**).



Chercher les **NG+1** meilleures bornes du maillage de référence à **ng** groupes par **minimisation** des **erreurs** sur les taux de réaction.
Pour chaque maillage testé :

- 1) Les sections, les tables de probabilité et les taux de référence sont dynamiquement condensés partant des données fines ;
- 2) Les équations multigroupes de transport sont résolues ;
- 3) La fonctionnelle définie comme l'**écart quadratique** des taux de réactions de référence et approchés est évaluée :

$$F(\vec{E}) = \sum_{n=1}^{NP} \alpha_n F_n^2(\vec{E}),$$

$$NP = NI \times NR \times NC \times NG,$$

$$F_n(\vec{E}) = \left(\frac{T_{\rho,x,i}^{r,g}(\vec{E})}{T_{\rho,x,i}^r(\vec{E})} - \frac{T_{\rho,x,i}^{a,g}(\vec{E})}{T_{\rho,x,i}^a(\vec{E})} \right), \quad \alpha_n = \frac{T_{\rho,x,i}^r(\vec{E})}{T_{\rho,i}^r(\vec{E})},$$

$$x = 1, NI, \quad \rho = 1, NR, \quad i = 1, NC, \quad g = 1, NG$$



⊕ Contraintes sur le maillage :

$$E_{\text{inf}} = E_{NG+1} < \dots < E_k = E_b < \dots < E_1 = E_{\text{sup}}$$

$$1 \leq N_k \leq NG - N_c + 1$$

$$N_c - N_d + \sum_{k=1}^{N_d} N_k = NG$$

$$1 \leq N_d \leq N_c$$

⊕ L'optimisation est posée comme un problème de minimisation **monocritère combinatoire** :

$$F : Q \rightarrow R_+, \quad F(\vec{E}_{\text{opt}}) = \min F(\vec{E})$$

$$\text{card}(Q) = \prod_{i=1}^{N_d} C_{n_i-1}^{N_i-1}, \quad C_{n_i}^{N_i} = \frac{n_i!}{N_i!(n_i - N_i)!}$$

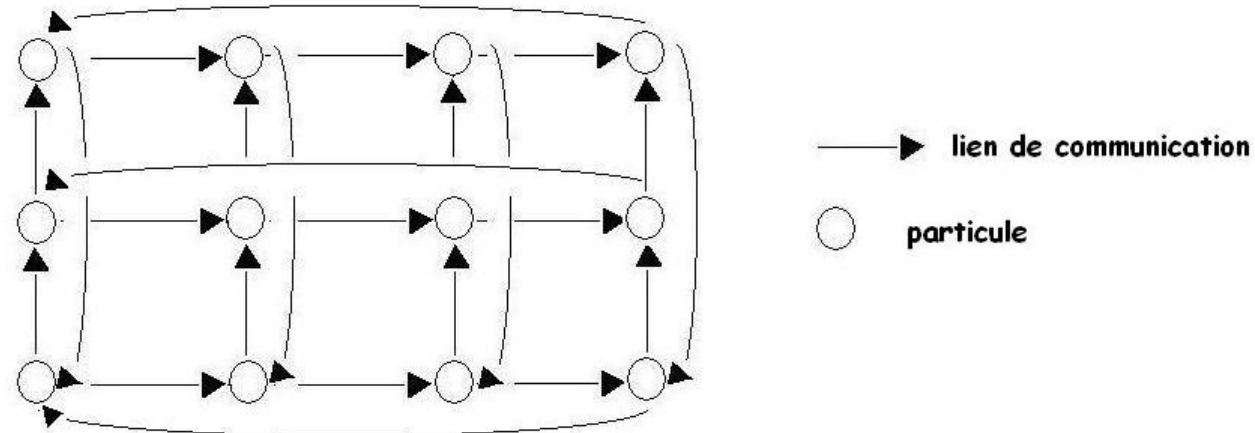
- ⊕ Considérons un maillage fin à 201 groupes et un maillage grossier à 40 groupes, où seulement les extrêmes sont fixés ($N_d=N_c=1$), le nombre d'éléments de l'espace Q vaut approximativement **$2 \cdot 10^{42}$** .
La recherche complète dans l'espace Q est **illusoire**. Pour ce type de problème les **métaheuristiques** offrent le meilleur compromis entre le nombre d'évaluations et la précision de l'optimum trouvé.



- Les métaheuristiques sont inspirées par des phénomènes naturels. Elles s'appuient sur deux principes : l'**exploration** et l'**exploitation**.
- On classe parmi les métaheuristiques différents types de méthodes : essais particuliers, algorithmes génétiques, etc...
- Les **essais particuliers** s'inspirent du comportement coopératif d'un essaim d'abeilles (particules) pour atteindre un site intéressant (solution optimale).
- Le travail d'optimisation a été réalisé en collaboration avec Gilles Arnaud du service SFME du Cea de Saclay.

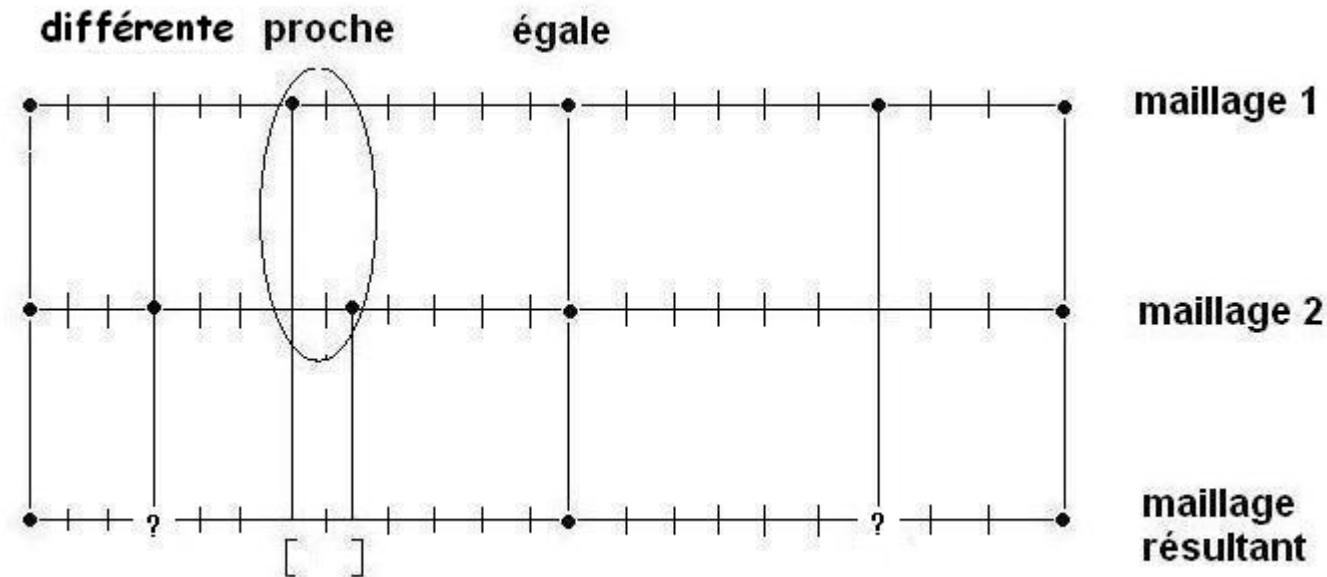


- On fixe un nombre N_{el} de particules. Chacune teste un maillage en combinant sa meilleure performance (**mémoire locale**) et celle de sa meilleure informatrice (**mémoire globale**). Chaque fois qu'il y a une **amélioration** elle envoie le maillage testé à ses **voisins**.
- Le réseau de communication est tel que toute particule reçoit les informations des autres particules, même sans **lien direct**. La structure rectangulaire très **allongée** assure l'indépendance dans l'exploration des particules et un rassemblement dès qu'un optimum global pour l'essaim est trouvé.



La combinaison des maillages est obtenue par l'opérateur de croisement.

Si $NG \leq ng/2$



a) bornes communes gardées (●)

b) échantillonnage parmi les bornes proches ([])

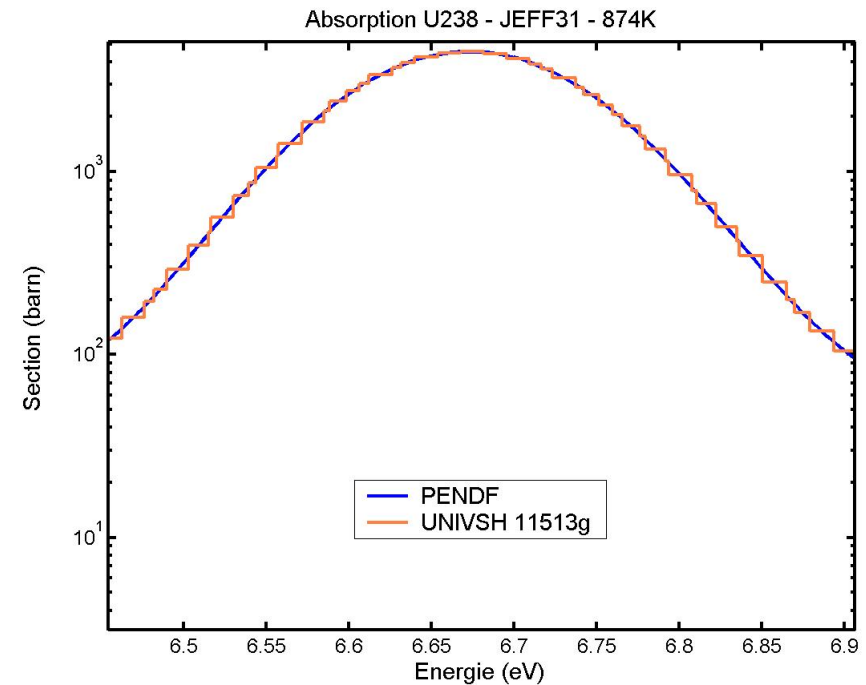
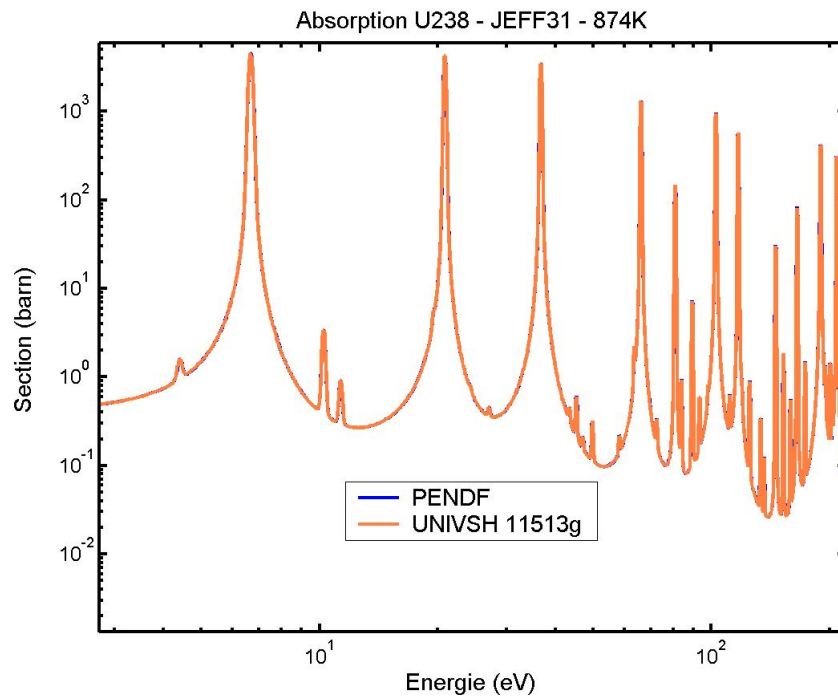
c) échantillonnage parmi les bornes différentes ou au hasard (?)

* Distribution **uniforme** entre les maillages des mémoires locale/globale
 S'il y a une **amélioration**, le maillage résultant est combiné avec le maillage de la mémoire locale, avec une distribution **biaisée** vers le deuxième.

Problème de structure fine avec U238



Calcul de référence à 11513g avec une autoprotection en sous-groupes

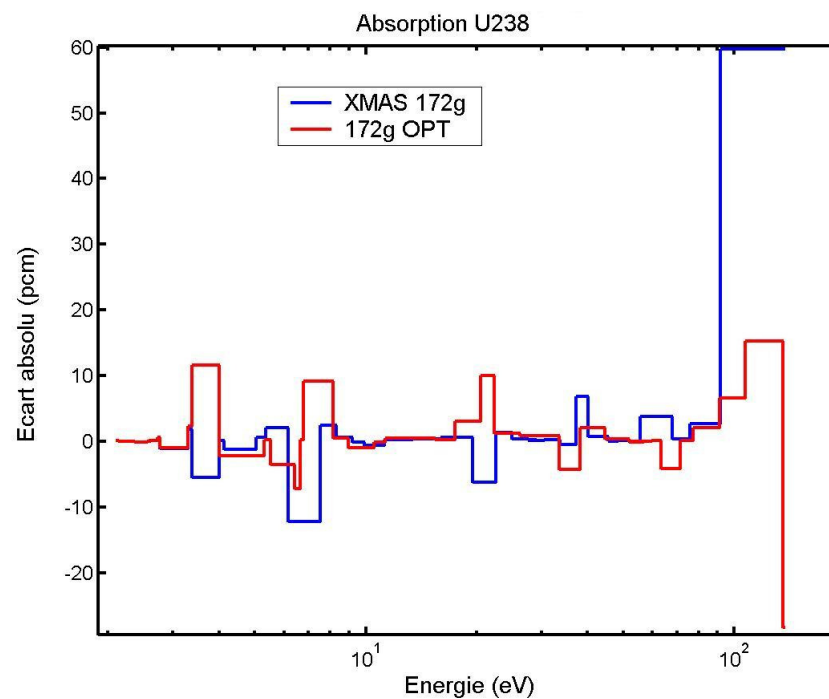
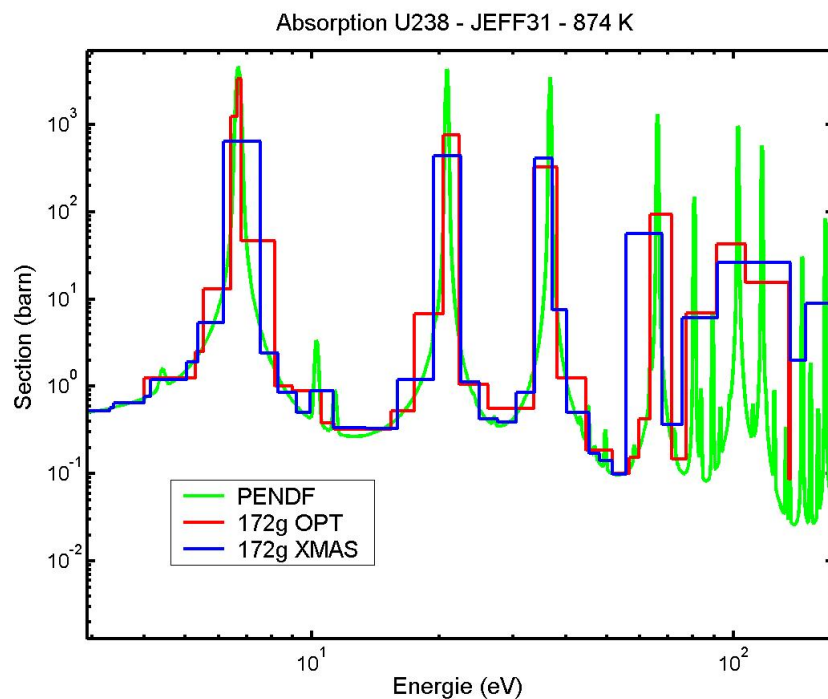




Condensation optimisée dans le domaine entre 4 et 134 eV de 2198 à 27 groupes, correspondant aux groupes du maillage XMAS 172g, avec l'autoprotection Livolant-Jeanpierre.

Calcul	F(E) [%]
172g XMAS	0.049
172g OPT	0.048

card(Q)~10⁶⁰ maillages
nombre d'évaluations 5184





- **Parallélisation de l'algorithme d'optimisation.** Distribution des particules sur N processeurs.
- En parallèle un **nombre supérieur d'itérations qu'en séquentiel** parce que les informations sont reçues et envoyées après une évaluation de toutes les particules. Cette **pénalisation** est limitée, on gagne un **facteur légèrement inférieur à N**.
- Fixons un nombre d'évaluations égal à 15000, temps par évaluation entre 1 et 2 minutes, les temps de simulations seront :
 - en séquentiel 10 - 20 jours
 - en parallèle 1 - 2 jours pour N=12
- Avec une simulation en parallèle on rend gérable l'optimisation de plusieurs maillages.

Plan



 Contexte

 Développements théoriques

 Résultats numériques

 Conclusions et perspectives



Problème hétérogène

Cas homogène

* Criticité

Problème sphérique de Godiva	->	Mélange de noyaux d'Uranium
Problème sphérique de Jezabel	->	Mélange de noyaux de Plutonium
Cellule rapide avec MOX 2040 (refroidissement jusqu'en 2040 avec une teneur en Pu du 14 %)	->	Mélanges obtenus par homogénéisation volumique aux taux de vide de 0,50,100%
Cellule rapide avec MOX 2040 évoluée à 60 GWj/t	->	Mélange homogénéisé des noyaux contribuant à 95% de l'absorption

* Ralentissement

Barre de contrôle B4C	->	Mélange en B4C
Cellule rapide avec uranium appauvri	->	Mélange obtenu par homogénéisation volumique
Source entre 10 - 20 MeV	->	Contrôle des réactions (n,xn), à seuil ...



Nombre de groupes n_g et fonctionnelle $F(E)$ par rapport au Monte Carlo en homogène pour différents critères de flux ε_f et de transfert f .

ng / F(E) [%]				
f	ε_f max [%]			
	50	100	150	300
1	11762/0.383	5487/0.397	3472/0.406	1852/0.589
1/4		9207/0.37	7456/0.373	5940/0.56
1/8			12965/0.365	11447/0.543

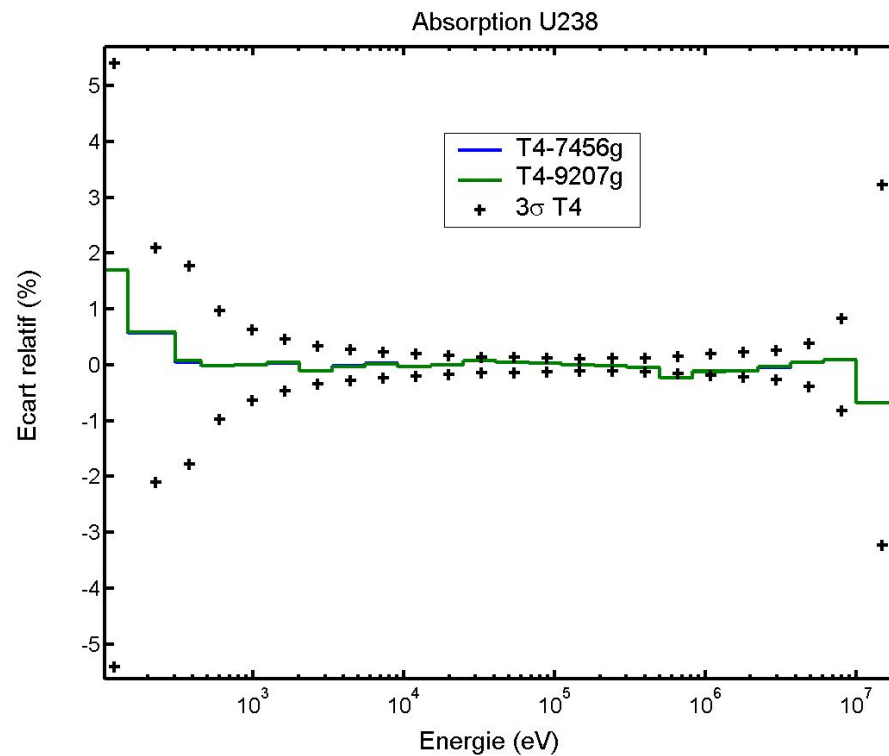
Choix optimal des critères à cause des limites sur le nombre de groupes maximal (~13000 groupes).

Un maillage résultant d'une **combinaison des deux critères** est **plus performant** que celui obtenu en appliquant le seul critère de transfert.



*Calcul AEMC, TV=100%, température 900 K,(.) erreur en unité d'écart type

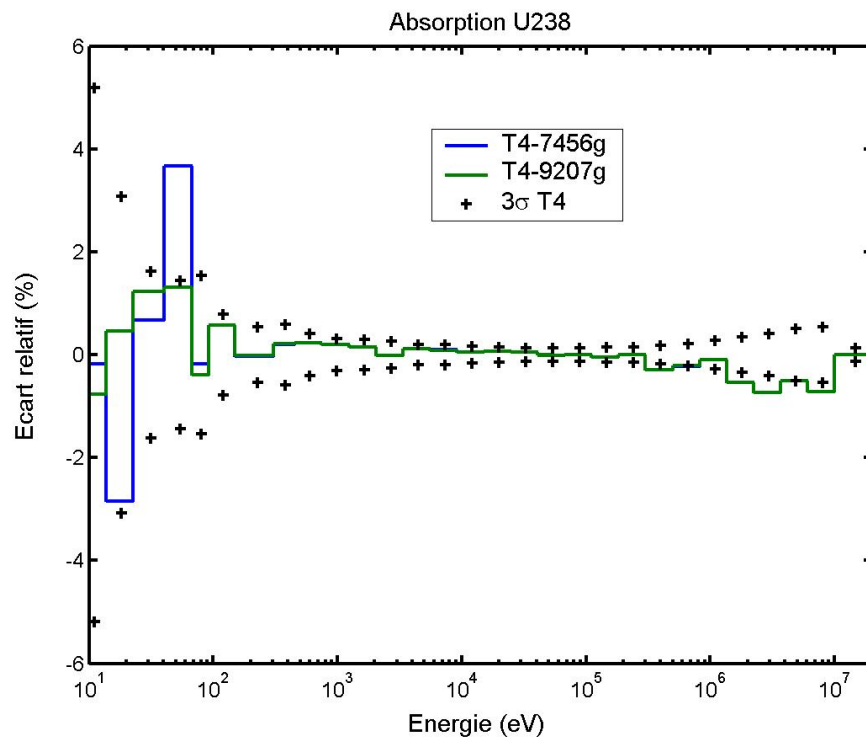
Calcul	Keff	Absorption U238	Absorption Pu239
*7456g	1.18919 (1.42)	0.45062 (-0.29)	0.30752 (-1.09)
*9207g	1.18916 (1.51)	0.45063 (-0.35)	0.30751 (-1.0)
TRIPOLI4	$1.18869 \pm 35 \cdot 10^{-5}$	$0.45057 \pm 17 \cdot 10^{-5}$	$0.30740 \pm 11 \cdot 10^{-5}$





*Calcul AEMC, température 900 K, (.) erreur en unité d'écart type

Réaction	Calcul		
	TRIPOLI4	*7456g	*9207g
Absorption U238	$1.12240 \pm 43 \cdot 10^{-5}$	1.12170 (1.67)	1.12176 (1.43)
Diffusion Fe56	$19.33429 \pm 692 \cdot 10^{-5}$	19.33469 (-0.06)	19.33313 (0.17)
Diffusion Na23	$12.88125 \pm 460 \cdot 10^{-5}$	12.88072 (0.11)	12.88029 (0.21)



Validation du maillage 9207 groupes avec la référence TRIPOLI4.

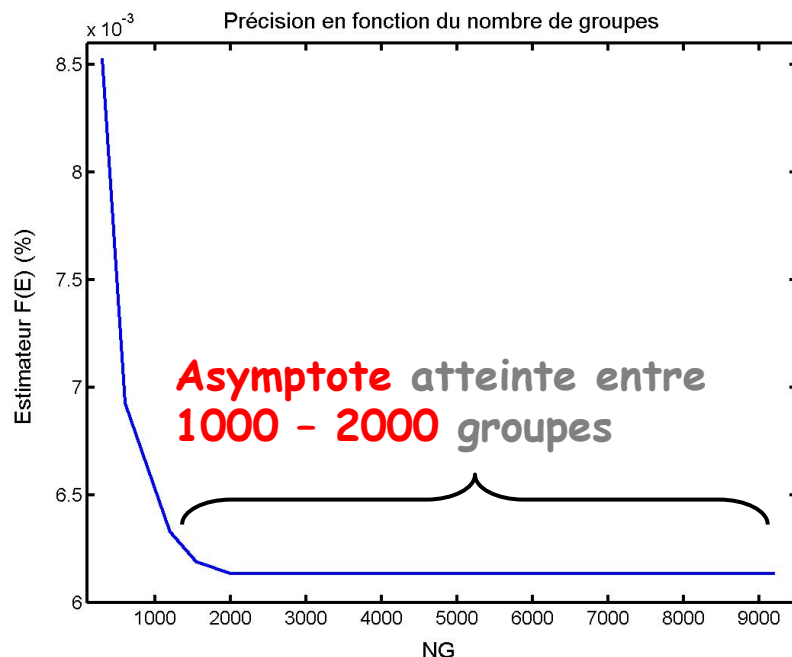


Création d'une série de bibliothèques multigroupes répondant à des besoins différents de **coût et précision**

Caractéristiques des calculs multigroupes approchés :

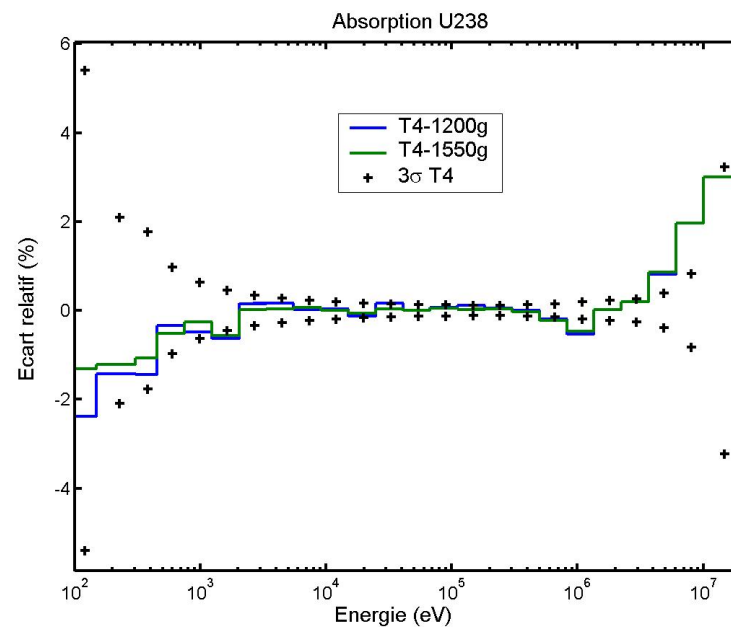
- 1) Autoprotection en **sous-groupes** à **isotope isolé** des noyaux qui contribuent à **90%** de l'**absorption** et de la **diffusion**, à l'exclusion du domaine non résolu ;
- 2) Spectre de fission représenté avec **un macrogroupe** pour le domaine des énergies incidentes des neutrons (source de biais pour $E > 3$ MeV).

Stratégie d'optimisation :
on part du maillage le plus grossier vers le plus fin en fixant les bornes du maillage précédemment optimisé (-> **maillages gigognes**), pour rendre possible des **calculs multi-niveaux**.



Accord avec la simulation TRIPOLI4 en dessous de 3MeV.

Les taux de réaction à 1200 groupes sont à la limite des barres d'erreur.





- Comme l'optimisation est effectuée en milieu homogène infini, il est nécessaire de tester la précision des maillages sur des **problèmes hétérogènes et anisotropes** en comparant les résultats d'APOLLO2 et de TRIPOLI4.

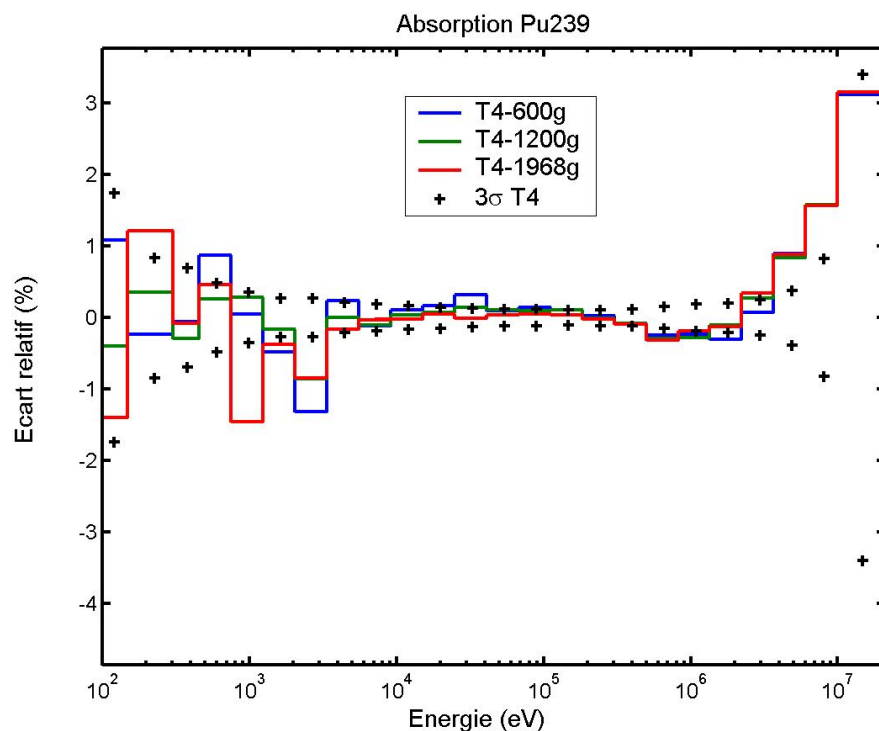
- Sélection d'un ou plusieurs maillages pour les calculs industriels et d'un maillage pour les calculs multigroupes de référence.

- Test :
 - cellule à neutrons rapides chargée en MOX 2040 et refroidie au sodium.



Calcul	keff	Absorption U238	Absorption Pu239
*600g	1.14897 (1.35)	0.43346 (1.75)	0.31424 (0.75)
*1200g	1.15016 (0.79)	0.43364 (0.625)	0.31430 (0.25)
*1968g ECCO	1.15080 (1.09)	0.43331 (2.69)	0.31464 (-2.58)
TRIPOLI4	1.15043 $\pm 34 \cdot 10^{-5}$	0.43374 $\pm 16 \cdot 10^{-5}$	0.31433 $\pm 12 \cdot 10^{-5}$

(.) erreur en unité d'écart type, *calcul APOLLO2 S16/P1 sur une cellule 1D à 7 régions.



Les nouveaux maillages sont **aussi précis** que le maillage 1968 ECCO, voire parfois meilleurs sur certains noyaux (Pu239).



Calcul	Espace mémoire de la bibliothèque multigroupe [Gb]	Temps du calcul de l'autoprotection [s]	Temps du calcul du solveur de flux [s]
600	0.47 (12%)	95.8 (7.8%)	17.4 (19%)
1200	1.33 (35%)	394.1 (32%)	40.5 (44%)
1968 ECCO	3.76 (100%)	1221 (100%)	92 (100%)

Machine utilisée OSF1 (alphaV5.1).

- 1) Réduction importante de **l'espace mémoire** et du **temps** de calcul.
- 2) Les maillages sont optimisés pour les réacteurs rapides, le maillage ECCO 1968 groupes est adapté pour des applications rapides et thermiques. Nécessité d'une comparaison sur la même base de cas pour tirer une conclusion définitive.



- Test sur la cellule rapide vérifie **l'absence de dégradation** de la précision des maillages sur des **problèmes hétérogènes** par rapport aux résultats d'optimisation en milieu homogène infini.
- Un test supplémentaire sur un problème à source représentatif des couvertures fertiles avec un flux très anisotrope montre que les maillages optimisés en homogène permettent de converger vers la solution de référence Monte Carlo à condition d'**adapter l'ordre d'anisotropie** de l'opérateur de transfert.
- On propose un maillage :
 - à **1200** groupes pour les calculs multigroupes de **référence**, étant donné le caractère asymptotique de l'erreur entre 1000 et 9000 groupes ;
 - à **600** groupes pour des calculs **rapides** de dimensionnement.
- Des schémas de calcul utilisant un ou plusieurs de ces maillages sont envisageables.

Plan



 Contexte

 Développements théoriques

 Résultats numériques

 Conclusions et perspectives

Bilan

■ AEMC permet :

- de définir la mise en groupe et les maillages les plus **économés** et **précis** pour une application neutronique donnée ;
 - de générer des bibliothèques multigroupes répondant aux besoins variés des ingénieurs neutroniciens, alliant l'exigence de la **vitesse** et de la **précision** de la simulation.
- Deux nouveaux maillages pour la filière rapide sont proposés.
- Apports théoriques :
- conditions de validité de la méthode des sous-groupes,
 - traitement en mélange avec les PENDF et les tables de probabilité pour les sous-groupes,
 - **extension** de la méthode Livolant-Jeanpierre pour améliorer la précision sur des applications à spectre rapide,
 - prise en compte du **choc inélastique** dans la résolution continue et déterministe de l'équation de ralentissement.

Axes de recherche



- Optimisation des maillages pour la filière thermique, étude approfondie de la transposition hétérogène - homogène.
- Pertinence de l'emploi des bibliothèques multifilières (RNR+thermique) avec une autoprotection combinée Livolant-Jeanpierre et des sous-groupes.
- Actuellement l'optimisation est effectuée en traitant simultanément un ensemble de problèmes neutroniques. A cause des limites dans les ressources informatiques, une **méthode incrémentale** devra être mise en œuvre pour traiter des définitions étendues de classe d'applications.



<< Le hasard pur n'engendre que le chaos. Le déterminisme pur ne crée rien de nouveau. C'est l'association de ces deux facteurs qui donne naissance à la richesse et à la variété. >>

Hubert REEVES
(Poussières d'Etoiles, 1984)