



HAL
open science

Algorithmes de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique.

Robin Delvaux

► **To cite this version:**

Robin Delvaux. Algorithmes de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique.. Physique Numérique [physics.comp-ph]. Institut Polytechnique de Paris, 2022. Français. NNT : 2022IPPAX073 . tel-04105521

HAL Id: tel-04105521

<https://theses.hal.science/tel-04105521>

Submitted on 24 May 2023

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.

NNT : 2022IPPAX073

Thèse de doctorat



Algorithmes de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique

Thèse de doctorat de l'Institut Polytechnique de Paris
préparée à l'École Polytechnique

École doctorale n°626 École doctorale de l'Institut Polytechnique de Paris (EDIPP)
Spécialité de doctorat : Sciences et technologies industrielles

Thèse présentée et soutenue à Saclay, le 5 Octobre 2022, par

Robin Delvaux

Composition du Jury :

Pablo Rubiolo Professeur, LPSC/IN2P3, Grenoble INP	Président du jury
Marc Médale Professeur, IUSTI, Université Aix-Marseille	Rapporteur
Jean Ragusa Professeur, ISC, Texas A&M University	Rapporteur
Olga Mula Professeur, CASA, Eindhoven University of Technology	Examineur
Isabelle Ramière Ingénieur Chercheur, LSC, CEA Cadarache	Examineur
Grégoire Allaire Professeur, CMAP, École Polytechnique	Directeur de thèse
Cyril Patricot Ingénieur Chercheur, LPEC, CEA Saclay	Co-directeur de thèse
David Couyras Chercheur Expert, I27, EDF R&D	Invité

Remerciements

Ce manuscrit est l'aboutissement de trois années de recherche au Laboratoire de Physique et d'Études des Cœurs, au CEA Saclay. Il n'aurait pas pu exister sans toutes les personnes qui m'ont accompagné et soutenu tout au long de ce parcours.

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse, **Grégoire Allaire**, pour son soutien et sa disponibilité. Merci pour la clarté de tes explications et la justesse de tes suggestions. L'autonomie que tu m'as laissée a rendu cette expérience d'autant plus intéressante !

Mille mercis à **Cyril Patricot**, mon encadrant, pour m'avoir proposé ce projet de recherche et m'avoir fait confiance, surtout lors des moments de doute ! Merci pour la liberté que tu m'as laissée, ton aide plus que précieuse et tes nombreuses idées, ton soutien et la rigueur de tes corrections. Merci surtout de m'avoir donné le goût de la multiphysique, j'espère que nous aurons l'occasion de continuer nos discussions, sur un mur d'escalade, en grim pant une falaise, ou ailleurs !

Un merci particulier à **Ansar Calloo**, pour le temps que tu as pris pour m'accompagner dans mon aventure *Andersonesque*, pour tes conseils et pour la vision de la recherche en physique des réacteurs que tu as bien voulu partager avec moi ! J'espère que KAIST entendra encore parler de nous.

Merci à **Roland Lenain**, expert APOLLO3®, sans qui tout aurait été beaucoup plus difficile. Merci pour ta disponibilité, ta bonne humeur malgré mon utilisation approximative de Tuleap et pour m'avoir donné le goût de la programmation !

Merci à toute l'équipe hiérarchique du SERMA pour m'avoir accueilli pour cette thèse : en particulier, merci à **Céline Guenaut** et **Amélie Rouchon** pour votre bienveillance et à **Carole** pour ton efficacité (j'espère que je ne t'aurais pas posé trop de problèmes!).

Merci à tous les membres du SERMA et d'ailleurs qui m'ont aidé et conseillé d'une manière ou d'une autre au cours de ces 3 années : **Jean-Michel Do**, **François Madiot**, **Karim Ammar**, **Antoine Gerschenfeld**, **Yannick Gorsse**... Ce fut un réel plaisir de travailler dans cet environnement de travail bienveillant et stimulant !

Je remercie chaleureusement mes deux rapporteurs, **Marc Médale** et **Jean Ragusa**, pour leur lecture attentive du manuscrit et leur retours très enrichissants. Merci également aux membres de mon jury, **Olga Mula**, **Pablo Rubiolo**, **Isabelle Ramière** et **David Couyras** pour avoir accepté d'examiner mon travail et pour les échanges que nous avons pu avoir.

Parce qu'une thèse n'est possible que si l'on est entouré et soutenu, merci aux camarades thésards qui ont affronté tout cela avec moi :

Nicolas, pour ta bonne humeur communicative, qui pardonne ton goût douteux pour le sel fondu (c'est valable pour toi aussi **François**). On ne se quitte plus depuis Erlangen, je suis persuadé qu'on trouvera un moyen d'être co-bureau à nouveau, camarade !

Nicolas, mais l'autre, pour ta curiosité contagieuse et tes nombreuses histoires, souvent farfelues mais toujours verbeuses comme il faut. À bientôt dans la navette ou ailleurs !

Kenneth, Éméline, Romain, Rodrigue, Arthur, Hunter, David, Matteo, Camillo, Théophile et les autres, sans qui cette thèse et les pauses café qui l'ont rythmée n'auraient pas été les mêmes.

Merci à **Marin**, qui m'a montré qu'une thèse avait effectivement une fin, même si parfois on en doute... Merci pour ça, et pour tout le reste surtout !

Merci aux *copaines* qui se reconnaîtront, pour toutes ces années passées et les nombreuses suivantes ! Une pensée toute particulière à **Jeannou, Bion, Loulou** et **Sarah** : merci d'être vous, et d'être là.

Merci à mes colocataires successifs, confinés ou non, qui ont supporté toutes mes humeurs. Et aux copains d'école, malgré mes trop nombreuses absences.

Merci à ma famille pour leur soutien indéfectible et leur encouragement. Un merci particulier à ma mère surtout, à qui je dois tout et bien plus encore ! Merci d'avoir toujours été présente, et de m'avoir toujours soutenu dans mes choix.

Enfin, merci à **Camille**. D'avoir été là et de m'avoir aidé, même lorsque tu ne t'en rendais pas compte. De m'avoir toujours poussé et accompagné, pour cette thèse ou sur le chemin d'un sommet des Écrins. Merci d'avoir accepté de vivre tout cela par procuration avec moi, et d'avoir autant pris sur toi pendant la dernière ligne droite.

Résumé

L'idée générale motivant la représentation multiphysique d'un système quelconque est de décrire son état de la manière la plus fidèle possible. Cela passe par la prise en compte des dépendances et des contre-réactions existantes entre les différentes disciplines physiques en jeu : ces dernières sont en effet généralement traitées de manière découplée. Cette approche, centrée sur un seul problème physique, introduit donc des simplifications dans les modélisations et peut limiter la représentativité des résultats obtenus. En physique des réacteurs, l'objectif de ce type de simulations multiphysiques est avant tout d'améliorer la précision des études de sûreté qui sont effectuées au Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), à FRAMATOME ou par EDF par exemple. Concrètement, la mise en place de modélisations multiphysiques doit permettre d'augmenter la confiance placée dans leurs résultats, autorisant ainsi à choisir des marges de sûreté moins contraignantes que celles, conservatives, obtenues à partir de modélisations simplifiées. Il s'agit par exemple de rendre compte des aspects neutroniques, thermohydraulique et thermomécanique d'un cœur de réacteur.

L'approche la plus simple pour réaliser ce type de modélisation multiphysique consiste à faire communiquer des solveurs monophysiques distincts et préexistants, chacun étant dédié une partie du problème global. On parle alors de couplage en boîtes noires. Ce type de simulations souffre de limitations en termes de stabilité et de robustesse. Par ailleurs, elles s'accompagnent généralement de temps de calcul importants.

L'objectif de cette thèse est d'explorer les méthodes de couplage envisageables entre des solveurs de neutronique d'une part et de thermohydraulique et thermique d'autre part, dans le cadre de la modélisation de l'état stationnaire d'un cœur de réacteur à eau pressurisée. Une attention particulière est portée à la généralité des algorithmes de couplage étudiés. On s'intéresse également à leur capacité à accélérer la convergence du problème multiphysique ainsi qu'à minimiser le nombre d'itérations monophysiques effectuées par chacun des solveurs.

Après une introduction aux différentes physiques rentrant en jeu dans la description d'un cœur de réacteur ainsi qu'une présentation des algorithmes de couplage usuels entre neutronique, thermohydraulique et thermique, on s'intéresse dans un premier temps à l'optimisation d'un couplage en boîtes noires entre le solveur de neutronique APOLLO3® et le solveur de thermohydraulique et thermique THEDI. L'intérêt de la convergence partielle et des méthodes de type *Residual Balance* pour limiter le temps de calcul total est prouvé. On propose une nouvelle variante de l'*Adaptive Residual Balance*, la méthode du *Dynamic Residual Balance*, qui ne nécessite pas d'étape d'optimisation préalable pour garantir son efficacité. On a ensuite implémenté l'accélération d'Anderson dans le solveur neutronique pour accélérer sa convergence. Cela rend envisageable la mise en place de couplages avec convergence fine. Finalement, on a proposé une approche de couplage hybride, plus intrusive, permettant de garantir la cohérence physique entre les différents

champs physiques intervenants dans ce problème multiphysique. Cela se traduit par un gain en termes de vitesses de convergence multiphysique et monophysique par rapport aux couplages en boîtes noires.

Dans la dernière partie de cette thèse, on cherche à expliquer les différences en termes de vitesses de convergence observées selon la méthode de couplage retenue. On s'intéresse pour cela au cas analytique d'une plaque infinie. Cela nous permet d'apporter des éléments de compréhension quant aux différences observées entre les couplages en boîtes noires et les couplages hybrides. De plus, on démontre le lien entre convergence partielle du solveur neutronique et introduction d'un facteur de relaxation multiphysique.

Abstract

Multiphysics simulations of a given system is required to provide the most realistic description possible. Therefore, it is necessary to report feedback effects and inter-dependencies between the various physical phenomena involved : indeed, the latter are historically modelled in a decoupled fashion. Such single-physics based simulations induces simplifications into the modelling and limits the representativeness of the results obtained. In reactor physics, the end goal of multiphysics simulations is to improve the precision of safety studies, which are carried out by engineers at [CEA](#), [FRAMATOME](#) or [EDF](#). Indeed, by increasing the precision of such studies and reinforcing the confidence in the computational predictivity, multiphysics simulations lead to less stringent safety margins, compared to the conservative ones resulting from simplified simulations. Hence, these coupled computations require neutronic, thermal-hydraulic and thermal-mechanic descriptions of a nuclear reactor core.

The most straightforward approach to perform multiphysics simulation is to use existing single physics solvers, each of these being responsible for modelling parts of the global problem. This scheme is called *black-box* coupling. It suffers from stability and robustness issues and generally comes with important total computational time.

The main goal of this research work is to determine a set of coupling methods between a neutronic code with several solvers for the neutron transport equation, APOLLO3®, and a thermal-hydraulic and thermal code, THEDI, in order to describe core reactor in steady state. One key feature should be their general capacity to deal with numerous types of problem. Their ability in increasing the convergence rate of the multiphysics problem and in minimizing the total number of single-physics iterations is also investigated.

First, a very brief introduction of the phenomenon involved in the description of a reactor core is given, along with a general review of coupling algorithms used between neutronics, thermal hydraulics and fuel heat transfer. Then, we focus on the optimization of a black-box coupling scheme between APOLLO3® and THEDI. Partial convergence of the solvers and *Residual Balance* methods depict satisfactory capabilities in reducing the total computational time. A variant of the *Adaptive Residual Balance*, called the *Dynamic Residual Balance* method, was developed in order to take advantage of these approaches, without having to optimize any case-dependent parameters. We then focus on the implementation of the *Anderson acceleration* in order to improve the convergence of the neutronics eigenvalue problem. Thus, fully converged coupling computation may be achieved, with an acceptable total number of neutronic iterations and reasonable computational time. Finally, an intrusive coupling strategy is proposed : it maintains the consistency between the physical fields during the simulation. Better multiphysics and single-physics convergence rates are obtained compared to black-box coupling.

Further work on pertaining to the theoretical background has been performed on an infinite slab geometry, for a coupling problem between neutronics and thermal-hydraulics. Thanks to those, we proposed theoretical proofs concerning the differences, in terms of convergence rate, observed between the coupling strategies and methods studied. The link between partial convergence of the neutronic solver and the use of a multiphysics damping factor is also investigated.

Glossaire

- BICGStab** BiConjugate Gradient Stabilized method. 41
- C3PO** Collaborative Code Coupling PlatfOrm. 5, 68, 73, 74, 78, 95, 103, 105, 149, 246, 247
- CASL** Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors. 5, 27
- CEA** Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternative. vii, ix, 5, 16, 30, 31, 34, 63, 64, 66, 68, 69, 74, 243, 244, 247
- CFD** Computational fluid dynamics. 31
- DNS** Direct Numerical Simulation. 31
- EDF** Électricité de France. vii, ix, 5, 22, 30, 34, 69, 86
- GMRES** Generalized Minimal RESidual. 41, 42, 49, 50
- INSTN** Institut national des sciences et techniques nucléaires. 26
- IRSN** Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire. 30
- JEFF** Joint Evaluated Fission and Fusion File. xviii, 16
- JFNK** Jacobian Free Newton Krylov. 13, 41–44, 53, 54, 61, 69, 77, 78, 243, 259
- LES** Large Eddy Simulation. 31
- MED** Modèle d'Échange des Données. 68
- MOOSE** Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment. 42
- NNR** Numerical Nuclear Reactor. 5
- OCDE** Organisation de coopération et de développement économiques. 26
- RANS** Reynolds Averaged Navier-Stokes. 31
- REB** Réacteur à eau bouillante. 30
- REP** Réacteur à eau pressurisée. 4, 6, 13, 26, 27, 30, 33, 34, 37, 53, 54, 63, 64, 70, 72, 74, 75, 77, 78, 85, 86, 243
- SERMA** Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées. 64, 66
- VERA-CS** Virtual Environment for Reactor Applications Core Simulator. 4, 27, 34, 42

Table des matières

Remerciements	iii
Résumé	vii
Abstract	ix
Glossaire	xi
Table des matières	xii
Table des figures	xviii
Liste des tableaux	xxii
Introduction générale	1
Introduction à la multiphysique	3
Description multiphysique d'un cœur de REP et enjeux de modélisations	4
Présentation du cadre de la thèse	5
Organisation de la thèse	6
I Enjeux et méthodes liés à la modélisation multiphysique d'un cœur de réacteur à eau sous pression	9
Introduction de la première partie	13
1 Description multiphysique d'un cœur de réacteur à eau sous pression	15
1.1 Description neutronique	16
1.1.1 Établissement de l'équation de transport et du problème critique	16
1.1.2 Stratégies de résolution du problème neutronique	20
1.1.2.1 Méthode Monte-Carlo	20
1.1.2.2 Approche déterministe	20
1.1.3 Méthodes de résolution de la neutronique	22
1.1.3.1 Le problème de diffusion stationnaire	23
1.1.3.2 Le problème SP_N stationnaire	24
1.1.3.3 La méthode de la puissance itérée	25
1.1.4 Les différentes finesses de modélisation neutronique	26
1.2 Description du problème thermohydraulique	27

1.2.1	Rappels de thermohydraulique	27
1.2.1.1	Les équations de Navier–Stokes	27
1.2.1.2	Modèles et lois de fermeture	28
1.2.1.3	Modèles et systèmes d'équations associés	28
1.2.2	Les différentes échelles de simulation thermohydraulique	29
1.3	Evolution isotopique du cœur	31
1.4	Rappels autour du comportement du combustible nucléaire	32
1.4.1	Déformation mécanique du combustible	32
1.4.2	Interaction fluide-structure et interaction gaine-pastille	33
1.4.3	Transfert thermique	33
1.4.4	Exemples de modélisations	34
1.5	Bilan du chapitre : description du problème couplé	34
2	Algorithmes de couplage et état de l'art de la modélisation multiphysique en physique des réacteurs	37
2.1	Méthode du point fixe	38
2.1.1	Présentation de la méthode	38
2.1.2	Conditions générales et pratiques de convergence	39
2.1.3	Point fixe avec relaxation	39
2.1.4	La méthode de Gauss–Seidel en multiphysique des réacteurs	40
2.1.5	La méthode de la sécante	40
2.2	Autour de la méthode de Newton	40
2.2.1	Présentation de la méthode de Newton	40
2.2.2	Méthode de type Jacobian Free Newton–Krylov	41
2.2.2.1	Présentation de la méthode	41
2.2.2.2	Préconditionnement du JFNK	42
2.2.3	Méthodes de type Quasi–Newton	44
2.2.3.1	Méthode de Broyden et méthode de Broyden généralisée	44
2.3	Accélération d'Anderson	46
2.3.1	Présentation générale	46
2.3.2	Lien avec les méthodes de type Quasi–Newton	47
2.3.3	Convergence de la méthode	49
2.3.3.1	Lien avec GMRES	49
2.3.3.2	Convergence locale de la méthode d'Anderson	50
2.3.3.3	À propos de la convergence globale de la méthode d'Anderson	50
2.3.4	Discussions autour de l'implémentation de l'accélération d'Anderson	51
2.3.5	Utilisation de l'accélération d'Anderson dans les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique	53
2.4	Couplages entre solveurs partiellement convergés	55
2.4.1	Introduction de la convergence partielle	56
2.4.2	La convergence partielle comme méthode d'accélération	56
2.4.3	La méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i>	57
2.4.3.1	Principe de la méthode	57
2.4.3.2	Algorithmes	58
2.4.3.3	Utilisation de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> dans la littérature	61
2.4.4	La méthode du <i>Dynamic Residual Balance</i>	61
2.5	Bilan du chapitre	61

3	Mise en place du couplage multiphysique et des cas d'étude	63
3.1	Présentation des solveurs retenus	64
3.1.1	APOLLO3®	64
3.1.1.1	Présentation du code	64
3.1.1.2	Résolution de l'équation de transport MINOS	64
3.1.2	THEDI	66
3.1.2.1	Présentation du code	66
3.1.2.2	Transitoire stabilisé	68
3.1.3	C3PO	68
3.2	Mise en place des différents cas d'étude	69
3.2.1	Échelles de modélisations et définition du point fixe retenu	69
3.2.2	Mini cœur de REP	70
3.2.3	KAIST - Problème 1A	73
3.3	Bilan du chapitre	74
	Conclusion de la première partie	77
II	Optimisation d'un couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique	79
	Introduction de la deuxième partie	83
4	Mise en place d'une méthodologie pour les couplages en boîtes noires	85
4.1	Optimisation du facteur de relaxation et du niveau de convergence partielle	86
4.1.1	Optimisation du facteur de relaxation	86
4.1.2	Mise en évidence du niveau de convergence partielle optimal et du lien avec la relaxation	89
4.1.3	Apport du calcul couplé par rapport aux simulations mono-physiques	94
4.2	Développement d'une méthode de type <i>Residual Balance</i> sans paramètre libre	95
4.2.1	Implémentation de la méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> dans C3PO	95
4.2.2	Mise en évidence de la capacité de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> à contrôler la sur-résolution lors du couplage	96
4.2.2.1	Contrôle de la sur-résolution entre MINOS et THEDI	96
4.2.2.2	Sensibilité et faiblesse de la méthode	97
4.2.3	Développement de la méthode <i>Dynamic Residual Balance</i> et étude de ses performances	100
4.2.3.1	Mise en place de la méthode	100
4.2.3.2	Étude des performances de la méthode	100
4.3	Limites des méthodes d'accélération par rapport à la convergence partielle	105
4.3.1	Implémentation de l'accélération d'Anderson et de la méthode de la sécante dans C3PO	105
4.3.2	Mise en évidence des limites des méthodes d'accélération sans convergence partielle	105
4.3.3	Impact de la convergence partielle sur les méthodes d'accélération	109
4.4	Bilan du chapitre	116

5	Optimisation des couplages en boîtes noires <i>via</i> l'accélération de la résolution du problème à valeur propre dans Minos	119
5.1	Implémentation de l'accélération d'Anderson pour MINOS	120
5.1.1	Définition du point fixe complet à accélérer et implémentation d'Anderson dans MINOS	120
5.1.2	Validation de l'approche et mise en évidence de ses performances	121
5.2	Optimisation de l'implémentation de l'accélération d'Anderson	124
5.2.1	Prise en compte de la linéarité entre la source et le flux dans l'accélération d'Anderson	124
5.2.2	Performance de l'accélération d'Anderson appliquée à la source et répercutée sur le flux	127
5.2.3	Choix retenus dans l'implémentation d'Anderson	129
5.2.4	Optimisation de la stratégie de lancement	129
5.2.4.1	Intérêt du lancement rapide de l'accélération	131
5.2.4.2	Stratégie d'évolution automatique de l'ordre m de l'accélération d'Anderson	131
5.2.5	Impact mémoire de l'accélération d'Anderson	133
5.3	Impact d'une neutronique accélérée sur les couplages en boîtes noires	134
5.3.1	Performance des couplages avec convergence fine	134
5.3.2	Performance des couplages à convergence partielle	139
5.4	Bilan du chapitre	143
6	Méthodologie pour les couplages intrusifs	145
6.1	Développement d'un schéma de couplage intrusif sur le flux neutronique convergé	146
6.1.1	Conservation de la cohérence entre le flux et la nappe de puissance	146
6.1.2	Développement d'un <code>couplerSolverAPI</code>	147
6.1.3	Changement de paradigme	149
6.2	Intérêt de l'approche hybride pour les couplages avec convergence partielle	149
6.2.1	Accélération des couplages hybrides avec Anderson	149
6.2.1.1	Comparaison avec les couplages en boîtes noires	150
6.2.1.2	Optimisation des couplages hybrides avec convergence partielle	155
6.2.2	Introduction des couplages bas niveau	156
6.3	Optimisation des couplages hybrides à convergence fine	158
6.4	Bilan du chapitre	166
	Conclusion de la deuxième partie	169
	III Analyse théorique des différentes stratégies de couplage	173
	Introduction de la troisième partie	177
7	Preuve du lien entre convergence partielle et relaxation multiphysique pour un couplage en boîtes noires entre neutronique et thermohydraulique	179
7.1	Schéma de calcul couplé pour le problème de la plaque infinie	180
7.1.1	Établissement du problème couplé avec contre-réaction entre neutronique et thermohydraulique	180
7.1.1.1	Le problème de transport mono-énergétique pour la plaque infinie	181

7.1.1.2	Définition des contre-réactions entre neutronique et thermohydraulique	182
7.1.1.3	Mise en équation du problème multiphysique avec couplage bas niveau	184
7.1.2	Étude des conditions de convergence pour le couplage bas niveau	185
7.1.2.1	Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage bas niveau	185
7.1.2.2	Conditions générales de convergence du schéma linéarisé	192
7.1.2.3	Apport de la relaxation multiphysique sur la convergence du problème couplé	193
7.2	Lien entre convergence partielle et relaxation dans le cas mono-énergétique	198
7.2.1	Le problème multiphysique de la plaque infinie mono-énergétique avec convergence partielle	198
7.2.2	Établissement du système linéarisé associé au couplage en boîtes noires	199
7.2.2.1	Linéarisation du schéma de couplage en boîtes noires	199
7.2.2.2	Mise en évidence du système régissant les erreurs décomposées en série de Fourier	201
7.2.3	Influence du niveau de convergence partielle et de la relaxation multiphysique sur la convergence du couplage en boîtes noires	205
7.2.3.1	Lien entre convergence partielle et relaxation pour le couplage en boîtes noires	205
7.2.3.2	Réduction du nombre d'itérations multiphysiques <i>via</i> la convergence partielle de l'opérateur neutronique	212
7.3	Bilan du chapitre	215
8	Étude des performances des couplages hybrides entre neutronique et thermohydraulique pour une plaque infinie	217
8.1	Établissement du schéma de couplage hybride sur le flux convergé	218
8.2	Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage hybride	219
8.2.1	Linéarisation du schéma de couplage hybride et décomposition des erreurs en série de Fourier	219
8.2.2	Mise en évidence du système reliant les coefficients des séries de Fourier associées aux erreurs pour le couplage hybride	221
8.3	Étude de la convergence du problème multiphysique	222
8.3.1	Lien entre convergence partielle du solveur neutronique et relaxation hybride	222
8.3.2	Résolution du problème multiphysique avec un couplage hybride	223
8.4	Bilan du chapitre	227
9	Étude de l'influence de l'accélération d'Anderson sur les couplages en boîtes noires et hybride pour la plaque mono-énergétique infinie	229
9.1	Impact de l'accélération d'Anderson sur un couplage en boîtes noires	230
9.1.1	Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage en boîtes noires	230
9.1.2	Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage en boîtes noires	231
9.2	Impact de l'accélération d'Anderson sur un couplage hybride	234
9.2.1	Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage hybride	234
9.2.2	Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage hybride	235

9.3 Bilan du chapitre	238
Conclusion de la troisième partie	239
Conclusion générale	241
Bilan général	243
Principaux apports et enseignements	244
Perspectives	246
Annexes	249
A Établissement des équations SP_N	251
A.1 Établissement des équations 1D	251
A.2 Établissement des équations 3D	253
A.3 Forme diagonalisée et lien avec le problème de diffusion	254
B Méthodes de Krylov et lien avec les méthodes de type JFNK	257
B.1 Introduction aux méthodes de Krylov	257
B.1.1 Principe	257
B.1.2 Procédé d'Arnoldi	257
B.1.3 La méthode GMRES	258
B.2 Lien avec la méthode JFNK	258
B.3 Choix des paramètres de la méthode	259
B.3.1 Choix de ε	259
B.3.2 Précision sur la résolution du système linéaire	259
C Optimisation de la convergence partielle pour le mini-cœur	261
D Généralisation au problème de la plaque infinie couplée à deux groupes d'énergie	263
D.1 Mise en équation du problème couplé de la plaque infinie à deux groupes d'énergie	263
D.1.1 Mise en équation du problème transport à deux groupes d'énergie	263
D.1.2 Schéma de résolution du problème multiphysique	264
D.2 Mise en évidence du système linéarisé pour le problème à deux groupes d'énergie .	265
D.2.1 Établissement du problème linéarisé	265
D.2.2 Décomposition des erreurs en série de Fourier pour le problème à deux groupes d'énergie	265
D.2.3 Mise en évidence du schéma itératif sur les erreurs et généralisation	267
Bibliographie	273

Table des figures

1.1	Section efficace microscopique pour l'uranium 235 et l'uranium 238 en fonction de l'énergie du neutron incident - données issues de la librairie JEFF-3.0	18
1.2	Schéma simplifié des interdépendances entre les différentes physiques entrant en jeu dans la description multiphysique d'un cœur de REP	35
3.1	Description des échelles de modélisation retenues pour la neutronique, thermohydraulique et thermique.	70
3.2	Représentation schématique du problème multiphysique étudié	71
3.3	Carte de chargement du quart nord-est du mini-cœur de REP	72
3.4	Représentation schématique du benchmark KAIST-Problème 1A	73
4.1	Évolution du temps de calcul total en fonction du facteur de relaxation pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST.	87
4.2	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique pour différents facteurs de relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST.	88
4.3	Évolution de du nombre d'itérations neutroniques effectuées par itération multiphysique et du temps de calcul neutronique correspondant.	88
4.4	Évolution du temps de calcul total en fonction du facteur de relaxation pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST et pour différents niveaux de convergence partielle neutronique.	90
4.5	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST et pour différents niveaux de convergence partielle neutronique ($N = 100$ et $N = 50$).	92
4.6	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST et pour différents niveaux de convergence partielle neutronique ($N = 25$ et $N = 20$).	93
4.7	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST pour un niveau de convergence partielle neutronique ($N = 15$).	94
4.8	Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel et l' <i>Adaptive Residual Balance</i> avec $a = 0.1$, en fonction du facteur de relaxation.	97
4.9	Évolution des précisions calculées par la méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> pour les solveurs thermohydraulique et neutronique au cours du calcul multiphysique	98
4.10	Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel et l' <i>Adaptive Residual Balance</i> en fonction du facteur de relaxation, avec $a = 0.1$ pour le mini-cœur et $a = 1$ pour KAIST.	99

4.11	Évolution des précisions calculées par la méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> pour les solveurs thermohydraulique et neutronique au cours du calcul multiphysique pour KAIST et avec $a = 1$	99
4.12	Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel, l' <i>Adaptive Residual Balance</i> et le <i>Dynamic Residual Balance</i> en fonction du facteur de relaxation.	102
4.13	Évolution des précisions neutronique et thermohydraulique calculées par le <i>Dynamic Residual Balance</i> et de l'erreur multiphysique.	104
4.14	Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel avec et sans convergence partielle optimisé, le <i>Dynamic Residual Balance</i> , l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, ainsi qu'avec la méthode de la sécante.	106
4.15	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel ainsi que pour l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante.	107
4.16	Évolution du temps de calcul total en fonction du facteur relaxation, de la méthode de couplage et du niveau de convergence partielle.	110
4.17	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée, pour l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante, avec $N = 100$	112
4.18	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée, pour l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante, avec $N = 50$	113
4.19	Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée, pour l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante, avec $N = 15$	114
5.1	Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, du k_{eff} et de l'erreur sur le k_{eff} , notée ERVP, au cours d'un appel à MINOS.	122
5.2	Évolution de l'erreur sur le k_{eff} et de l'erreur sur la source, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson $m = 2$ appliquées au terme source de fission seulement.	125
5.3	Évolution du temps passé pour la première itération multiphysique du problème 1A de KAIST dans chacune des étapes d'Anderson dans MINOS.	126
5.4	Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, du k_{eff} et de l'erreur sur le k_{eff} , notée ERVP, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson, appliquée sur le vecteur complet ou la source.	128
5.5	Évolution du temps passé pour la première itération multiphysique du problème 1A de KAIST dans chacune des étapes d'Anderson appliquée à la source dans MINOS.	130
5.6	Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson, appliquée à la source, en fonction de l'itération à partir de laquelle Anderson est utilisée.	132

5.7	Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson, appliquée à la source et avec un ordre m évoluant, en fonction de l'itération à partir de laquelle Anderson est utilisée.	133
5.8	Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, et de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique pour différentes stratégies de couplage.	138
5.9	Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, et de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique pour différentes stratégies de couplage, avec convergence partielle fixée à $N = 15$	141
6.1	Représentation schématique des stratégies de couplage en boîtes noires et hybride .	148
6.2	Évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour différentes stratégies de couplage hybride et en boîtes noires, avec convergence partielle fixée à $N = 25$	151
6.3	Évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour différentes stratégies de couplage hybride et en boîtes noires, avec convergence partielle fixée à $N = 15$	152
6.4	Évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour les couplages bas niveaux, comparaison avec le couplage en boîtes noires optimisé	157
6.5	Évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour les couplages hybrides et en boîtes noires avec convergence fine	160
6.6	Évolution pour le mini-cœur de l'écart relatif pour la nappe de puissance entre un couplage hybride et un couplage en boîtes noires équivalent et comparaison avec la nappe de puissance multiphysique solution de référence - première et deuxième itération multiphysique accélérée - première et deuxième itération multiphysique accélérée.	163
6.7	Évolution pour le mini-cœur de l'écart relatif pour la nappe de puissance entre un couplage hybride et un couplage en boîtes noires équivalent et comparaison avec la nappe de puissance multiphysique solution de référence - troisième et quatrième itération multiphysique accélérée - troisième et quatrième itération multiphysique accélérée.	164
6.8	Évolution pour le mini-cœur de l'écart relatif pour la nappe de puissance entre un couplage hybride et un couplage en boîtes noires équivalent et comparaison avec la nappe de puissance multiphysique solution de référence - dernière itération multiphysique.	165
7.1	Repère sphérique et définition des angles retenus	182
7.2	Évolution des fonctions $ \lambda_+(\omega, \alpha) $ et $ \lambda_-(\omega, \alpha) $ en fonction de ω pour différentes valeurs du facteur de relaxation α	196
7.3	Évolution des fonctions $ \lambda_+(\omega, \alpha) $ et $ \lambda_-(\omega, \alpha) $, pour différentes valeurs du facteur de relaxation α - Zoom autour de la fréquence de Fourier fondamentale.	197
7.4	Évolution de $\rho(\omega, \alpha, K)$ en fonction de ω pour différents niveaux de convergence partielle K et pour différentes valeurs du facteur de relaxation α - Zoom sur les premières harmoniques à droite (a)	207
7.5	Évolution de $\rho(\omega_j, \alpha, K)$ et $\Delta(\alpha, K)$ en fonction de α et K pour les 4 premières fréquences de Fourier autorisées $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ et ω_4	209
7.6	Évolution des valeurs propres de $A(\omega, \alpha, K)$ en fonction de K, α et ω	210

7.7	Évolution de la carte des modules pour $A(\omega, \alpha, K)$ en fonction de K , α et ω	211
7.8	Évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques $K_{(n)}$ nécessaires pour converger et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}$ au cours du calcul multiphysique pour la fréquence de Fourier fondamentale ω_1	214
8.1	Évolution de $\rho^A(\omega, \alpha, K)$ et $\rho^B(\omega, \alpha, K)$ en fonction de ω pour différentes valeurs du facteur de relaxation et différents niveaux de convergence partielle K - Zoom sur les premières harmoniques.	224
8.2	Évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques nécessaire pour converger et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}$ au cours du calcul multiphysique pour la fréquence de Fourier fondamentale ω_1	225
8.3	Évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques nécessaire pour converger et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}$ au cours du calcul multiphysique pour la fréquence de Fourier fondamentale ω_1 avec convergence partielle.	226
C.1	Évolution du temps de calcul total en fonction du niveau de convergence partielle neutronique et thermohydraulique pour le mini-cœur.	261

Liste des tableaux

3.1	Critères de convergence relatifs retenus pour le mini-cœur.	72
3.2	Critères de convergence relatifs retenus pour le problème 1A de KAIST.	74
4.1	Nombre d'itérations neutroniques, d'itérations multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur et pour KAIST, pour les cas optimaux de chaque niveau de convergence partielle.	91
4.2	Nombre d'itérations neutroniques et de pas de temps thermohydrauliques pour le mini-cœur et pour le problème 1A de KAIST pour les méthodes de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> et du <i>Dynamic Residual Balance</i>	103
4.3	Nombre d'itérations neutroniques et de pas de temps thermohydrauliques pour le mini-cœur et pour le problème 1A de KAIST pour les méthodes de Gauss-Seidel avec ou sans convergence partielle optimisée et pour l'accélération d'Anderson ainsi que la méthode de la sécante.	108
5.1	Évolution du temps de calcul pour faire converger MINOS en fonction de la méthode d'accélération utilisée dans le solveur SP_N , pour la première itération multiphysique	123
5.2	Évolution du temps de calcul pour faire converger MINOS lorsque l'accélération d'Anderson est appliquée à la source puis répercutée sur le flux.	129
5.3	Nombre d'itérations neutroniques, de pas de temps thermohydrauliques et temps de calcul total pour le mini-cœur en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.	136
5.4	Nombre d'itérations neutroniques, de pas de temps thermohydrauliques et temps de calcul total pour le problème 1A de KAIST en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.	137
5.5	Nombre d'itérations neutroniques, de pas de temps thermohydrauliques et temps de calcul total pour le problème 1A de KAIST en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS, dans le cas d'un niveau de convergence partielle fixé à $N = 15$	142
6.1	Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur en fonction de l'approche et de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.	153
6.2	Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le problème 1A de KAIST en fonction de l'approche et de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.	154
6.3	Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST pour les approches en boîtes noires et les couplages bas niveau.	159

6.4 Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST pour les approches en boîtes noires et hybrides avec convergence fine. 162

Introduction générale

Introduction à la multiphysique

L'immense majorité des systèmes construits et développés par l'Homme est par nature multiphysique, c'est-à-dire que leur modélisation précise fait intervenir différentes disciplines physiques. Dans certains cas, un phénomène particulier domine l'évolution et la caractérisation dudit système, éclipsant de ce fait la nature multiphysique du problème initial. Par exemple, pour déterminer l'intensité du courant électrique parcourant un câble, on peut considérer en première approximation une résistance donnée, fixe et connue pour celui-ci. En réalité, la valeur de cette résistance dépend des transferts thermiques ayant lieu à l'intérieur du câble, puisque la résistivité des matériaux le constituant dépend du champ de température à l'intérieur de ce dernier. La chaleur dégagée par effet Joule du fait du courant parcourant ce câble dépend quant à elle de sa résistance et dudit courant. Supposer constante la résistance du câble est alors une approximation, valable pour certains problèmes, mais limitant la précision du résultat final obtenu sur la valeur de l'intensité du courant.

Historiquement, la modélisation de systèmes complexes était basée sur la résolution d'une série de sous-problèmes monophysiques, qui s'accompagne pour chacun d'eux d'une simplification des autres phénomènes entrant en jeu ainsi que de leurs impacts sur le sous-problème considéré. Cette approche partitionnée était nécessaire du fait de la puissance de calcul disponible limitée et a conduit aux développements de codes de calcul spécialisés, c'est-à-dire dédiés à une discipline physique, voire à simplement un aspect de cette discipline. Elle était par ailleurs suffisante pour étudier un phénomène donné, dès lors qu'étaient correctement soulignées les limites de la modélisation utilisée, et que des marges de sûreté étaient retenues, si nécessaire, pour garantir que le résultat obtenu soit conservatif par rapport à la solution réelle du problème multiphysique initial. À ce titre, cette approche est d'ailleurs toujours pertinente. Mais la conséquence industrielle d'une telle démarche est non négligeable : dans le cas de la modélisation d'une aile d'avion par exemple, cela doit se traduire par des marges de sûreté importantes pour garantir la sécurité des usagers, chaque marge ayant des conséquences économiques. L'interaction fluide-structure est un autre exemple en génie civil, la conception des ponts nécessitant de prendre en compte les courants de vent, qui eux même dépendent de la forme des ponts et sont influencés par leurs éventuels mouvements. La nécessité de réaliser des simulations multiphysiques est ainsi apparue très tôt, dans le but de pouvoir définir des marges de sûreté plus précises et basées sur des modélisations proches de la réalité. Par ailleurs, on ne peut simplement pas concevoir certains systèmes si on n'est pas capable de correctement les modéliser. Au-delà de ces aspects industriels, les simulations multiphysiques permettent également de comprendre et de modéliser plus finement certains phénomènes naturels : on peut citer ici la dynamique du climat, et la prise en compte des boucles de rétro actions positives ou négatives qui la régissent dans des modèles de plus en plus précis, faisant intervenir aussi bien la chimie des océans, et notamment sa salinité et sa température, que la concentration du CO_2 dans l'atmosphère, ou encore les courants océaniques, pour ne citer que quelques-uns des phénomènes à prendre en compte.

L'augmentation des ressources de calcul et la volonté d'améliorer la précision des modélisations de systèmes de plus en plus complexes s'accompagnent d'un intérêt renforcé pour les simulations multiphysiques. Celles-ci peuvent donner lieu au développement d'un code spécifique, directement multiphysique, résolvant alors l'ensemble des équations nécessaires à la description du problème souhaité : on parle d'approche monolithique. Une seconde possibilité consiste à exécuter séquentiellement des codes de calcul préexistants, couvrant chacun une partie des disciplines physiques en jeu dans le problème global : on parle alors de couplage en boîtes noires, puisqu'on utilise tels

quels des solveurs développés initialement pour résoudre des problèmes plus restreints. Si cette approche permet de limiter les nouveaux développements, l'enjeu est alors double : il s'agit de mettre en place des méthodes d'échange d'informations entre les différents codes de calcul couplés, mais aussi des méthodes de couplage permettant de garantir la stabilité générale du schéma de calcul et sa convergence rapide. En effet, on cherche à proposer des méthodes de couplage qui soient génériques et permettent de réaliser un large panel de simulations multiphysiques différentes, sans quoi l'économie en termes de développement par rapport à une approche monolithique est limitée.

Description multiphysique d'un cœur de REP et enjeux de modélisations

La physique des réacteurs vise à décrire et étudier des phénomènes qui sont intrinsèquement multiphysiques et qui ont historiquement été abordés à travers des disciplines distinctes. On se restreint ici aux réacteurs à eau pressurisée (REP), dont le cœur est constitué d'assemblages carrés, d'environ 21 cm de côté, chacun d'entre eux étant constitué de 17×17 crayons combustibles, formés à partir d'un empilement de pastilles de dioxyde d'uranium par exemple, typiquement enrichies en uranium à 4% et entourées d'une gaine en zirconium.

Le fonctionnement général d'un réacteur nucléaire peut être rapidement décrit de la manière suivante : le flux de neutrons interagissant avec le combustible génère de la chaleur, transmise jusqu'au caloporteur, en l'occurrence de l'eau, *via* conduction à travers la pastille de combustible et la gaine en zirconium. Cette chaleur est ensuite extraite par convection forcée à travers les générateurs de vapeur. La chaleur ainsi générée dans le combustible affecte donc inévitablement la température du combustible ainsi que celle de l'eau et sa densité. Les variations de ces champs affectent en retour le flux neutronique, puisque les probabilités d'interaction des neutrons avec la matière dépendent fortement de la température et de la densité de cette dernière. De plus, au fur et à mesure que des réactions nucléaires ont lieu, la composition isotopique du combustible varie, et de nouvelles espèces apparaissent suite à ces réactions. Par ailleurs, le flux neutronique et les conditions d'opérations du réacteur entraînent des déformations mécaniques du combustible. On comprend ici que la physique des réacteurs fait intervenir principalement : la neutronique, qui vise à décrire le comportement et l'évolution de la population de neutrons ; la thermohydraulique, qui vise à décrire la manière dont s'effectuent les écoulements dans le cœur ; et la physique du combustible, qui vise, elle, à décrire l'évolution du combustible soumis au flux neutronique et aux différentes contraintes thermomécaniques. Chacune de ces disciplines a donné lieu aux développements de codes de calcul spécifiques. Du fait des nombreuses interdépendances entre ces physiques, on comprend l'importance des modélisations multiphysiques pour être en mesure de garantir la sûreté du cœur du réacteur, en situation nominale ou accidentelle.

Les exigences de sûreté étant toujours plus élevées, les modélisations multiphysiques doivent permettre de garantir le respect des conditions d'exploitation en toute circonstance. De ce fait, dans le domaine de la multiphysique du réacteur, un effort particulier est fourni ces dernières années dans la mise en place de projets directement multiphysiques et dans le développement des plateformes de couplage qui les accompagnent. Celles-ci doivent faciliter le couplage entre code de calculs préexistants, la plupart du temps de façon modulaire, et ainsi permettre la généralisation des études multiphysiques. On peut citer à ce titre la plateforme *Virtual Environment for Reactor Applications Core Simulator* (VERA-CS) [KCS⁺17, TCS⁺16, KCJ⁺15a], développée par le *Consortium for*

Advanced Simulation of Light Water Reactors (CASL) [SZKT11], dont l'objectif est de réaliser des simulations multiphysiques extrêmement précises, ou encore le projet américano-coréen *Numerical Nuclear Reaction (NNR)* [WSP⁺04]. En France, le projet Réacteur Numérique, mené notamment par le CEA, EDF et FRAMATOME est un autre exemple de projet ayant pour objectif la modélisation multiphysique, ici du réacteur entier, et non simplement du cœur. Ce dernier projet s'appuie sur la librairie de couplage Python Collaborative Code Coupling PlatfOrm (C3PO) [c3p], développée au CEA et permettant la mise en place de couplages entre codes de calcul qui disposent d'une interface respectant une norme commune.

L'enjeu commun à ces différents projets est d'être en mesure de proposer des méthodes de couplage stables et génériques, permettant d'atteindre des temps de calcul acceptables, pour différentes situations nominales ou accidentelles, et ce, à partir d'une même plateforme. Les algorithmes de couplage utilisés doivent être suffisamment efficaces pour qu'on n'ait pas à devoir modifier leurs paramètres en fonction du cas d'étude considéré, tout en garantissant la convergence des simulations couplées en un temps raisonnable. Ainsi, le couplage entre la neutronique et la thermohydraulique étant particulièrement fort, le schéma de couplage utilisé conditionne la performance et la stabilité des simulations multiphysiques. Par exemple, la convergence de l'algorithme de couplage naïf, dit de point fixe, consistant à simplement itérer entre les solveurs neutronique et thermohydraulique, n'est pas garantie, comme souligné par HAMILTON ET AL. dans [Hea13].

Présentation du cadre de la thèse

Comme nous l'apercevons, différentes problématiques coexistent en ce qui concerne les algorithmes de couplage.

1. La première tient à la stabilité des simulations multiphysiques : il s'agit en effet de déterminer des méthodes et stratégies de couplage permettant de faire effectivement converger ces simulations, sans avoir à choisir des valeurs de paramètres particulières, qui seraient dépendantes du cas d'étude considéré. On souhaite ainsi, dans l'idéal, avoir à disposition des algorithmes de couplage permettant de lancer une série de calculs multiphysiques pour différents cœurs de réacteurs par exemple ou encore différentes situations physiques.
2. On cherche par ailleurs à déterminer des stratégies de couplage permettant de minimiser le temps de calcul total, là encore sans avoir à adapter ou optimiser certains paramètres de ces méthodes en fonction du problème considéré.
3. Finalement, une attention particulière est également portée à la capacité de ces méthodes de couplage à réduire le nombre d'itérations, multiphysiques et monophysiques, effectuées par chacun des solveurs couplés. Il s'agit donc *in fine* de s'intéresser à la vitesse de convergence des différents algorithmes de couplage. Ce point n'est pas strictement équivalent au précédent, puisqu'un algorithme de couplage peut permettre de déterminer la solution multiphysique d'un problème donné en un faible nombre d'itérations multiphysiques sans pour autant que cela s'accompagne d'un temps de calcul minimal, si chacune des itérations multiphysiques effectuées se traduit par un coût en temps de calcul important. L'étude de ce point permet par ailleurs de généraliser plus facilement les conclusions de nos travaux.

Dans la suite, on s'intéresse à un sous-problème de la multiphysique des réacteurs : il s'agit de déterminer l'état stationnaire d'un cœur de réacteur d'un point de vue neutronique, thermohy-

draulique et thermique¹. C'est effectivement en stationnaire que les problématiques de vitesse de convergence et de stabilité se posent le plus fortement.

Travail plus amont, mais néanmoins nécessaire, il a également été choisi de proposer dans la mesure du possible un cadre théorique permettant l'étude des différentes stratégies de couplage qui ont été abordées au cours de cette thèse. Cela doit permettre d'apporter des éléments de preuve aux différentes observations faites lorsqu'il s'agit de comparer les performances de tel ou tel algorithme de couplage. Dans la suite, on détaille l'organisation du présent manuscrit.

Organisation de la thèse

Cette thèse est organisée en trois parties distinctes.

La première partie consiste en une introduction aux différents aspects physiques et mathématiques de ce travail. Ainsi, le chapitre 1 introduit le problème multiphysique à résoudre et les différentes modélisations envisageables en neutronique, thermohydraulique et physique du combustible. Le chapitre 2 est consacré aux algorithmes de couplage couramment utilisés en physique des réacteurs. Sont retenues pour la suite la méthode de Gauss–Seidel, avec relaxation multiphysique, la méthode de la sécante et l'accélération d'Anderson, l'ensemble pouvant être utilisé avec ou sans convergence partielle, ainsi que les méthodes de type *Residual Balance*. Finalement, le chapitre 3 définit le point fixe sur la nappe de puissance que l'on cherche à résoudre et dont on souhaite accélérer la convergence. On y présente également les codes de calcul neutronique, APOLLO3®, avec le solveur MINOS, et thermohydraulique/thermique, THEDI, qui sont utilisés dans la suite ainsi que les échelles de modélisation retenues pour chaque discipline. Finalement, deux cas d'étude sont proposés, à savoir un mini-cœur de REP constitué de 5×5 assemblages et un second cœur de réacteur issu d'un benchmark neutronique.

La seconde partie est dédiée à l'étude des algorithmes de couplage précédemment présentés et à leur optimisation. Le chapitre 4 est consacré à l'étude des couplages en boîtes noires. On y met en évidence l'efficacité du contrôle de la sur-résolution entre les solveurs dans la réduction du temps de calcul total. Cela peut passer par l'utilisation de la convergence partielle ou par celle des algorithmes de type *Residual Balance*. À ce titre, la méthode du *Dynamic Residual Balance* est développée, permettant une réduction du temps de calcul total *via* le contrôle des précisions demandées à chacun des solveurs au cours du couplage : il s'agit d'une méthode sans paramètre libre, proposée dans le cadre de cette thèse. On s'intéresse au chapitre 5 à l'accélération du problème à valeur propre neutronique. Pour cela, on implémente l'accélération d'Anderson dans le solveur SP_N de MINOS, ce qui permet de réaliser des couplages avec convergence fine en un nombre d'itérations neutroniques acceptables. Finalement, on propose au chapitre 6 une nouvelle approche pour les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique, plus intrusive puisqu'il s'agit, au niveau multiphysique, d'appliquer directement l'accélération d'Anderson au flux neutronique plutôt qu'à la nappe de puissance. Cela permet ainsi de garantir la cohérence physique entre le flux neutronique, la nappe de puissance et les grandeurs thermohydrauliques et thermique, améliorant de ce fait la vitesse de convergence multiphysique du problème.

La troisième et dernière partie est consacrée à l'analyse théorique des différentes stratégies de couplage étudiées durant la seconde partie. Le chapitre 7 introduit le problème de la plaque

1. On désigne par thermique la restriction de la physique du combustible au calcul de sa température.

infinie pour un cas couplé entre neutronique et thermohydraulique/thermique. La linéarisation du schéma de couplage et l'introduction des séries de Fourier pour les termes linéarisés permettent de mettre en évidence le lien entre convergence partielle du solveur neutronique et relaxation de la méthode de Gauss–Seidel dans le cas des couplages en boîtes noires. Dans le chapitre 8, on propose une comparaison entre ces derniers et les couplages hybrides, pour lesquels on applique simplement une relaxation sur le flux neutronique. Enfin, on introduit dans le chapitre 9 l'accélération d'Anderson sur la nappe de puissance ou sur le flux neutronique, ce qui permet de comparer la structure des systèmes à résoudre, rendant compte des différents schémas de couplage. On propose également des éléments d'explications sur la différence d'efficacité entre les approches hybrides et haut niveau étudiées durant la partie précédente.

Le manuscrit se termine par la présentation de perspectives d'études pour le futur et un rappel des principaux résultats obtenus.

Première partie

Enjeux et méthodes liés à la modélisation multiphysique d'un cœur de réacteur à eau sous pression

Table des matières de la partie I

Introduction de la première partie	13
1 Description multiphysique d'un cœur de réacteur à eau sous pression	15
1.1 Description neutronique	16
1.1.1 Établissement de l'équation de transport et du problème critique	16
1.1.2 Stratégies de résolution du problème neutronique	20
1.1.3 Méthodes de résolution de la neutronique	22
1.1.4 Les différentes finesses de modélisation neutronique	26
1.2 Description du problème thermohydraulique	27
1.2.1 Rappels de thermohydraulique	27
1.2.2 Les différentes échelles de simulation thermohydraulique	29
1.3 Evolution isotopique du cœur	31
1.4 Rappels autour du comportement du combustible nucléaire	32
1.4.1 Déformation mécanique du combustible	32
1.4.2 Interaction fluide-structure et interaction gaine-pastille	33
1.4.3 Transfert thermique	33
1.4.4 Exemples de modélisations	34
1.5 Bilan du chapitre : description du problème couplé	34
2 Algorithmes de couplage et état de l'art de la modélisation multiphysique en physique des réacteurs	37
2.1 Méthode du point fixe	38
2.1.1 Présentation de la méthode	38
2.1.2 Conditions générales et pratiques de convergence	39
2.1.3 Point fixe avec relaxation	39
2.1.4 La méthode de Gauss–Seidel en multiphysique des réacteurs	40
2.1.5 La méthode de la sécante	40
2.2 Autour de la méthode de Newton	40
2.2.1 Présentation de la méthode de Newton	40
2.2.2 Méthode de type Jacobian Free Newton–Krylov	41
2.2.3 Méthodes de type Quasi–Newton	44
2.3 Accélération d'Anderson	46

2.3.1	Présentation générale	46
2.3.2	Lien avec les méthodes de type Quasi-Newton	47
2.3.3	Convergence de la méthode	49
2.3.4	Discussions autour de l'implémentation de l'accélération d'Anderson	51
2.3.5	Utilisation de l'accélération d'Anderson dans les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique	53
2.4	Couplages entre solveurs partiellement convergés	55
2.4.1	Introduction de la convergence partielle	56
2.4.2	La convergence partielle comme méthode d'accélération	56
2.4.3	La méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i>	57
2.4.4	La méthode du <i>Dynamic Residual Balance</i>	61
2.5	Bilan du chapitre	61
3	Mise en place du couplage multiphysique et des cas d'étude	63
3.1	Présentation des solveurs retenus	64
3.1.1	APOLLO3®	64
3.1.2	THEDI	66
3.1.3	C3PO	68
3.2	Mise en place des différents cas d'étude	69
3.2.1	Échelles de modélisations et définition du point fixe retenu	69
3.2.2	Mini cœur de REP	70
3.2.3	KAIST - Problème 1A	73
3.3	Bilan du chapitre	74
	Conclusion de la première partie	77

Introduction de la première partie

L'objectif de cette première partie est d'introduire le problème multiphysique servant de support à cette thèse, à savoir la description d'un cœur de REP, ainsi que les méthodes mathématiques utilisées pour le résoudre.

Dans le chapitre 1, les différentes disciplines physiques qu'il est nécessaire de prendre en considération lorsqu'on souhaite décrire l'état stationnaire d'un cœur de REP sont introduites. Il s'agit de donner les principaux éléments permettant de comprendre les problèmes neutronique et thermohydraulique. On décrit également les principaux phénomènes régissant le comportement du combustible. Cela permet ensuite de décrire le problème multiphysique dans son ensemble et de visualiser les interdépendances ainsi que les contre-réactions entre les disciplines. L'enjeu est également de discuter des différentes échelles de modélisations possibles pour chacune des physiques ainsi que de donner quelques exemples pour chacune d'entre elles.

La description multiphysique de l'état stationnaire d'un cœur de REP peut être vue comme un système d'équations non-linéaires, correspondant aux différentes physiques rentrant en jeu pour un problème donné, qu'on a décrites au chapitre 1. Dans le chapitre 2, on s'intéresse aux méthodes numériques permettant de résoudre de tels systèmes. On y détaille notamment la méthode de Gauss-Seidel, la plus répandue pour réaliser des couplages en multiphysiques. Les méthodes de type Quasi-Newton et celles de type Jacobian Free Newton Krylov (JFNK) sont également introduites. Finalement, l'accélération d'Anderson et les méthodes de type *Residual Balance* sont détaillées. Pour chacune de ces méthodes, on donne des exemples d'utilisation en multiphysique des réacteurs et on met en évidence leurs avantages et potentiels inconvénients en termes de vitesse de convergence, de temps de calcul associé ainsi qu'en termes de facilité d'utilisation et d'implémentation pour un large choix de modélisations en multiphysique des réacteurs.

L'objectif du chapitre 3 est de présenter les cas d'étude multiphysiques utilisés pendant cette thèse : on cherche à ce que ces derniers soient un bon compromis entre temps de calcul, complexité et représentativité des couplages multiphysiques qui sont mis en place en physique des réacteurs. Pour cela, on définit le point fixe que l'on cherche à résoudre et on introduit les codes de calcul neutronique, APOLLO3®, et thermohydraulique et thermique, THEDI, qui seront utilisés : on se limite en effet à la thermique, c'est-à-dire à la restriction de la physique du combustible au calcul de sa température. Enfin, on détaille les deux cas d'étude sur lesquels s'appuie ce travail, à savoir un mini-cœur de REP ainsi qu'un benchmark neutronique, le problème 1A de KAIST, qu'on modifie ici pour le rendre multiphysique.

Chapitre 1

Description multiphysique d'un cœur de réacteur à eau sous pression

Dans ce chapitre, on introduit les différentes physiques rentrant en jeu dans la description d'un cœur de réacteur à eau sous pression. On ne cherche pas à en donner une description exhaustive, mais plutôt à décrire les principaux phénomènes les caractérisant et les enjeux de modélisation sous-jacents. Dans une première section, on présente le problème neutronique ainsi que quelques méthodes de résolution associées et les différentes échelles de modélisation possibles. On fait de même dans une seconde section pour le problème thermohydraulique. On aborde ensuite l'évolution isotopique du cœur du fait du flux neutronique. Ensuite, une brève introduction à la physique du combustible est proposée, pour finalement conclure par une description du problème couplé dans son ensemble.

Sommaire

1.1	Description neutronique	16
1.1.1	Établissement de l'équation de transport et du problème critique	16
1.1.2	Stratégies de résolution du problème neutronique	20
1.1.2.1	Méthode Monte-Carlo	20
1.1.2.2	Approche déterministe	20
1.1.3	Méthodes de résolution de la neutronique	22
1.1.3.1	Le problème de diffusion stationnaire	23
1.1.3.2	Le problème SP_N stationnaire	24
1.1.3.3	La méthode de la puissance itérée	25
1.1.4	Les différentes finesses de modélisation neutronique	26
1.2	Description du problème thermohydraulique	27
1.2.1	Rappels de thermohydraulique	27
1.2.1.1	Les équations de Navier-Stokes	27
1.2.1.2	Modèles et lois de fermeture	28
1.2.1.3	Modèles et systèmes d'équations associés	28
1.2.2	Les différentes échelles de simulation thermohydraulique	29
1.3	Evolution isotopique du cœur	31
1.4	Rappels autour du comportement du combustible nucléaire	32
1.4.1	Déformation mécanique du combustible	32
1.4.2	Interaction fluide-structure et interaction gaine-pastille	33
1.4.3	Transfert thermique	33

1.4.4 Exemples de modélisations	34
1.5 Bilan du chapitre : description du problème couplé	34

1.1 Description neutronique

Dans cette section, l'équation de transport qui rend compte du problème neutronique à résoudre dans un cœur de réacteur à eau sous pression est établie afin d'introduire certains éléments clefs de la neutronique. On ne se propose pas ici de faire une présentation détaillée et complète de cette discipline. L'enjeu est avant tout de comprendre le problème physique posé ainsi que quelques méthodes de résolutions qui sont implémentées dans les solveurs neutroniques développés au CEA et ailleurs. Le lecteur intéressé peut se reporter à [Reu03], [RB85] ou [Com13] pour plus de précisions. Dans un premier paragraphe, on présente donc l'équation de transport régissant la population neutronique à l'intérieur d'un réacteur. On s'intéresse ensuite à la manière dont peut être résolu ce problème de transport. Enfin on présente l'architecture générale des codes de calcul neutronique déterministe et ce que cela implique en termes de modélisation.

1.1.1 Établissement de l'équation de transport et du problème critique

On reprend dans cette partie les explications de [Pat16]. Soit \mathcal{D} un domaine de l'espace quelconque. On cherche à établir l'équation de transport neutronique régissant la population de neutrons à l'intérieur de \mathcal{D} . Le transport neutronique est caractérisé par différentes réactions qui peuvent avoir lieu entre un neutron incident et un atome cible [BG70], à l'intérieur de \mathcal{D} . Une des grandeurs clefs régissant ces interactions est le taux de réaction τ_q^i , c'est-à-dire le nombre d'interactions de type q par seconde et par unité de volume entre des neutrons et un certain type d'isotope i d'un atome cible. En interagissant avec la matière, les neutrons peuvent ainsi :

- être absorbés et donc disparaître ;
- faire une collision, et donc potentiellement changer de direction et de vitesse après le choc ;
- provoquer une fission du noyau composant la matière avec laquelle ils interagissent.

À un temps t et un point d'espace \vec{r} donnés, ce taux d'interaction pour une réaction q dépend de la vitesse V des neutrons et de leur direction de propagation $\vec{\Omega}$. Si on suppose les isotopes immobiles, τ_q^i peut être obtenu comme le produit de la densité angulaire de neutrons $n(t, \vec{r}, V, \vec{\Omega})$, de leur vitesse V , de la densité d'isotope i en \vec{r} qu'on notera C_i et de sa section efficace microscopique $\sigma_{\text{micro } i}$. On a ainsi :

$$\tau_q^i = nVC_i\sigma_{\text{micro } q}^i.$$

La section efficace microscopique introduite est caractéristique de l'isotope considéré. Elle peut être comprise comme étant la surface dudit isotope vue par le neutron incident, qu'on assimile à un point. Elle a donc l'unité d'une surface et s'exprime usuellement en barn, avec $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$. Les sections efficaces microscopiques peuvent être mesurées expérimentalement et ces données expérimentales sont ensuite complétées par des modèles. Elles sont ensuite regroupées dans des bibliothèques de données nucléaires, comme JEFF-3 [SBB⁺09]. Les sections efficaces microscopiques dépendent pour chaque isotope de sa nature, de la vitesse du neutron incident, de la température du milieu, mais aussi du type d'interaction. Pour obtenir le taux de réaction total τ^q pour une réaction q des neutrons évoluant dans un milieu composé d'un ensemble d'isotopes différents, on

doit alors sommer les taux de réaction précédemment introduits :

$$\tau^q := nV \sum_i C_i \sigma_{\text{micro } q}^i = \Sigma_q \psi.$$

Dans cette dernière équation $\Sigma_q := \sum_i C_i \sigma_{\text{micro } q}^i$ est la section efficace macroscopique totale pour la réaction q et $\psi(t, \vec{r}, V, \vec{\Omega}) := n(t, \vec{r}, V, \vec{\Omega})V$ le flux neutronique angulaire (en neutrons.cm⁻².s⁻¹). Contrairement à ce que son nom indique, ce flux est une grandeur scalaire qui dépend de $\vec{\Omega}$ puisque les neutrons se déplacent dans toutes les directions $\vec{\Omega}$.

À chaque collision, la probabilité d'interaction est déterminée au niveau d'énergie du neutron incident. Prenons l'exemple de la probabilité de fission suite à la collision d'un neutron avec un atome d'uranium : celle-ci dépend de la section microscopique de fission. On a donné figure 1.1 l'évolution de cette dernière pour l'uranium 235 et l'uranium 238 en fonction de l'énergie du neutron incident. On observe ainsi sa dépendance à l'énergie du neutron incident, pour les deux isotopes d'uranium considérés. On note au passage que les sections efficaces microscopiques de fission considérées ici sont plus importantes aux faibles niveaux d'énergie, c'est-à-dire dans le domaine thermique, par rapport aux niveaux d'énergie élevés, qu'on appelle domaine rapide. Cela permet de comprendre le principe fondamental de la filière des réacteurs à eau pressurisée : d'une part, l'eau, en ralentissant les neutrons, permet de les thermaliser, augmentant la probabilité de fission et donc de dégagement d'énergie ; d'autre part, l'uranium 235 présente une probabilité de fission plus importante que celle de l'uranium 238, très majoritairement présent à l'état naturel. D'où l'étape d'enrichissement nécessaire dans le cycle du combustible.

Lors d'une fission, un certain nombre de neutrons sont générés immédiatement après la réaction : on parle alors de *neutrons prompts*. Des produits de fission apparaissent également qui, pour certains, sont instables : naturellement, mais plus tardivement, certains d'entre eux vont donc, par décroissance radiative, émettre à leur tour des nouveaux neutrons : on parle alors de *neutrons retardés*. Les produits de fission dont ils sont issus sont nommés des *précurseurs*.

Si on fait l'hypothèse que les neutrons se déplacent en ligne droite entre deux interactions avec la matière, un bilan neutronique permet d'établir l'équation de Boltzmann sous sa forme intégral-différentielle, décrivant l'évolution d'une population de neutrons à un point quelconque \vec{r} du domaine \mathcal{D} considéré :

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{1}{V} \frac{\partial \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t}}_{\text{inertie des neutrons en vol}} + \underbrace{\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{propagation en ligne droite}} + \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{disparition par interaction avec la matière}} = \\ & \underbrace{\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t)}_{\text{changement de direction ou d'énergie par interaction avec un noyau}} \\ & + \underbrace{(1 - \beta) \int_0^\infty dE' \chi_p(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t)}_{\text{production de neutrons prompts par fission}} \\ & + \underbrace{\sum_l \chi_l(\vec{r}, E) \lambda_l C^l(\vec{r})}_{\text{émission de neutrons retardés}} . \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

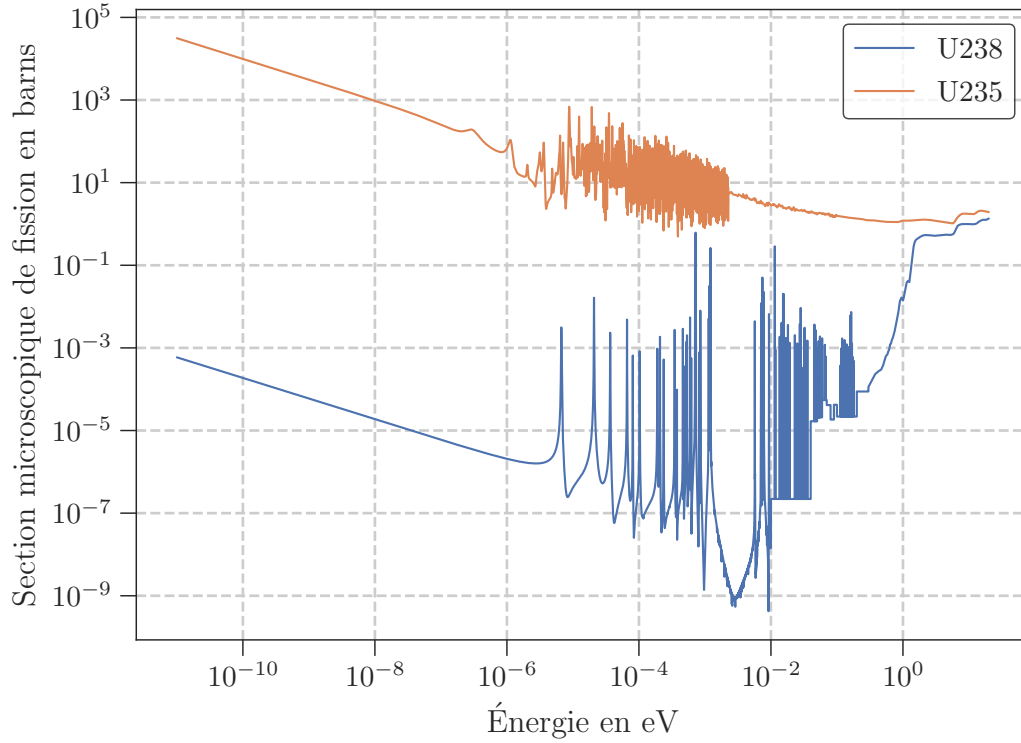


FIGURE 1.1 – Section efficace microscopique pour l’uranium 235 (en orange) et l’uranium 238 (en bleu) en fonction de l’énergie du neutron incident - données issues de la librairie JEFF-3.0

Dans l’équation (1.1.1), on a noté :

- \vec{r} , E , $\vec{\Omega}$, t respectivement les variables d’espace, d’énergie (liée à la vitesse V des neutrons), de direction de propagation et de temps ;
- $\Sigma_t(\vec{r}, E)$ la section efficace macroscopique de réaction totale, somme des sections d’absorption, de diffusion et de fission, au point \vec{r} ;
- $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ la section efficace macroscopique de diffusion de l’énergie E' et de direction $\vec{\Omega}'$ vers l’énergie E et la direction $\vec{\Omega}$ au point \vec{r} ;
- $\nu(E')\Sigma_f(\vec{r}, E')$ le produit du nombre moyen de neutrons émis par fission avec la section efficace macroscopique de fission au point \vec{r} et à l’énergie E' ;
- β_l la proportion de neutrons de fissions émis avec retard par décroissance d’un précurseur de type l ;
- β la somme des β_l ;
- $\chi_p(\vec{r}, E' \rightarrow E)$ la proportion de neutrons prompts issus d’une fission provoquée par un neutron d’énergie E' qui sont d’énergie E au point \vec{r} ;
- $C^l(\vec{r})$ la concentration en précurseurs de type l de neutrons retardés au point \vec{r} ;
- λ_l la constante de décroissance radioactive des précurseurs de type l ;
- $\chi_l(\vec{r}, E)$ la probabilité qu’un neutron retardé émis par un précurseur de type l soit d’énergie E au point \vec{r}

Par ailleurs, cette formulation nous permet d'introduire le flux scalaire, qu'on définit comme :

$$\phi(\vec{r}, E, t) := \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \Omega', t) d\Omega'. \quad (1.1.2)$$

Il s'agit en réalité d'un cas particulier de l'équation de Boltzmann pour lequel un gaz (ici les neutrons) se déplace dans un autre gaz (constitué des nucléides composants la matière du domaine \mathfrak{D}). On doit résoudre cette équation en même temps que les équations de Bateman donnant l'évolution des concentrations C^l de précurseur :

$$\underbrace{\frac{\partial C^l(\vec{r})}{\partial t}}_{\text{inertie}} = \underbrace{-\lambda_l C^l(\vec{r})}_{\text{décroissance radioactive}} + \underbrace{\beta_l \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t)}_{\text{production comme produits de fission}}. \quad (1.1.3)$$

Le système d'équation formé par (1.1.1) et (1.1.3) constitue le problème de transport neutronique à résoudre en tout point du domaine \mathfrak{D} et à chaque instant.

Si on s'intéresse à la forme stationnaire de ces équations, on peut alors facilement injecter les équations de Bateman dans celle de Boltzmann. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \\ &+ \\ &\int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'). \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

On a introduit dans cette dernière équation $\chi(\vec{r}, E' \rightarrow E)$ la proportion de neutrons prompts ou retardés, qui sont issus d'une fission provoquée par un neutron d'énergie E' , et qui ont une énergie E . On peut réécrire l'équation (1.1.4) de la manière suivante :

$$\mathcal{H} \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}) = \mathcal{F} \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}), \quad (1.1.5)$$

où on a introduit l'opérateur de fission \mathcal{F} tel que :

$$\mathcal{F} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) := \int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'),$$

et l'opérateur \mathcal{H} défini par :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &:= \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ &- \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'). \end{aligned}$$

Attardons-nous sur la formulation (1.1.5). Celle-ci n'a *a priori* pas de solution non nulle. En effet, physiquement, une distribution donnée de sections efficaces ne permet pas de maintenir exactement constante une population de neutrons au cours du temps et on a donc généralement pour unique solution stationnaire, triviale, un flux nul. Pour être en mesure de déterminer une solution non nulle, quel que soit l'état réel du système, il est nécessaire de renormaliser le terme de fission par une grandeur appelée coefficient multiplicatif effectif et notée k_{eff} . Ce coefficient représente le nombre moyen de neutrons issus d'une fission provoquant une nouvelle fission. Il permet ainsi de rétablir l'équilibre entre production de neutrons et disparition, garantissant une population

neutronique exactement constante au cours du temps. Cela se fait de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \\ \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \\ + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'). \end{aligned}$$

ou encore :

$$\mathcal{H} \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}) = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \mathcal{F} \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}).$$

On nomme cette formulation “équation critique”. Sous cette forme, on a toujours des couples (k_{eff}, ψ) solutions. Cette dernière équation est un problème à valeurs propres généralisé [Pla95, ABG19] et seule la solution associée à la plus grande valeur propre k_{eff} a un sens physique. C’est en effet la seule qui correspond à un flux neutronique. Le k_{eff} est une grandeur d’intérêt en physique des réacteurs, car elle renseigne sur la stationnarité du système. Si $k_{\text{eff}} = 1$, la population de neutrons est stationnaire et on dit que le système est critique. Si $k_{\text{eff}} > 1$ (respectivement < 1), la population de neutrons croît (respectivement décroît) et on dit que le système est sur-critique (respectivement sous-critique).

On s’intéresse dans la suite aux différentes méthodes de résolution du problème de transport neutronique en général, puis du cas stationnaire plus particulièrement.

1.1.2 Stratégies de résolution du problème neutronique

L’objectif est ici d’introduire les deux types de résolution du problème neutronique, à savoir la méthode de Monte–Carlo et l’approche déterministe.

1.1.2.1 Méthode Monte–Carlo

La méthode de Monte–Carlo est basée sur l’étude d’un grand nombre de trajectoires individuelles de neutrons. Elle s’appuie donc sur une approche probabiliste pour déterminer les caractéristiques macroscopiques d’une population de neutrons donnée. Cette approche est rendue possible notamment du fait de la faible probabilité d’interaction qu’ont ces derniers entre eux aux énergies qui nous intéressent : cela permet de considérer ces neutrons comme indépendant les uns par rapport aux autres. Cette méthode de calcul ne donne lieu qu’à très peu d’approximations et est très précise puisqu’elle permet de rendre compte des interactions particules-matières, à condition de simuler un nombre suffisant de particules. Cela se traduit en contre-partie par un coût en termes de temps de calcul important. Historiquement, les solveurs neutroniques ont donc reposé sur l’approche déterministe.

1.1.2.2 Approche déterministe

L’alternative à la méthode de Monte–Carlo est de résoudre les équations de bilans neutroniques directement, par exemple avec la méthode des éléments finis ou des différences finies. On parle alors d’approche déterministe. Cette dernière donne lieu à différentes simplifications qui sont introduites dans la suite. Elle est moins précise que celle de Monte–Carlo, mais beaucoup plus

rapide en termes de temps de calcul. On se propose de présenter ici les deux étapes principales constitutives d'un calcul déterministe.

Principe La modélisation et la simulation précises d'un cœur de réacteur nucléaire nécessite *a priori* une description fine en angle, énergie et espace pour pouvoir déterminer une solution précise de l'équation de Boltzmann (1.1.1). Le nombre de degrés de liberté régissant un tel système rend complexe le calcul direct d'une distribution de flux. Malgré tout, la puissance de calcul disponible et l'utilisation du calcul massivement parallèle permet aujourd'hui d'envisager cette approche : on peut citer par exemple [KCJ⁺15b] et [JJ09]. Toutefois, l'approche en deux étapes reste la plus répandue : elle repose sur une première étape d'homogénéisation spatiale et de condensation énergétique puis sur la résolution effective en deux ou trois dimensions de l'équation de transport. On peut se rapporter à [BL09, PV93, CCF⁺14] pour des exemples d'utilisation de ce schéma de calcul en deux étapes. On parle respectivement de calcul réseau et de calcul cœur pour chacune d'entre elles. Elles sont détaillées ci-dessous.

Le calcul réseau L'objectif du calcul réseau est de générer des sections efficaces homogénéisées qui seront utilisées pour le calcul cœur. L'enjeu est ainsi de rendre compte d'un problème équivalent, mais en procédant à une réduction de données.

L'idée est alors de résoudre de manière précise le problème de transport sur différentes régions du cœur du réacteur que l'on souhaite modéliser. Pour cela, on tire parti du fait que, du point de vue neutronique, le cœur peut être considéré comme étant une simple répétition de régions caractéristiques. Ces régions peuvent correspondre à un assemblage complet ou bien simplement à un crayon présent dans un de ces assemblages. Pour chacune de ces régions d'intérêts, on résout de manière précise le problème de transport avec une discrétisation fine en énergie, espace et angle et en considérant un milieu infini critique. On répète cela pour un ensemble d'états physiques du cœur, c'est-à-dire pour un ensemble de températures combustible et modérateur, de burn-up ou encore de concentrations en bore. Les sections efficaces utilisées pour ces premiers calculs sont multigroupes, c'est-à-dire données pour un groupe d'énergie g , et sont dites autoprotégées : elles sont ainsi déterminées de telle sorte que, pour chaque groupe d'énergie g , les taux de réactions soient conservés par rapport à la valeur intégrée sur le groupe g du taux de réaction ponctuel, qui est le produit de la section efficace ponctuelle par le flux scalaire solution de l'équation ponctuelle de Boltzmann, donnée par (1.1.1). On ne s'attarde pas sur cette étape d'autoprotection, qui est un fort enjeu de modélisation en neutronique.

Cette première étape permet ensuite, à partir de ce premier flux ainsi calculé, de déterminer des sections efficaces dites homogénéisées pour chaque région et pour un nombre souhaité de groupes d'énergie : on calcule ainsi des sections efficaces équivalentes pour chaque région, qui conservent les taux de réaction définis en section 1.1.1 : on obtient alors une région homogène qui présente des caractéristiques neutroniques équivalentes à la région d'intérêt initiale ; du point de vue des probabilités d'interaction. La conservation du taux de réaction pour une réaction q et un groupe d'énergie g , en un point \vec{r} se traduit par exemple par :

$$\sigma_q^g(\vec{r}) \int_g \phi(\vec{r}, E) dE = \int_g \sigma_q(E, \vec{r}) \phi(\vec{r}, E) dE,$$

où on a noté $\sigma_q(E, \vec{r})$ les sections efficaces autoprotégées qu'on a introduit précédemment et $\sigma_q^g(\vec{r})$ celles homogénéisées qu'on détermine à cette étape. Cette dernière traduit donc *en soi* un aspect

multiphysique : elle permet de rendre compte de la dépendance des sections efficaces homogénéisées aux propriétés matérielles du milieu ou encore à sa température. On parle de bibliothèques de sections efficaces paramétrées. À l'issue du calcul réseau, on a donc à disposition des sections efficaces homogénéisées moyennées en espace et en énergie, et tabulées en fonction de différents paramètres physiques du cœur susceptible de varier et de faire varier le flux. Ce sont ces sections efficaces équivalentes qui sont utilisées pour le calcul cœur.

Le calcul cœur L'objectif de cette étape est de résoudre l'équation de transport en remplaçant dans le cœur chacune des régions d'intérêt précédemment définies par la région homogène déterminée à l'étape réseau. Cela permet donc une réduction du nombre de degrés de liberté, en ayant effectivement réduit la taille de l'espace des phases. Dans la suite, on s'intéresse aux différentes méthodes de résolution pour le problème stationnaire.

1.1.3 Méthodes de résolution de la neutronique

L'objectif de ce paragraphe est de présenter plus en détails deux approximations de l'équation de transport, à savoir la diffusion et la méthode SP_N . Il s'agit en effet d'approches couramment utilisées dans les études de sûreté et on peut par exemple retenir que la chaîne de calculs COCAGNE [CCF⁺17] développée chez EDF propose ces deux méthodes de résolution. On se restreint dans le cadre de ce travail au cas du problème stationnaire. En effet, c'est une première étape essentielle dans la compréhension et l'étude des algorithmes de couplage en multiphysique des réacteurs.

D'une manière générale, les différentes méthodes de résolution de l'équation de transport qui ont été développées par les neutroniciens reposent sur une discrétisation de l'espace des phases \vec{r} , E , $\vec{\Omega}$. Selon les discrétisations retenues, on aura une solution plus ou moins précise et/ou rapide à déterminer.

La discrétisation de la variable d'espace \vec{r} On rend compte de manière plus ou moins précise de la géométrie du réacteur, avec ou sans homogénéisation des régions. Le spectre de discrétisation s'étend d'un réacteur ramené à un point à une description précise de sa géométrie. Un large éventail de discrétisations est envisageable : éléments finis ou différences finis par exemple, à des ordres plus ou moins élevés.

La discrétisation en énergie E Il s'agit de résoudre l'équation de transport stationnaire pour un nombre fini d'énergies. On calcule alors une répartition moyenne des neutrons à l'intérieur de chacun de ces groupes d'énergie. Pour cela, on introduit les flux angulaires associés à chaque groupe d'énergie, à savoir :

$$\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) := \int_g \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE.$$

La discrétisation de l'angle $\vec{\Omega}$ Un des challenges principaux dans la mise en place d'un solveur neutronique réside dans la stratégie de discrétisation de la variable angulaire. Celle-ci peut être traitée *via* différentes stratégies :

- la méthode S_N consiste à choisir un ensemble de N directions discrètes ;
- la méthode P_N consiste à décomposer les dépendances en $\vec{\Omega}$ sur la base des harmoniques sphériques puis de tronquer à un ordre donné N les décompositions obtenues ;

- la méthode SP_N introduit quant à elle des hypothèses sur la régularité de la géométrie qui permettent de simplifier les équations de la méthode P_N en les considérant comme localement 1D ;
- l'approximation de la diffusion consiste à considérer le flux comme isotrope. On s'intéresse alors au flux scalaire, qu'on a défini précédemment en 1.1.2. Les sections de transfert Σ_s sont également supposées isotropes tandis que le terme d'advection $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \Omega')$ se transforme en un terme de diffusion : $-\vec{\nabla} \cdot D(\vec{r}, E) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E)$. Le coefficient de diffusion introduit $D(\vec{r}, E)$ est souvent pris comme étant inversement proportionnel à une section efficace, pour rendre compte du ralentissement des neutrons lors de leur propagation dans la matière.

La discrétisation du temps t Le temps, qu'on ignore dans notre cadre, est quant à lui classiquement découpé en pas de temps de taille finie.

Dans la suite, on se donne un nombre G de groupes d'énergie et on détaille le problème de diffusion et le problème SP_N . Il s'agit d'approximations de l'équation de transport, plus simples et rapides à résoudre et fournissant une solution satisfaisante par rapport à la vraie solution de l'équation de transport.

1.1.3.1 Le problème de diffusion stationnaire

Il existe plusieurs manières d'établir l'équation de la diffusion en partant du problème de transport, qu'on peut retrouver dans [Com13]. On se propose d'en détailler une ici. On fait donc comme hypothèse que le flux est peu dépendant de la direction $\vec{\Omega}$ considérée et qu'on est dans un milieu isotrope. Pour un groupe d'énergie g , on peut alors développer la dépendance angulaire du flux sur la base des harmoniques sphériques et tronquer le développement obtenu au deuxième ordre : il s'agit de considérer la dépendance angulaire du flux comme étant au plus linéaire. On a alors dans le cas stationnaire et en notant la dépendance en énergie par l'indice g du groupe correspondant :

$$\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \phi^g(\vec{r}) + \vec{J}^g(\vec{r}) \cdot \vec{\Omega}.$$

En introduisant cette expression de ψ^g dans l'équation de Boltzmann stationnaire (1.1.4), on obtient :

$$-\vec{\nabla} \cdot \left(D^g(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}) \right) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}) = \sum_{g'} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{\chi^g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}), \quad (1.1.6)$$

avec :

- ϕ^g le flux scalaire du groupe g ;
- D^g le coefficient de diffusion du groupe g défini tel que $\vec{J}^g(\vec{r}) = -D^g(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r})$;
- Σ_t^g la section efficace macroscopique totale (diffusion et absorption) faisant sortir les neutrons du groupe g ;
- $\Sigma_s^{g' \rightarrow g}$ la section efficace macroscopique de diffusion faisant entrer les neutrons du groupe g' dans le groupe g ;
- $\nu \Sigma_f^g$ la section efficace macroscopique de production de neutrons par fissions dans le groupe d'énergie g ;
- χ^g la proportion de neutrons issus d'une fission qui naissent dans le groupe d'énergie g .

Physiquement, la diffusion suppose qu'il y ait peu d'hétérogénéités dans la matière, c'est-à-dire qu'on soit situé loin des interfaces. Elle sous-entend également une section efficace d'absorption faible devant celle de diffusion. Elle permet malgré tout d'obtenir des résultats qualitativement acceptables [Com13] même en dehors de son domaine de validité. On la privilégie en pratique pour des grands systèmes *quasi* homogènes, comme le sont les réacteurs de puissance modélisés avec une homogénéisation des sections efficaces à l'échelle assemblage. Pour les régions proches du bord du réacteur, les résultats seront alors moins précis.

1.1.3.2 Le problème SP_N stationnaire

Cette méthode a été introduite initialement par GELBARD dans [Gel61]. L'objectif affiché était d'améliorer l'opérateur de diffusion pour ainsi gagner en précision sans avoir à implémenter des solveurs S_N ou P_N , plus précis, mais beaucoup plus coûteux. L'idée ayant conduit à l'établissement des équations SP_N est que, localement, l'équation de transport peut être simplifiée en supposant qu'on peut approcher la géométrie du problème par une plaque infinie. Notons malgré tout que la solution ainsi calculée ne converge pas vers la solution exacte lorsqu'on augmente N : il s'agit bien d'une approximation de l'équation de transport. La justification initiale est avant tout empirique et les travaux théoriques justifiant l'intérêt de la méthode ont été développés dans un second temps. On peut par exemple se référer à [Pom93] ou bien à [LMM93b].

En pratique [BL07], les équations SP_N sont dérivées des harmoniques sphériques P_N unidimensionnelles, étendues en trois dimensions, en supposant que les composantes paires du flux (ϕ_p) sont scalaires et les composantes impaires ($\vec{\phi}_i$) sont vectorielles. Alors, pour chaque indice pair ℓ_p et chaque indice impair ℓ_i , il s'agit de développer les sections de transfert entre groupes d'énergie sur les polynômes de Legendre, tronqués à l'ordre N (nécessairement impair), et de résoudre pour chaque groupe d'énergie g et chaque indice $\ell_p = 0, 2, 4, \dots, N-1$ et $\ell_i = 1, 3, 5, \dots, N$:

$$\begin{cases} \ell_p \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_{\ell_p-1}^g + \Sigma_{\ell_p}^g \phi_{\ell_p}^g + (\ell_p + 1) \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_{\ell_p+1}^g & = S_{\ell_p}^g \\ \ell_i \vec{\nabla} \phi_{\ell_i-1}^g + \Sigma_{\ell_i}^g \vec{\phi}_{\ell_i}^g + (\ell_i + 1) \vec{\nabla} \phi_{\ell_i+1}^g & = \vec{S}_{\ell_i}^g \end{cases},$$

où on a noté $\Sigma_{\ell}^g = (2\ell + 1)(\Sigma_t^g - \Sigma_{s\ell}^{g \rightarrow g})$ pour $\ell = 0, 1, 2, \dots, N$, avec Σ_t la section efficace totale, $\Sigma_{s\ell}$ le ℓ -ième moment de Legendre de la section efficace de diffusion et $S_{\ell_p}^g$ et $\vec{S}_{\ell_i}^g$ les composantes paires et impaires de la source. On a par ailleurs :

$$\vec{S}_{\ell_i}^g = \sum_{g' \neq g} \left((2\ell_i + 1) \Sigma_{s\ell_i}^{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{\ell_i}^{g'} \right),$$

et :

$$S_{\ell_p}^g = \sum_{g' \neq g} \left((2\ell_p + 1) \Sigma_{s\ell_p}^{g' \rightarrow g} \phi_{\ell_p}^{g'} \right) + \delta_{\ell,0} \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi^g \sum_{g'} \left(\nu \Sigma_f^{g'} \phi_{\ell_p}^{g'} \right),$$

avec χ le spectre de fission, ν le nombre moyen de neutrons émis par fission et Σ_f la section efficace de fission. Il s'agit au final de résoudre un système de type :

$$\begin{cases} T_i \vec{\phi}_i + H \vec{\nabla} \phi_p & = \vec{S}_i \\ H^T \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i + T_p \phi_p & = S_p \end{cases}, \quad (1.1.7)$$

où on a noté :

- $T_i = \text{diag}(T_i^1, T_i^2, \dots, T_i^G)$ la matrice diagonale impaire disparition pour laquelle on a introduit les $T_i^g = \text{diag}(\Sigma_1^g, \Sigma_3^g, \dots, \Sigma_N^g)$;
- $T_p = \text{diag}(T_p^1, T_p^2, \dots, T_p^G)$ celle paire, avec $T_p^g = \text{diag}(\Sigma_0^g, \Sigma_2^g, \dots, \Sigma_{N-1}^g)$;
- $\phi_p = (\phi_p^1, \phi_p^2, \dots, \phi_p^G)^{\mathbf{T}}$ les vecteurs des composantes paires du flux, pour lesquels on a introduit les $\phi_p^g = (\phi_0^g, \phi_2^g, \dots, \phi_{N-1}^g)$;
- $\vec{\phi}_i = (\vec{\phi}_i^1, \vec{\phi}_i^2, \dots, \vec{\phi}_i^G)^{\mathbf{T}}$ les vecteurs des composantes impaires du flux, pour lesquels on a introduit $\vec{\phi}_i^g = (\vec{\phi}_1^g, \vec{\phi}_3^g, \dots, \vec{\phi}_N^g)$;
- $S_p = (S_p^1, S_p^2, \dots, S_p^G)^{\mathbf{T}}$ le vecteur des composantes paires de la source, pour lequel on a introduit les $S_p^g = (S_0^g, S_2^g, \dots, S_{N-1}^g)$;
- $\vec{S}_i = (\vec{S}_i^1, \vec{S}_i^2, \dots, \vec{S}_i^G)^{\mathbf{T}}$ le vecteur des composantes impaires de la source, pour lequel on a introduit les $\vec{S}_i^g = (\vec{S}_1^g, \vec{S}_3^g, \dots, \vec{S}_N^g)$;
- $H = (h_{i,j})$ la matrice de couplage entre les composantes paires et impaires, avec pour définition des $h_{i,j} = (2i-1)\delta_{i,j} + 2i\delta_{i+1,j}$, pour $1 \leq i, j \leq (N+1/2)$

Le lecteur intéressé peut se référer à l'annexe A pour des éléments de preuve concernant l'établissement des équations SP_N .

On peut, pour finir, souligner l'intérêt de l'approche SP_N : l'implémentation de la méthode permet de disposer à la fois d'un solveur de diffusion, correspondant au cas SP_1 et d'un solveur SP_N permettant d'améliorer l'approximation de la diffusion en termes de précision de calcul pour un surcoût limité en choisissant $N = 3$ ou $N = 5$ par exemple par rapport à la méthode P_N .

1.1.3.3 La méthode de la puissance itérée

La résolution de (1.1.6) ou encore de (1.1.7), qui pour $N = 1$ s'apparente à un problème de diffusion stationnaire, se fait par la méthode de la puissance itérée, qui permet de déterminer la valeur propre dominante d'un problème à valeur propre. Il s'agit dans notre cas de celle correspondant au flux neutronique. Dans chacun des cas, le problème à valeur propre peut se ramener à un problème du type :

$$\mathcal{D}\phi = \mathcal{T}\phi + \frac{1}{k_{\text{eff}}}\mathcal{F}\phi,$$

avec \mathcal{D} un opérateur de disparition, \mathcal{T} un opérateur de transfert entre les groupes d'énergie et \mathcal{F} un opérateur de fission. La résolution se fait de manière itérative jusqu'à converger sur le flux ϕ et sur le k_{eff} , l'erreur relative étant calculée entre deux itérations successives. On verra dans la suite plus en détails comment cette méthode est implémentée concrètement. Le schéma itératif peut être résumé de la manière suivante, en se donnant des conditions initiales, à savoir un flux $\phi^{(0)}$ ainsi qu'un $k_{\text{eff}}^{(0)}$:

1. Parcourir les groupes d'énergie g du plus énergétique au moins énergétique et pour chacun :
 - Calculer la source

$$S^{g(n)} = \sum_{g' \neq g} \mathcal{T}^{g' \rightarrow g} \phi^{(g', (n+1))} + \frac{1}{k_{\text{eff}}^{(n)}} \left(\sum_{g'} \mathcal{F}^{g' \rightarrow g} \phi^{(g', (n+1))} \right)$$

- Résoudre le problème de diffusion

$$\mathcal{D}\phi^{(g, (n+1))} = S^{(g, (n))}$$

2. Déterminer la valeur de $k_{\text{eff}}^{(n+1)}$

$$k_{\text{eff}}^{(n+1)} = \frac{\mathcal{F}\phi^{(n+1)} \cdot \mathcal{F}\phi^{(n+1)}}{\mathcal{F}\phi^{(n)} \cdot \mathcal{F}\phi^{(n+1)}/k_{\text{eff}}^{(n)}},$$

où on a noté \cdot le produit scalaire. La méthode de la puissance itérée converge lentement et est généralement accélérée. On peut citer par exemple l'accélération de Chebyshev [FD77], qui modifie le problème à valeur propre en un problème équivalent présentant une meilleure vitesse de convergence.

1.1.4 Les différentes finesses de modélisation neutronique

Les simulations neutroniques couvrent un large spectre d'échelles envisageables, selon les objectifs des simulations réalisées.

Le cœur ponctuel Pour les besoins du parc et pour la formation des opérateurs, des simulateurs sont utilisés, dans lesquels le réacteur est la plupart du temps modélisé de manière ponctuelle. Le simulateur EASYREP [Gra15] est par exemple un simulateur développé à l'INSTN présentant deux niveaux de modélisation du cœur, 0D et 1D. Un autre exemple est [Dro20] : un modèle ponctuel de réacteur y est utilisé pour modéliser l'évolution de la puissance au cours de transitoire et est couplé avec un modèle ponctuel de générateur de vapeur. Cela a permis à DROUET d'optimiser les modes de pilotages de REP lors de transitoires rapides.

L'échelle assemblage Certains besoins nécessitent des descriptions plus fines. Ainsi, le calcul des plans de rechargement du combustible, minimisant par exemple le flux neutronique à la cuve ou encore le pic de puissance à l'intérieur du cœur, est réalisé avec une homogénéisation des sections efficaces à l'échelle assemblage. On peut par exemple citer les travaux de SHICHANG dans [LC12]. Ainsi, une méthode d'optimisation du plan de chargement d'un réacteur y est développée et intégrée aux codes de calcul cœur DONJON [VMC03] et réseau DRAGON [MHR00], basée sur une description du réacteur à l'échelle assemblage. Un autre exemple d'utilisation dans le même cadre est [YG11].

La modélisation homogène cellule Le calcul d'un point chaud à l'intérieur du cœur peut nécessiter une description de l'ensemble des crayons à l'intérieur d'un assemblage soumis à un flux neutronique élevé lors d'un accident d'éjection de grappe par exemple. Dans ce cas, on peut utiliser des sections homogénéisées à l'échelle assemblage en procédant ensuite à une étape de reconstruction du flux et de la nappe de puissance correspondante à l'échelle des crayons, ou bien utiliser directement des sections efficaces homogénéisées à l'échelle cellule. Dans le premier cas, on peut citer le code de neutronique COBAYA3 [JCG10, TJLS14] : la reconstruction de puissance est alors assurée par un processus itératif entre le solveur ANDES (Analytic Nodal Diffusion Equation Solver) [LGHA08], utilisé pour la résolution du problème neutronique à l'échelle d'un quart d'assemblage homogénéisé, et le solveur crayon COBAYA3-PBP de COBAYA3. Dans [CJI+08], ce schéma de calcul a été utilisé pour déterminer la nappe de puissance à la suite d'un accident d'éjection de grappe tel que décrit par le benchmark de l'OCDE [KD06]. Dans [Cat20], CATTANEO développe un modèle *Best-Estimate* d'un cœur de REP. Pour cela, il détermine que la modélisation permettant le meilleur compromis entre temps de calcul et précision des résultats sur le flux calculé s'appuie sur un modèle SP₃ avec une description directement à l'échelle crayon du problème neutronique.

Le calcul direct Pour l'étude de certaines situations accidentelles, il est parfois nécessaire de réaliser un calcul direct de cœur en modélisant l'ensemble des crayons précisément. Cela peut être fait avec la méthode Monte-Carlo comme on l'a vu, mais également directement, en ayant recours au calcul massivement parallèle. L'environnement **VERA-CS** [KCS⁺17, TCS⁺16, KCJ⁺15a] développé par **CASL** [SZKT11] fournit un parfait exemple concernant ce type de simulation. L'objectif de **VERA-CS** est en effet de réaliser des simulations hautes précisions de **REP**, selon les critères fixés par l'U.S. Department of Energy Nuclear Reactor Simulation Hub. L'enjeu est ainsi spécifiquement porté sur la modélisation précise de grandeurs locales, comme la nappe de puissance à l'échelle des crayons ou la température du combustible.

1.2 Description du problème thermohydraulique

Dans cette section, le problème thermohydraulique est introduit dans un premier temps. Différentes méthodes de résolution sont ensuite présentées, en fonction de l'échelle de modélisation retenue et de la précision souhaitée. L'enjeu est ici d'introduire les principaux aspects thermohydrauliques rentrant en compte dans le problème multiphysique régissant un cœur de **REP**.

1.2.1 Rappels de thermohydraulique

1.2.1.1 Les équations de Navier–Stokes

La thermohydraulique régissant le comportement de l'eau à l'intérieur du réacteur est régie par trois équations fondamentales pour chacune des phases, liquide bien sûr et vapeur, puisqu'il peut y avoir localement existence d'une phase vapeur à l'intérieur d'un **REP**. On obtient alors ces équations en réalisant un bilan de masse, d'énergie, et de moment sur un petit volume, ce qui permet d'en déduire les équations locales qui ne sont autres que les équations de Navier–Stokes. On peut par exemple se référer à [DGR81] ou encore à [BCD⁺81] pour avoir plus de détails. On donne en (1.2.1) le système local à résoudre pour chacune des phases k :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{u}_k) = 0 \\ \frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k E_k \vec{u}_k) = -\vec{\nabla} \cdot (\dot{Q}_k - \bar{\bar{\sigma}}_k \cdot \vec{u}_k) + \rho_k \vec{u}_k \cdot \vec{g} + \rho_k r_k \\ \frac{\partial \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) = \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{\sigma}}_k + \rho_k \vec{g} \end{array} \right. \quad (1.2.1)$$

On a noté dans (1.2.1) pour chacune des phases k :

- ρ_k et \vec{u}_k et t respectivement la masse volumique, le vecteur vitesse du fluide et le temps ;
- \vec{g} la gravité ;
- $\bar{\bar{\sigma}}_k$ le tenseur des contraintes de Cauchy, rendant compte des efforts internes dans le fluide. Il est calculé comme la somme des contraintes de pression et de celles visqueuses : $\bar{\bar{\sigma}}_k := -p_k \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_k$. On peut faire l'hypothèse que le fluide est isotrope et que les contraintes visqueuses ne dépendent que du gradient de la vitesse, c'est-à-dire à la partie symétrique du tenseur des taux de déformation : c'est l'hypothèse du fluide newtonien. On a alors :

$$\bar{\bar{\tau}}_k = \mu_k (\vec{\nabla} \vec{u}_k + (\vec{\nabla} \vec{u}_k)^T) + \mu'_k (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k) \bar{\bar{I}},$$

où on a introduit la viscosité dynamique μ_k et la seconde viscosité μ'_k pour la phase k . L'hypothèse de Stokes [Sto09] relie ces deux viscosités par : $\mu' + \frac{2}{3}\mu = 0$. On peut alors

réécrire l'équation locale rendant compte du bilan de moment, c'est-à-dire la dernière équation de (1.2.1) en :

$$\frac{\partial \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) = -\vec{\nabla} \bar{p}_k + \vec{\nabla} \cdot \left(\mu (\vec{\nabla} \vec{u}_k + (\vec{\nabla} \vec{u}_k)^T) - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k) \bar{I} \right) + \rho_k \vec{g} ;$$

- E_k la densité massique d'énergie totale, somme des densités massiques d'énergies interne e_k et cinétique $\frac{1}{2} u_k^2$;
- \dot{Q}_k la densité de flux de chaleur et r_k et le terme source énergétique rendant compte de l'énergie déposée dans le fluide par exemple par les réactions avec les neutrons.

Puisqu'on a considéré ici chaque phase séparément, on doit simuler et prendre en considération la manière dont évolue l'interface entre les phases et les échanges entre celles-ci : il faut donc rajouter des équations de saut ou de continuité qui sont obtenues à partir des principes de conservation à travers ladite interface, ainsi que les éventuels termes sources rendant compte de la production de vapeur par évaporation de l'eau liquide par exemple. On peut se référer à [TBE⁺01] pour une modélisation possible de l'interface permettant de rendre compte d'un écoulement diphasique. Le lecteur intéressé pourra également consulter [TELB06], [AMW98] ou encore [FKA12].

1.2.1.2 Modèles et lois de fermeture

Une autre approche consiste à considérer et à raisonner sur des équations bilans moyennées en espace, par exemple en intégrant les différentes grandeurs sur une section d'un tuyau, et en temps, pour filtrer les fluctuations temporelles qui peuvent avoir de hautes fréquences. On obtient des équations bilans, qu'on est en mesure de résoudre plus simplement mais au prix d'une perte d'informations : il convient alors de la reconstruire, pour rendre compte des effets qui n'ont pas été décrits pas les équations moyennées. Cela passe par l'introduction de lois de fermetures. Le transfert thermique à l'intérieur d'un fluide va ainsi être modélisé par la loi de Fourier. Le frottement aux parois sera également traité *via* des modèles spécifiques, construits à partir de lois semi-empiriques. Quelles que soient les lois de fermeture ou les modèles utilisés pour rendre compte de tel ou tel phénomène, il est alors important de connaître leurs domaines de validité et les hypothèses sur lesquels ils reposent. Notamment, le type d'écoulement considéré est un point central : on distingue les écoulements turbulents, caractérisés par des variations locales rapides de pression et température, des écoulements laminaires. Notons que la modélisation d'écoulements diphasiques liquide-vapeur turbulents est un problème de recherche ouvert.

Dans la suite, certains modèles permettant de résoudre (1.2.1) sont introduits et leurs limites discutées.

1.2.1.3 Modèles et systèmes d'équations associés

Modèle monofluide Il s'agit de considérer l'écoulement diphasique comme constitué d'une unique phase mélangée : on définit alors la masse, l'impulsion et l'énergie du mélange à partir du taux de vide α qui rend compte de la fraction volumique du mélange occupée par la vapeur. Ce modèle ne permet pas, par définition, de différencier les vitesses de chacune de phase par exemple : on n'a accès qu'aux caractéristiques macroscopiques du mélange. Le taux de vide est issu d'une corrélation spécifique, qui varie en fonction du type d'écoulement diphasique étudié.

Modèle à 4 ou 5 équations Il s'agit d'enrichir le modèle mono-fluide d'une ou deux équations afin de rendre compte des déséquilibres thermiques ou cinématiques entre les phases : on peut ainsi

rajouter une équation sur le bilan de la masse de vapeur, qui doit être égale à la production de vapeur en cas d'ébullition par exemple. On complète ce type de modèle par des lois de fermeture, qui peuvent être des lois d'état, reliant la température de saturation à la pression dans le mélange, ou des corrélations, reliant la vitesse de la phase liquide à celle de la phase vapeur. Il s'agit du modèle le plus simple décrivant un écoulement diphasique dans lequel les deux phases sont distinguées.

Modèle à deux fluides Il s'agit de résoudre pour chacune des phases les équations de Navier–Stokes données par (1.2.1), qui sont alors complétées comme on l'a vu par des conditions à l'interface. Celle-ci n'est pas nécessairement explicitement décrite. À cela, on peut ajouter une septième équation permettant de différencier la pression à l'intérieur de chacune des phases. On peut également enrichir ce type de modèle avec des lois décrivant les turbulences comme on l'a vu. La modélisation bi-fluide permet de rendre compte d'une partie des déséquilibres entre les phases.

Modèle à trois champs et plus Il s'agit de rendre compte par exemple du comportement particulier des bulles qui peuvent évoluer à l'intérieur de la phase liquide, ou inversement du comportement de gouttelettes à l'intérieur de la phase vapeur, et ce, pour potentiellement différentes tailles de bulle ou de gouttelette. Pour chacun des champs ainsi définis en plus des deux phases liquide et vapeur, on doit alors résoudre les équations de Navier–Stokes et les relations de saut aux interfaces. Ce type de modèle permet une description fine du phénomène d'ébullition à une paroi par exemple. On peut se référer au paragraphe 3.1.2.1 pour un exemple d'équations multiphasiques, qu'on utilise dans la suite de ce travail.

Il convient de choisir le modèle en fonction des phénomènes physiques que l'on souhaite modéliser et du niveau de précision souhaité. Dans la suite, on décrit les différentes échelles de modélisation associées aux simulations thermohydrauliques.

1.2.2 Les différentes échelles de simulation thermohydraulique

On distingue différentes échelles de modélisations, selon les buts poursuivis :

Système On parle de *code système* à propos des codes de calcul thermohydraulique dont l'objectif est de rendre compte de la thermohydraulique à l'échelle du réacteur dans son ensemble, décomposé en une succession de composants 1D avec parfois une description 3D de certains composants clefs, comme le cœur. Le développement de ce type de modélisation a été très tôt un enjeu dans le développement de la filière nucléaire [tPEEM78]. Ces codes sont à la base des simulations stationnaires et transitoires des réacteurs et jouent à ce titre un rôle clef dans les études de sûreté. Ils permettent notamment la définition et la vérification des procédures de conduite, aussi bien en situation nominale qu'accidentelle.

La simulation à l'échelle système est basée sur la description d'écoulements diphasiques, généralement unidimensionnels, à partir d'un modèle à quatre équations ou d'un modèle bi-fluide. Le réacteur est alors modélisé de façon modulaire, comme une succession de volumes de contrôle reliés entre eux par des tuyaux et des jonctions et faisant intervenir des échangeurs thermiques, rendant compte des circuits primaire et secondaire, des échanges avec les générateurs de vapeur, des pressuriseurs, de la cuve... L'écoulement est moyenné en temps et en espace et les effets des turbulences aux petites échelles par exemple ne sont donc pas modélisés. À titre d'exemple et sans chercher à faire une liste exhaustive ici, on peut citer :

- le code système **CATHARE3** (Code for Analysis of THERmalhydraulics during Accident of Reactor and Safety Evaluation) [ESGB11] développé notamment au **CEA**, en partenariat avec **EDF** et l'**IRSN** et **FRAMATOME** dans le cadre du projet **NEPTUNE**. Il propose deux niveaux de simulation, avec un modèle à six équations et un second à 9 équations, ainsi qu'un module 3D pour la représentation du cœur du réacteur. Il permet la modélisation de tout type de réacteur (**REP**, réacteurs à eau bouillante (**REB**), réacteurs expérimentaux). La capacité de **CATHARE3** à modéliser correctement des situations accidentelles comme une grosse brèche au primaire a été mise en évidence par [DBB05, BDM05, PFMR17] ou encore par [Alk17].
- Le code **TRACE** (Transient Reactor Analysis Code) [BBG⁺15] est développé par le Los Alamos National Laboratory. Si initialement, il est dédié à l'étude de transitoire accidentel pour les **REP**, il permet également l'étude de **REB**. C'est donc l'équivalent américain de **CATHARE3**. La modélisation des écoulements repose également sur un modèle à six équations et un modèle à 4 champs est en cours de développement. La capacité de **TRACE** à reproduire une petite ou grande brèche au primaire a été validée par exemple par [QMMGCJ15] ou encore par [BBG⁺15].

Sous canal ou échelle composant Certaines analyses de sûreté nécessitent des modélisations plus précises d'un composant (par exemple le cœur ou le générateur de vapeur) que celles permises par les codes systèmes. C'est le cas par exemple de l'étude du flux critique ou encore de celle de la température au centre des pastilles de combustible. Ces études sont cruciales : une bonne estimation de la température du combustible est nécessaire pour garantir la sûreté du cœur en situation nominale ou accidentelle par exemple [CB03]. Pour cela, on modélise l'écoulement passant à travers le cœur en simulant plusieurs canaux parallèles et interconnectés. Les codes sous-canaux reposent sur des modèles à quatre équations ou bien sur des modèles bi-fluides auxquels s'ajoutent des modèles de turbulence, permettant de rendre compte des échanges de masse entre les sous-canaux [MSV18]. À titre d'exemple, on peut citer :

- le code de calcul **FLICA4** développé par le **CEA** [TBG⁺00, ABF⁺05]. Il repose sur un modèle 3D à quatre équations, auquel s'ajoute une loi de fermeture semi-empirique reliant la vitesse des deux phases, qui peut être donné par ZUBER et FINDLAY [ZF65]. S'il s'agit d'une simplification par rapport à un modèle à six équations, les résultats obtenus s'avèrent très précis lorsque les écoulements des deux phases sont fortement couplés, comme c'est le cas dans un **REP**. Dans [CAC⁺15] ou encore [TLPLT⁺16], la capacité de **FLICA4** à correctement modéliser ce type de scénario est illustrée.
- Le code de calcul **COBRA-TF** (COolant Boiling in Rod Arrays–Two Fluid) a été développé initialement au Pacific Northwest Laboratory [Thu83] pour l'étude des **REP** et des **REB**. Il est basé sur un modèle à deux ou trois champs, à savoir le liquide, la vapeur et les gouttelettes emportées dans la zone annulaire. La phase liquide et celle des gouttelettes sont supposées à l'équilibre thermique et partage de ce fait le même bilan d'énergie. Il repose sur une approche *quasi-3D* puisque les flux latéraux quittant un sous-canal vers un autre n'ont pas de direction donnée. La capacité de **COBRA-TF** à simuler des événements de type éjection involontaire de grappe de contrôle est illustrée dans [Thu83] : y est démontré les possibilités de simuler un cœur complet avec **COBRA-TF**, à l'échelle assemblage, pour différents types d'accident,

notamment la perte totale des pompes primaires ou encore une éjection de barre de contrôle.

- Le code de calcul **THEDI** (THErmohydraulique DIphasique) [Pat19] est un dernier exemple qui permet de réaliser des simulations à l'échelle canal, sous canal et à l'échelle système, développé au **CEA**. Contrairement au deux codes précédents, il est cependant limité à des simulations multi-1D. Il repose sur un modèle à quatre équations et permet donc d'étudier des écoulements diphasiques. Il permet une modélisation précise à l'échelle assemblage ou quart d'assemblage uniquement : pour des modélisations à plus petite échelle, une modélisation 3D de l'écoulement devient important pour rendre compte correctement de l'extraction de la chaleur des crayons. Dans [PLC19] est mis en évidence la capacité de THEDI à modéliser des scénarios comme l'éjection de barre de contrôle, en comparant les résultats obtenus avec FLICA4 lorsque la modélisation est faite à l'échelle assemblage.

CFD Si on souhaite rendre compte de phénomènes physiques de manière plus précise qu'avec des modélisations sous-canaux, il convient d'utiliser des codes de **CFD** (*Computational fluid dynamics* ou mécanique des fluides numérique). On ne modélise alors généralement que des petites parties du cœur, les coûts de calcul étant encore aujourd'hui généralement prohibitifs. Dans ce type de modélisation, les géométries doivent être précisément reproduites en 3D et une attention particulière est apportée à la qualité du maillage. Différentes modélisations sont envisageables, en fonction de la manière dont on souhaite rendre compte notamment des turbulences. La modélisation *quasi-complète* de toutes les échelles de la cascade de turbulente, jusqu'à la dimension de Kolomogorov, en dessous de laquelle les tourbillons sont dissipés par viscosité, a un coût, en termes de ressources et de temps de calcul, importants : c'est l'approche **DNS** (Direct Numerical Simulation) ou encore **LES** (Large Eddy Simulation). Dans cette dernière, on prend en compte les turbulences jusqu'à une certaine échelle : l'idée est alors de moyenniser les petites échelles et petits pas de temps. Il s'agit en quelque sorte d'un filtre passe bas pour ces échelles [Sag01]. À l'inverse, pour un écoulement turbulent, moyenniser en temps les équations de Navier–Stokes ne permet pas de saisir l'ensemble des effets le régissant : c'est l'approche **RANS** (Reynolds Averaged Navier–Stokes) [RL95]. Elle présente un degré de modélisation des phénomènes physiques important, puisqu'il s'agit d'introduire des modèles de turbulence, comme le modèle $k-\omega$, [Wil88, Wil91], mais permet d'obtenir des résultats dans des délais raisonnables. L'objectif des simulations **CFD** est de n'introduire que très peu de simplifications, permettant ainsi d'avoir des résultats plus précis et conformes aux expériences. On peut par exemple citer le code de **CFD** open-source **TRIOCFD** [ABF15], développé au **CEA**. Un des principaux enjeux liés aux simulations **CFD** est la description des mélanges et des interfaces multiples liquide-vapeur pour des géométries complexes. Un autre sujet d'importance est lié au choc thermique subi par la cuve, ou encore **PTS** (*Pressurized Thermal Shock*) : il s'agit alors de modéliser l'effet de l'injection d'eau relativement froide en cas d'utilisation du système d'injection de sécurité sur la tenue de la cuve. Le lecteur intéressé pourra se référer par exemple à [HKB18].

1.3 Evolution isotopique du cœur

Pour modéliser un réacteur au cours du temps, à partir de quelques heures, il convient de rendre compte de l'évolution de la composition chimique des matériaux qui le constitue : sous l'effet du flux neutronique, on a en effet vu que des réactions de fission notamment avaient lieu, entraînant l'apparition de nouveaux isotopes dans le cœur. Les calculs d'évolution décrivent la variation de concentration de chacun des nucléides présents dans le réacteur. Cette évolution est donnée par les

équations de Bateman qu'on a données en (1.1.3), rendant compte d'une part de la production du nucléide considéré par interaction neutronique ou par décroissance naturelle d'un autre nucléide, et d'autre part de sa disparition par interaction neutronique ou par décroissance naturelle. La difficulté réside alors dans le nombre de nucléides à considérer, qui peut aller de quelques dizaines pour les calculs industriels à plusieurs centaines pour des calculs de référence, nécessitant des ressources en termes de mémoire importantes. La différence entre les ordres de grandeur des différents termes de ce problème est également un enjeu, puisque cela se traduit par un système souvent mal conditionné (voir le paragraphe 2.2.2.2 pour cette notion de conditionnement). Une solution est alors de tirer parti de l'approche en deux étapes qu'on a introduite au paragraphe 1.1.2.2. Pendant le calcul réseau, on prend ainsi en compte un grand nombre de nucléides. On en réunit certains par groupe pour créer des nucléides fictifs, mais ayant des taux de réaction équivalents pour gagner en mémoire. Les sections efficaces condensées obtenues rendent alors compte de la contribution de l'ensemble des nucléides constituant chacune de ces pâtes fictives. On considère d'autres nucléides, comme le xénon par exemple, de manière individuelle. Pendant l'étape de calcul cœur, les équations de Bateman ne sont résolues que pour les nucléides qui n'ont pas été regroupés, et dont on a tabulé les sections efficaces en fonction du burn-up à l'étape réseau. Cette distinction permet de prendre en compte de manière précise les nucléides les plus importants tout en conservant en partie l'effet des nucléides qui n'ont pas été particularisés. Dans le cadre des calculs stationnaires, l'évolution isotopique ne rentre pas en compte et on ne détaillera donc pas plus cet aspect.

1.4 Rappels autour du comportement du combustible nucléaire

Dans cette section, les principaux éléments permettant de décrire l'évolution du comportement du combustible dans un cœur de réacteur sont introduits. La description du combustible au cours du temps est un enjeu multiphysique en soi. En effet, son évolution sous irradiation fait appel : à la neutronique, pour décrire par exemple la manière dont le combustible est irradié ; à la thermohydraulique, pour déterminer par exemple les échanges de chaleur avec le modérateur ; ou encore à la chimie et à la mécanique pour déterminer comment les réactions avec les neutrons impactent la structure cristalline du combustible et ainsi rendre compte de la déformation du combustible au cours du temps par exemple. Ce problème multiphysique est un enjeu en lui-même puisque qu'il convient de garantir l'intégrité de la gaine renfermant les pastilles de combustible au cours du temps, notamment au démarrage ou bien lors des suivis de charge, et bien sûr en cas d'accident. La gaine constitue ainsi la première barrière et une attention particulière est portée à la garantie de son intégrité dans les études de sûreté.

Dans un premier paragraphe, quelques éléments sur la déformation mécanique du combustible sont apportés. L'interaction fluide structure et celle gaine pastille font l'objet d'un deuxième paragraphe, puis on s'intéresse plus précisément à la modélisation du transfert thermique entre le combustible et le modérateur.

1.4.1 Déformation mécanique du combustible

Sous l'effet combiné de l'irradiation et de l'échauffement, les pastilles de combustibles vont se déformer. Ainsi, les fissions des noyaux lourds présents dans le combustible libèrent de l'énergie et des nucléides, dont la grande majorité est à vie courte. L'apparition de ces produits de fission déforme la structure cristalline du matériau, conduisant à la formation d'un grand nombre de défauts. Il convient donc de modéliser l'évolution des différentes propriétés thermiques du combustible en fonction des déformations mécaniques qu'il connaît tout au long de son irradiation.

Par ailleurs, la température du combustible entraîne des effets de dilatation qui vont s'ajouter aux déformations liées aux réactions de fission.

L'enjeu en termes de modélisation est par exemple de correctement appréhender les déformations de l'assemblage combustible, déformations qui peuvent par exemple ralentir la chute des grappes de contrôle lors d'une situation accidentelle.

1.4.2 Interaction fluide-structure et interaction gaine-pastille

Le diamètre de l'ensemble gaine/pastille varie au cours du temps sous l'effet par exemple du gonflement du combustible sous irradiation, ou encore des contraintes mécaniques liées à la pression exercée par le caloporteur sur les gaines. L'étude de l'interaction gaine/pastille (ou *Pellet Cladding Interaction* (PCI) en anglais) est un sujet de recherche en lui-même [? Int21]. Cette interaction peut entraîner une perte d'intégrité de la gaine et est notamment l'un des principaux facteurs limitant les capacités de suivi de charge des REP, d'où une attention particulière à ce sujet [BZB⁺21].

L'interaction entre la gaine et le caloporteur peut se traduire par exemple par une vibration des crayons constituant les assemblages, modifiant alors localement le flux neutronique. Plus problématique, ces vibrations peuvent également accélérer l'usure des gaines, celles-ci étant soumises à un fort frottement aux niveaux des points de contact avec la grille et les ressorts maintenant les crayons en place dans l'assemblage.

1.4.3 Transfert thermique

La détermination de la nappe de température à l'intérieur du cœur de REP est un enjeu central des études de sûreté pour garantir notamment l'intégrité de la gaine. À ce titre, le transfert thermique de l'ensemble formé par la gaine et le combustible est une grandeur d'intérêt particulièrement important. Sa modélisation est ainsi un point clef : il s'agit de modéliser son évolution au cours de l'irradiation des crayons. La conductivité initiale du combustible neuf est peu élevée : sa valeur typique est de $5\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ à 450°C . Elle varie ensuite au cours du temps en fonction de la porosité du combustible sous irradiation par exemple. Comme souligné par [Cat20], la couche d'hélium remplissant cet espace est responsable d'une grande partie de la résistance thermique des crayons, et la modélisation de l'espace entre la gaine et la pastille tout au long de l'irradiation est alors nécessaire pour correctement rendre compte du transfert thermique des crayons.

Le coefficient de transfert thermique de l'ensemble sera maximal au moment où le jeu entre la gaine et la pastille se referme et où le contact entre ces deux éléments a lieu. La résistance thermique apportée par l'hélium diminue ainsi au fur et à mesure que ce jeu se referme, compensant la diminution de la valeur du transfert thermique du combustible seul. Après la fermeture de ce jeu, le transfert thermique des crayons est dominé par celui du combustible, qui diminue du fait de l'accumulation des défauts, de l'augmentation de la porosité et de l'accumulation de bulles de produits de fission gazeux. L'importance de l'étude du phénomène d'interaction gaine-pastille, évoquée au paragraphe précédent est de nouveau soulignée ici. Comme précisé par [Cat20], la modélisation du transfert thermique pour les crayons est ce qui influe le plus la nappe de température et donc la neutronique, *via* la dépendance des sections efficaces à la température du milieu. En situation nominale, c'est la conduction thermique qui dirige le transfert de chaleur vers l'extérieur des crayons : c'est en effet une approximation satisfaisante lorsque le jeu n'est pas encore totalement refermé parce que les mouvements convectifs du gaz à l'intérieur de ce jeu sont

très limités. C'est alors l'équation de la chaleur qui donne l'évolution de température du crayon en fonction des transferts thermiques des matériaux. Elle s'écrit :

$$\frac{\partial \rho(r, t) c_p(r, T, t) T(r, t)}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot (k(r, T, t) \vec{\nabla} T(r, t)) = q(r, t). \quad (1.4.1)$$

Dans (1.4.1), on a noté r un point de l'espace, t le temps, ρ la densité, T la température, c_p la capacité thermique à pression constante, k la conductivité thermique et q la source de chaleur volumique, qui dans le cas de la physique des réacteurs correspond principalement à la puissance dégagée par les réactions de fission et par les rayonnements. Les crayons sont refroidis par le caloporteur dont les propriétés sont calculées par la thermohydraulique.

Dans la suite, on désigne par thermique la restriction de la physique du combustible au calcul de sa température.

1.4.4 Exemples de modélisations

La performance du combustible n'étant pas le sujet principal de ce travail, on se contente ici à titre d'informations de donner quelques exemples de codes de calcul pour le lecteur intéressé. On peut par exemple citer :

- **BISON** : développé par l'Idaho National Laboratory [WHN⁺12, HWN⁺13], c'est un code de calcul massivement parallèle qui permet de modéliser le comportement du combustible sous irradiation en 2D et en 3D. Il est notamment utilisé dans le cadre du projet VERA-CS. La capacité de ce code à déterminer correctement la température au centre du crayon durant tout son cycle d'irradiation, ainsi que la libération des gaz de fission ou encore l'évolution du diamètre de pastilles de combustibles a été mise en évidence par exemple dans [WGP⁺16].
- **ALCYONE** : il s'agit d'un code de calcul développé par le CEA en partenariat avec EDF et FRAMATOME [MGB⁺16] et intégré à la plateforme pour l'étude de la performance du combustible PLEIADES [MNS⁺13]. La capacité d'ALCYONE à correctement valider le comportement du combustible en situation accidentelle ou nominale a été démontrée par exemple dans [MGB⁺16].

1.5 Bilan du chapitre : description du problème couplé

On a vu dans les sections précédentes que les différentes physiques étaient toutes intrinsèquement liées dans le cadre de la modélisation multiphysique d'un cœur de REP. Ainsi, l'écoulement thermohydraulique et son caractère éventuellement diphasique dépendent de la nappe de puissance. Pour la déterminer, il convient de connaître la nappe de flux. Pour calculer ce dernier, il est nécessaire de connaître les sections efficaces des différents milieux, qui dépendent de la température et de la densité de ces derniers. La nappe de température dépend elle-même de la nappe de puissance. Le problème multiphysique global est alors non-linéaire. Par exemple, si l'équation de transport neutronique à température et à *burn-up* fixés est linéaire, en la couplant avec une modélisation thermohydraulique, on perd ce caractère : la nature même des problèmes à résoudre évolue lorsqu'on considère le problème multiphysique global. La modélisation du comportement du combustible, on l'a vu, est par ailleurs intrinsèquement multiphysique. Les différents liens d'interdépendance entre ces disciplines sont donnés figure 1.2. La résolution de ce type de problème multiphysique peut être abordée de deux manières différentes. La première est d'écrire un solveur résolvant directement l'ensemble des équations régissant le problème multiphysique. On parle de

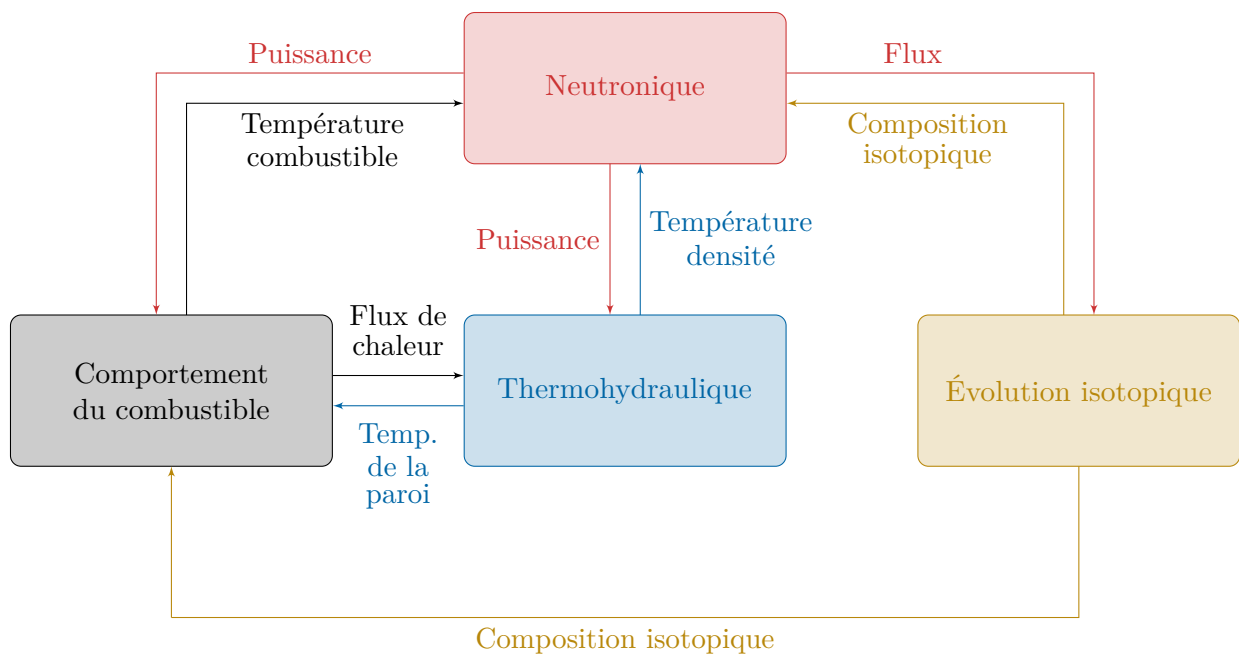


FIGURE 1.2 – Schéma simplifié des interdépendances entre les différentes physiques entrant en jeu dans la description multiphysique d'un cœur de REP

démarche monolithique. Cela demande donc un effort de développement important, et présente des limites en termes d'utilisation puisque le système résolu pour un problème donné n'est potentiellement pas tout à fait identique à un autre problème proche (par exemple si l'on décide de résoudre la partie neutronique en utilisant la méthode SP_N ou celle S_N). La seconde approche consiste, elle, à coupler des solveurs mono-physiques préexistants pour tirer bénéfices de leur capacité à modéliser un large éventail de situations physiques et ainsi limiter les efforts en termes de développement de nouveaux codes de calcul. On parle alors de couplage en boîtes noires. On se restreint dans la suite de ce travail à ce cadre. Les efforts à déployer concernent alors principalement deux points : le premier est lié à la discrétisation de chacune des physiques, qui ne repose pas nécessairement sur le même maillage. Il convient donc de mettre en place des outils de projection et de reconstruction des champs physiques échangés qui soient efficaces. Le second concerne la résolution à proprement parler du problème multiphysique. Cela passe alors par la mise en place de schémas de calcul itératifs entre les différents solveurs. Il s'agit ainsi de résoudre successivement l'ensemble des disciplines et de mettre à jour au fur et à mesure les contre-réactions reliant les différentes physiques entre elles, jusqu'à déterminer la solution multiphysique globale. On parle alors de couplage multiphysique. La mise en place de ces schémas de calcul doit permettre la détermination de solutions multiphysiques précises, en un temps de calcul qui se doit d'être acceptable. On cherche également à les rendre les plus génériques possibles, pour qu'ils permettent de simuler un large panel de situations. Leur stabilité est ainsi un point crucial : ils ne doivent ainsi pas être limités à un petit nombre d'applications pour lesquelles la convergence serait garantie. Il s'agit au contraire de mettre en place des schémas de couplage stables et efficaces d'un point de vue de la vitesse de convergence et du temps de calcul, et ce pour tous types de couplage multiphysique. Le chapitre suivant est ainsi consacré à la présentation de certaines méthodes de couplage usuelles ainsi qu'à leurs utilisations dans le contexte de la description multiphysique des cœurs de réacteurs.

Chapitre 2

Algorithmes de couplage et état de l'art de la modélisation multiphysique en physique des réacteurs

La description multiphysique de l'état stationnaire d'un cœur de REP peut être vue comme un système d'équations non-linéaires correspondant aux différentes physiques considérées. L'objectif est alors de déterminer le point fixe d'une fonction rendant compte de ce système d'équations. Dans cette partie, on introduit différentes méthodes utilisées dans le cadre des couplages multiphysiques. On cherche donc ici à résoudre un problème de type *point-fixe* : si on se place dans \mathbb{R}^d , et si f est une application de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R}^d , on cherche à résoudre :

$$f(x) = x.$$

Si on s'intéresse à un couplage entre neutronique d'une part et thermohydraulique et thermique d'autre part par exemple, on peut noter $x^{(1)} \in \mathbb{R}^{d_1}$ la puissance du cœur et on peut décomposer f comme la succession :

- d'un calcul thermohydraulique et thermique, dont on rend compte par un opérateur itératif TH, permettant de déterminer la nouvelle nappe de température, qu'on note $x^{(2)} \in \mathbb{R}^{d_2}$ associée à la nappe de puissance $x^{(1)}$;
- d'un calcul neutronique, dont on rend compte par un opérateur itératif N, permettant de déterminer la nouvelle nappe de puissance $x^{(1)}$ correspondante à la température $x^{(2)}$.

On a noté ici d_1 et d_2 les dimensions des espaces respectifs dans lesquels évoluent $x^{(1)}$ et $x^{(2)}$, avec $d_1 + d_2 = d$. On se restreint dans la suite au cas des couplages entre thermohydraulique, thermique et neutronique. Le cadre étant donné, on se propose dans cette partie d'introduire différentes méthodes de résolution pour un tel couplage entre ces deux opérateurs N et TH et de discuter, pour chacune d'entre elles, de leur utilisation en multiphysique des réacteurs.

Sommaire

2.1	Méthode du point fixe	38
2.1.1	Présentation de la méthode	38
2.1.2	Conditions générales et pratiques de convergence	39
2.1.3	Point fixe avec relaxation	39
2.1.4	La méthode de Gauss–Seidel en multiphysique des réacteurs	40

2.1.5	La méthode de la sécante	40
2.2	Autour de la méthode de Newton	40
2.2.1	Présentation de la méthode de Newton	40
2.2.2	Méthode de type Jacobian Free Newton–Krylov	41
2.2.2.1	Présentation de la méthode	41
2.2.2.2	Préconditionnement du JFNK	42
2.2.3	Méthodes de type Quasi–Newton	44
2.2.3.1	Méthode de Broyden et méthode de Broyden généralisée	44
2.3	Accélération d’Anderson	46
2.3.1	Présentation générale	46
2.3.2	Lien avec les méthodes de type Quasi–Newton	47
2.3.3	Convergence de la méthode	49
2.3.3.1	Lien avec GMRES	49
2.3.3.2	Convergence locale de la méthode d’Anderson	50
2.3.3.3	À propos de la convergence globale de la méthode d’Anderson	50
2.3.4	Discussions autour de l’implémentation de l’accélération d’Anderson	51
2.3.5	Utilisation de l’accélération d’Anderson dans les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique	53
2.4	Couplages entre solveurs partiellement convergés	55
2.4.1	Introduction de la convergence partielle	56
2.4.2	La convergence partielle comme méthode d’accélération	56
2.4.3	La méthode de l’ <i>Adaptive Residual Balance</i>	57
2.4.3.1	Principe de la méthode	57
2.4.3.2	Algorithmes	58
2.4.3.3	Utilisation de l’ <i>Adaptive Residual Balance</i> dans la littérature	61
2.4.4	La méthode du <i>Dynamic Residual Balance</i>	61
2.5	Bilan du chapitre	61

2.1 Méthode du point fixe

2.1.1 Présentation de la méthode

L’algorithme du point fixe permet de résoudre une équation du type $f(x) = x$. Il consiste simplement à calculer f de manière itérative, en introduisant une suite $(x_n)_n$ donnée par :

$$\forall n, x_{n+1} := f(x_n). \quad (2.1.1)$$

Cette méthode, qu’on appelle également communément la méthode de Picard ou encore des itérations de Picard, est très couramment utilisée dans les couplages entre neutronique et thermohydraulique/thermique. On peut trouver dans [MVC⁺14] et [Cal14] quelques exemples. Il s’agit alors de simplement itérer la résolution des codes de calcul, ici N et TH, jusqu’à convergence du couplage à un niveau de précision souhaité.

Si on note n l’indice de l’itération et $(x_0^{(1)}, x_0^{(2)})$ les données initiales, la méthode de Gauss–Seidel consiste plus particulièrement à itérer en posant :

$$\begin{cases} x_{n+1}^{(1)} &= \text{N}(x_n^{(1)}, x_n^{(2)}) \\ x_{n+1}^{(2)} &= \text{TH}(x_{n+1}^{(1)}, x_n^{(2)}) \end{cases} . \quad (2.1.2)$$

Le critère de convergence est lié à l'écart entre deux itérations : on arrête le couplage lorsque les incréments $\varepsilon_{n+1}^{(1)} = \|x_{n+1}^{(1)} - x_n^{(1)}\|_2$ et $\varepsilon_{n+1}^{(2)} = \|x_{n+1}^{(2)} - x_n^{(2)}\|_2$ sont suffisamment petits, sans avoir d'information sur la distance réelle à la solution. En cas de convergence, on converge nécessairement vers la solution du problème, mais cette convergence n'est pas garantie. On peut montrer qu'il y a équivalence avec un problème de recherche de point fixe tel que défini en (2.1.1), en posant :

$$x = \begin{pmatrix} x^{(1)} \\ x^{(2)} \end{pmatrix} \text{ et } f \begin{pmatrix} x^{(1)} \\ x^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{N}(x^{(1)}, x^{(2)}) \\ \text{TH}(\text{N}(x^{(1)}, x^{(2)}), x^{(2)}) \end{pmatrix}.$$

2.1.2 Conditions générales et pratiques de convergence

On s'intéresse ici aux propriétés du point fixe. On ne détaillera pas les démonstrations des résultats énoncés, qu'on peut retrouver dans [Pat16]. La condition générale de convergence est la suivante : soit E un espace métrique complet, d la distance entre deux points de E et f une application de E dans E . Si f est k -contractante (c'est-à-dire si $\forall (a, b) \in E^2, d(f(a), f(b)) \leq kd(a, b)$ avec $k < 1$), alors il existe un unique point fixe x_{sol} de f et toute suite vérifiant $x_{n+1} = f(x_n)$ converge vers x_{sol} .

D'autre part, on note qu'il suffit dans les faits que f soit contractante sur une boule centrée sur une solution et que l'initialisation s'y trouve pour que l'algorithme du point fixe converge. En pratique, en notant J_a la jacobienne de f en a et $\rho(J_a)$ son rayon spectral, on dispose :

- d'une condition suffisante de convergence : si $\sqrt{\rho(J_x^T J_x)} \leq M < 1$ sur un voisinage de la solution, alors l'algorithme converge si x_0 est choisi dans ce voisinage ;
- d'une condition nécessaire de convergence : $\rho(J_{x_{sol}}) < 1$. C'est aussi une condition suffisante de convergence pour $x^{(0)}$ choisi dans un certain voisinage de la solution.

2.1.3 Point fixe avec relaxation

La méthode du point fixe converge parfois très lentement. Une variante consiste donc à introduire un paramètre de relaxation $\alpha \in]0; 1]$ et de construire une nouvelle suite :

$$x_{n+1} := (1 - \alpha)x_n + \alpha f(x_n). \quad (2.1.3)$$

Si on pose alors $g := (1 - \alpha)\text{Id} + \alpha f$, on voit qu'on se ramène à la méthode du point fixe pour g et une nouvelle suite définie par $x_{n+1} = g(x_n)$. Il existe une valeur optimale du facteur de relaxation, permettant une vitesse de convergence maximale. On peut la déterminer en théorie. À une dimension par exemple, il s'agit de $\alpha = \frac{1}{1 - f'(x_{sol})}$. Il n'est *a priori* pas déterminable en amont puisqu'on ne connaît pas $f'(x_{sol})$. Dans le cas général, on sait également que l'introduction d'un facteur de relaxation peut transformer un algorithme du point fixe qui ne converge pas et a un comportement oscillant en un schéma convergeant. On peut se rapporter à [Pat16] par exemple pour plus de détails. En pratique, on détermine numériquement une valeur du facteur de relaxation permettant la convergence de la méthode à une vitesse satisfaisante, c'est-à-dire en le faisant varier manuellement, ce qui peut être coûteux en temps de calcul puisqu'on doit réaliser plusieurs essais.

2.1.4 La méthode de Gauss–Seidel en multiphysique des réacteurs

La méthode de Gauss–Seidel, si elle est simple à mettre en place, présente une convergence lente et nécessite généralement l'utilisation de facteurs de relaxation pour garantir sa convergence pour un couplage entre neutronique et thermohydraulique, sans quoi on observe un phénomène d'oscillation axiale de la nappe de puissance entre deux itérations successives. Ces oscillations apparaissent pour des simulations à l'échelle crayon comme dans [TKS+15], mais aussi pour des assemblages, mini-cœurs ou cœurs complets [MS09], [Hea13], [BCHP14]. Le facteur de relaxation optimal dépend du niveau de puissance et impacte la vitesse de convergence.

2.1.5 La méthode de la sécante

Une alternative à la recherche manuelle d'un paramètre de relaxation garantissant la convergence de la méthode de Gauss–Seidel est la méthode de la sécante, qui est une généralisation vectorielle de la relaxation d'Aitken. Elle est par exemple présentée dans [RH15]. Le facteur de relaxation est alors calculé à chaque itération à partir des itérations précédentes. Pour une itération $n + 1$ donnée, avec $n \geq 1$, on pose ainsi :

$$x_{n+1} := f(x_n) - \frac{(f(x_n) - f(x_{n-1})) \cdot (\Delta x_n - \Delta x_{n-1})}{\|\Delta x_n - \Delta x_{n-1}\|_2^2} \Delta x_n, \quad (2.1.4)$$

avec $\Delta x_n := f(x_n) - x_n$. On n'a pas précisé ici la dimension de x , et on a noté \cdot le produit scalaire naturellement associé à l'espace auquel appartient x . On peut réécrire (2.1.4) en :

$$\begin{aligned} x_{n+1} = & f(x_n) \left(1 - \frac{(f(x_n) - f(x_{n-1})) \cdot (\Delta x_n - \Delta x_{n-1})}{\|\Delta x_n - \Delta x_{n-1}\|_2^2} \right) \\ & + \frac{(f(x_n) - f(x_{n-1})) \cdot (\Delta x_n - \Delta x_{n-1})}{\|\Delta x_n - \Delta x_{n-1}\|_2^2} x_n, \end{aligned}$$

et on retrouve alors l'expression du facteur de relaxation tel que défini en (2.1.3) et dont la valeur varie ici à chaque itération, donnée par

$$\alpha_n := 1 - \frac{(f(x_n) - f(x_{n-1})) \cdot (\Delta x_n - \Delta x_{n-1})}{\|\Delta x_n - \Delta x_{n-1}\|_2^2}.$$

L'utilisation d'une relaxation dynamique permet de ne plus avoir besoin de rechercher un facteur de relaxation fixe α garantissant la convergence de la méthode de Gauss–Seidel : on économise ainsi l'exploration numérique qui était précédemment nécessaire dans le cas d'un facteur de relaxation fixe. On se permet dans la suite parler de manière indifférenciée de relaxation dynamique ou de la méthode de la sécante.

2.2 Autour de la méthode de Newton

2.2.1 Présentation de la méthode de Newton

La méthode de Newton est une méthode courante pour trouver une approximation d'un zéro d'une fonction. On considère dans ce paragraphe un système d'équations non-linéaires $F(x) = 0$ avec $F : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$ continûment différentiable. On a simplement reformulé le problème de recherche de point fixe précédent en posant $F := f - \text{Id}$. La méthode de Newton est une méthode itérative. Si

on note $J(x)$ la jacobienne de F en $x \in \mathbb{R}^d$, la $n^{\text{ième}}$ itération de l'algorithme de Newton consiste alors à résoudre en Δx_n le système :

$$J(x_n)\Delta x_n = -F(x_n), \quad (2.2.1)$$

et à calculer la nouvelle itérée comme :

$$x_{n+1} := x_n + \Delta x_n = x_n - J(x_n)^{-1}F(x_n). \quad (2.2.2)$$

Si F est linéaire et que J est non singulière, on trouve la solution du problème $F(x) = 0$ en une unique itération. Autrement, on peut montrer ([Pat16] par exemple) qu'on a une convergence quadratique pour cette méthode si l'initialisation est suffisamment bonne, c'est-à-dire proche de la solution. On a alors :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\|x_{n+1} - x_{\text{sol}}\|_2}{\|x_n - x_{\text{sol}}\|_2^2} < 1.$$

Cela la rend particulièrement attractive d'un point de vue algorithmique et plus performante que la méthode de Gauss–Seidel introduite dans la section 2.1. On a cependant besoin de la jacobienne de F à chaque itération, qui n'est en pratique pas connue et potentiellement difficilement calculable. On présente dans la suite différentes méthodes permettant de s'affranchir de la connaissance précise de J .

2.2.2 Méthode de type Jacobian Free Newton–Krylov

2.2.2.1 Présentation de la méthode

Les méthodes de type Jacobian Free Newton–Krylov (**JFNK**) ont pour objectif de résoudre le système linéaire (2.2.1) sans former explicitement la jacobienne, mais de manière itérative avec des méthodes de type Krylov. Si la communauté des mathématiques appliquées s'est tournée très tôt vers ces méthodes pour résoudre des problèmes d'équations aux dérivées partielles [Kel95, OR70], l'intérêt est plus récent pour la communauté de la physique numérique [Kel95, BS90, CJ84]. En physique des réacteurs et en multiphysiques, on peut notamment citer [Mou06, SLW⁺16].

Une description précise de la méthode **JFNK** peut être trouvée dans [KK04], qui fait référence, ou encore dans [MVC⁺14]. L'intérêt de la méthode est de ne pas faire intervenir la jacobienne directement : on n'a besoin de connaître que le résultat d'un produit de la jacobienne avec un vecteur, sans avoir à la former ni à la calculer de manière explicite. Dans les faits, on est la plupart du temps capable d'approximer cela *via* des simples appels aux codes qu'on souhaite coupler [Pat16]. Ainsi, numériquement, on peut approcher le produit entre $J(x_n)$ et un vecteur v en calculant, *via* le développement de Taylor de $J(x_n)$ et par exemple pour un petit ε :

$$J(x_n)v = \frac{F(x_n + \varepsilon v) - F(x_n)}{\varepsilon} + O(\varepsilon).$$

Pour calculer $J(x_n)v$, on n'a aucunement besoin ni de former, ni de stocker la jacobienne, puisqu'une évaluation de F correspond à un appel aux codes. On a simplement recours à un appel supplémentaire aux codes pour déterminer $F(x_n + \varepsilon v)$, en plus de celui pour $F(x_n)$ qu'on aurait dans tous les cas calculés : selon ce surcoût, ce type de méthode peut-être prohibitif. Plusieurs méthodes de Krylov sont envisageables, comme la méthode Generalized Minimal RESidual (**GMRES**), ou la méthode BiConjugate Gradient Stabilized method (**BICGStab**). On peut se référer à l'annexe B pour plus de détails sur les méthodes de Krylov et la méthode **GMRES**.

Le lecteur intéressé pourra se référer à [Kel95, BS90, Bro87, BS94] concernant la théorie développée autour de la convergence de la méthode **JFNK**. On notera que deux situations particulières posent des problèmes de convergence, à savoir des solutions fortement non-linéaires (comme des chocs ou des fronts de réaction) ainsi que des discontinuités dans les fonctions non-linéaires. On ne se place *a priori* pas dans l'une ou l'autre de ces situations, et on ne s'étendra donc pas autour des questions de convergence de la méthode. Cette méthode fait par ailleurs apparaître deux paramètres clefs en plus de ceux de l'algorithme de Newton classique. Le premier est le paramètre ε servant à calculer le produit matrice-vecteur détaillé précédemment, qui doit être suffisamment petit pour que le développement de Taylor soit le plus correct possible, mais suffisamment grand pour ne pas rencontrer de difficulté avec le bruit numérique. Le second est le critère de convergence pour la méthode **GMRES**, qui doit être un compromis entre temps de calcul et précision. Une discussion concernant le choix de ces paramètres est proposée dans l'annexe B.

La méthode **JFNK** est par exemple à la base de la plateforme de couplage **MOOSE** [GNHLG09] développée à l'Idaho National Laboratory et dédiée à l'étude du comportement et de la performance du combustible. C'est également une des méthodes privilégiées dans **VERA-CS** qu'on a évoqué en section 1.1.4. Une attention particulière est accordée au préconditionnement de la méthode pour améliorer notamment ses performances. On s'intéresse dans la suite à cette notion.

2.2.2.2 Préconditionnement du JFNK

Principe Si on considère un problème linéaire de type $Ax = b$, dont la solution est notée x_{sol} la notion de conditionnement d'une matrice A est une mesure de la sensibilité de A^{-1} à des perturbations de A et de x_{sol} . Le conditionnement de la matrice A est alors donné par :

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2.$$

Le principe de la méthode du **JFNK** est de résoudre le système linéaire $J(x)\Delta x = -F(x)$ par approximation du produit $J(x)\Delta x$ comme on l'a vu. Il est donc d'autant plus important d'avoir un conditionnement correct pour $J(x)$. Cela réduira le nombre d'itérations de Krylov nécessaire pour obtenir une bonne approximation Δx du système linéaire dont on cherche la solution. Il s'agit donc d'améliorer au maximum le conditionnement du système linéaire en le transformant en un autre système, qui sera lui mieux conditionné. C'est ce qu'on appelle le préconditionnement. Si on introduit une matrice P inversible et qu'on veut résoudre un système de type $Ax = b$, on parle de conditionnement à gauche lorsqu'on s'intéresse au système linéaire suivant :

$$PP^{-1}Ax = b.$$

On parle de conditionnement à droite lorsqu'on étudie plutôt le système :

$$AP^{-1}Px = b.$$

Il s'agit alors de résoudre respectivement $P^{-1}Ax = P^{-1}b$ ou dans le second cas $AP^{-1}y = b$ puis $x = P^{-1}y$. Dans les deux cas, il s'agit d'un préconditionnement dit linéaire, par opposition au préconditionnement non-linéaire où la matrice P dépend alors de x [ZGL⁺19]¹. On aura un conditionnement optimal si $P = A$ et on cherche donc en pratique une matrice de conditionnement

1. On ne s'intéressera ici qu'au préconditionnement linéaire, qui semble être plus efficace que le préconditionnement non-linéaire [ZGL⁺19], en termes de temps de calcul. En contrepartie, cela nécessite plus de développement en termes de code, notamment si on utilise des solveurs déjà existants.

proche de A . Dans le cas du **JFNK**, il s'agit de choisir $P^{-1} \approx J(x_n)^{-1}$. Notons dès à présent qu'on préfère généralement le préconditionnement à droite [KK04, Cal14]. Il a en effet l'avantage de conserver intact le second membre dont la norme entre en jeu pour l'étude de la convergence de la méthode. Appliquée au **JFNK**, une itération de Newton devient donc :

1. $(J(x_n)P^{-1})\Delta y = -F(x_n)$;
2. $x_{n+1} = x_n + P^{-1}\Delta y$.

L'enjeu est donc d'être en mesure de calculer le produit de $J(x_n)P^{-1}$ avec un vecteur. On l'approche avec :

$$J(x_n)P^{-1}v \approx \frac{F(x_n + \varepsilon P^{-1}v) - F(x_n)}{\varepsilon}.$$

On voit donc qu'il suffit de savoir calculer le produit de P^{-1} à un vecteur pour utiliser facilement le préconditionnement à droite. Plusieurs méthodes de préconditionnement sont envisageables. On pourra se référer à [KK04] par exemple pour avoir plus de détails à ce sujet. On se propose d'en présenter une qui semble intéressante dans le cadre des couplages multiphysiques.

Le préconditionnement basé sur la physique L'idée du préconditionnement basé sur la physique est d'utiliser une méthode de résolution approchée qui renvoie une estimation de l'incrément Δx recherché. Ce type de préconditionnement améliore les temps de calcul puisqu'il réduit la taille des espaces de Krylov construits lors du **JFNK**. On peut citer [RM09, MKR00, GNHLG09] pour des cas transitoires de couplage entre neutronique et thermohydraulique. Détaillons quelques exemples de stratégie de préconditionnement.

Dans [?], ZHANG ET AL. comparent plusieurs méthodes de couplages entre neutronique et thermohydraulique pour un réacteur à haute température refroidi au gaz, et notamment une résolution du problème couplé *via* le **JFNK**. Pour pallier le mauvais conditionnement de la jacobienne du fait des ordres de grandeurs différents entre les variables issues des différentes physiques, une étape de normalisation de la jacobienne est ajoutée, en multipliant cette dernière par des matrices diagonales à droite (*column scaling technology*) et à gauche (*row scaling technology*). Les auteurs mettent également en place une étape d'élimination des non-linéarités (*non linear elimination*) : cela revient à considérer certaines variables, facilement calculables, non pas comme des inconnues globales, mais comme des intermédiaires de calculs, réduisant donc la taille de la jacobienne. Le préconditionnement permet ici de gagner un facteur 1.56 en temps de calcul par rapport à un **JFNK** sans préconditionnement.

Dans [?], PARK ET AL. partent de l'expression théorique de la jacobienne de leur problème de couplage neutronique-thermohydraulique-thermique en 2D (stationnaire ou non selon le problème considéré), et la simplifie pour construire une matrice de préconditionnement efficace. Cette simplification se fait *via* une linéarisation selon certaines variables physiques du problème, puis en se basant sur des considérations physiques pour éliminer certains termes en dehors de la diagonale de la jacobienne ainsi que certains termes correspondant à des couplages physiques faibles. À cela s'ajoute une étape de normalisation pour améliorer le conditionnement. La résolution du système linéaire $P^{-1}\Delta x_n = -F(x_n)$ se fait alors *via* la méthode de Gauss-Seidel ou de Jacobi, après l'inversion de P . Cette approche leur permet de gagner un facteur 6 à 8.7 par rapport à une résolution avec la méthode de Gauss-Seidel du problème couplé.

Dans [HBC⁺16], HAMILTON ET AL. comparent différentes techniques de couplage, notamment l'Accélération d'Anderson (voir à ce propos la section 2.3) et la méthode du **JFNK**. La jacobienne

est alors simplifiée en se basant sur des considérations physiques (certains effets de rétroactions sont négligés ou simplifiés) et préconditionnée par une matrice constituée des blocs diagonaux de la jacobienne. Le préconditionnement du système linéaire à partir d'une matrice constituée des blocs diagonaux (éventuellement approchés uniquement) de la jacobienne est la méthode de conditionnement la plus simple *a priori* : on la retrouve également dans [SLW⁺16, MRM12, ZGL⁺19].

Dans [DGPAC17], DEMAZIÈRE EL AL. construisent un modèle stationnaire 1D d'un réacteur à eau bouillante et résolvent le problème couplé de manière monolithique avec la méthode JFNK. Les auteurs comparent la résolution avec la méthode de Gauss–Seidel de ce problème à une résolution monolithique avec JFNK et à une résolution où chaque physique est résolue séparément avec JFNK. En termes de préconditionnement, deux méthodes ont été testées : un préconditionnement basé sur une estimation numérique de la jacobienne et un autre *via* une linéarisation des équations à résoudre. Pour les deux approches non-monolithiques, une relaxation des inconnues de la neutronique est nécessaire à la convergence du problème couplé, avec ou sans préconditionnement des différents JFNK mono-physiques. Dans l'approche monolithique, aucune relaxation n'est nécessaire pour faire converger le problème, et cette approche est également la plus efficace en termes de vitesse de convergence si le préconditionnement initial est assez bon.

Bilan concernant la méthode JFNK On retient essentiellement de ces études qu'il est nécessaire de mettre en place un préconditionnement pour obtenir des résultats satisfaisants en termes de réduction du nombre d'itérations de Krylov et dans une moindre mesure de temps de calcul. Cette étape de préconditionnement, puisqu'elle doit se rapprocher de la jacobienne de F , dépend nécessairement du problème physique qu'on souhaite résoudre et de ce fait du couplage qu'on effectue.

2.2.3 Méthodes de type Quasi–Newton

Les méthodes de type Quasi–Newton cherchent à approximer la jacobienne de la fonction F dont on cherche le zéro. On perd ici la convergence quadratique, qu'on peut toujours éventuellement retrouver asymptotiquement. Une possibilité est d'approximer la jacobienne par une matrice J_n dont on cherche à ce qu'elle soit le plus proche possible de $J(x_n)$ et de calculer ensuite la nouvelle approximation de la jacobienne à l'itération suivante, J_{n+1} , à partir de J_n , en lui ajoutant une matrice de rang petit à chaque nouvelle itération. On se propose dans la suite d'en exposer rapidement le principe, en reprenant certains éléments de démonstration de [FS09].

2.2.3.1 Méthode de Broyden et méthode de Broyden généralisée

On se place à la fin d'une itération n : on connaît alors Δx_n et donc $x_{n+1} = x_n + \Delta x_n$ ainsi que J_n . On cherche donc à mettre à jour l'approximation de la jacobienne, J_{n+1} . Les méthodes de type Quasi–Newton imposent généralement la condition normale suivante :

$$J_{n+1}\Delta x_n = \Delta F_n := F(x_{n+1}) - F(x_n). \quad (2.2.3)$$

Une autre condition est souvent rajoutée, appelée *no change condition* en anglais, qu'on traduira par invariance :

$$J_{n+1}q = J_nq, \forall q \text{ tel que } q^T \Delta x_n = 0. \quad (2.2.4)$$

Ainsi, lors du passage de J_n à J_{n+1} , aucune information n'est accessible concernant les variations de F dans une direction orthogonale à Δx_n . On ne peut donc pas mettre à jour l'estimation de la jacobienne dans ces autres directions. La condition d'invariance rend compte de cela : les variations de F prédites par J_{n+1} dans les directions orthogonales à Δx_n sont les mêmes que celles prédites par J_n . Autrement dit, on impose qu'il n'y ait pas de nouvelle information contenue dans J_{n+1} par rapport à l'étape précédente dans les directions orthogonales à Δx_n . Dans [Bro65], Broyden expose une méthode satisfaisant ces deux conditions et propose pour J_{n+1} :

$$J_{n+1} = J_n + (\Delta F_n - J_n \Delta x_n) \frac{\Delta x_n^{\mathbf{T}}}{\Delta x_n^{\mathbf{T}} \Delta x_n}. \quad (2.2.5)$$

Il montre que cela est équivalent à minimiser $\|J_{n+1} - J_n\|_F^2$ par rapport à J_{n+1} soumis à la condition normale donnée précédemment [DM77]. On a noté ici $\|\cdot\|_F$ la norme de Frobenius à savoir : $\|A\|_F = \text{tr}(A^{\mathbf{T}}A)$. À première vue, le coût de telles méthodes peut sembler élevé, car il s'agit ensuite de résoudre en Δx_{n+1} le système :

$$J_{n+1} \Delta x_{n+1} = F(x_{n+1}).$$

Dans les faits, l'approximation de la jacobienne J_{n+1} obtenue est souvent *quasiment* diagonale et son inversion ne coûte pas très cher.

Malgré tout, au lieu d'approximer J_n puis de résoudre le système linéaire associé, on peut directement chercher à approximer $J_n^{-1} := G_n$: c'est ce que permet la seconde méthode de Broyden. La condition normale donnée par (2.2.3) s'écrit alors :

$$G_{n+1} \Delta F_n = \Delta x_n. \quad (2.2.6)$$

En minimisant $\|G_{n+1} - G_n\|_F$ sous cette contrainte, on arrive alors à la formule itérative suivante :

$$G_{n+1} = G_n + (\Delta x_n - G_n \Delta F_n) \frac{\Delta F_n^{\mathbf{T}}}{\Delta F_n^{\mathbf{T}} \Delta F_n}.$$

La condition d'invariance devient également $G_n q = G_{n+1} q, \forall q$ tel que $q^{\mathbf{T}} \Delta F_n = 0$ et on peut repartir de la formule de mise à jour de J_{n+1} donnée par (2.2.5) pour en déduire :

$$G_{n+1} = G_n + (\Delta x_n - G_n \Delta F_n) \frac{\Delta x_n^{\mathbf{T}} G_n}{\Delta x_n^{\mathbf{T}} G_n \Delta F_n}. \quad (2.2.7)$$

On voit donc bien, comme souligné, qu'on peut résoudre le système linéaire (2.2.3) sans avoir à inverser la jacobienne. De plus, on est capable d'approcher directement l'inverse de la jacobienne d'une manière similaire au calcul de l'approximation de la jacobienne elle-même, ce qui permet d'économiser le calcul de l'inversion de J_{n+1} ensuite.

On a finalement une famille de méthodes du type :

$$G_{n+1} = G_n + (\Delta x_n - G_n \Delta F_n) \frac{v_n^{\mathbf{T}}}{v_n^{\mathbf{T}} G_n \Delta F_n}, \quad (2.2.8)$$

avec $v_n^{\mathbf{T}} \Delta F_n = 1$ pour satisfaire à la condition sécante (avec par exemple $v_n^{\mathbf{T}} = \Delta x_n^{\mathbf{T}} G_n$ (Type I) ou $v_n^{\mathbf{T}} = \Delta F_n^{\mathbf{T}}$ (Type II) dans les exemples précédents). EYERT a proposé une généralisation

de ces méthodes dans [Eye96] et a introduit les méthodes de Broyden généralisées, avec un rang m flexible dans la mise à jour de la jacobienne. Il s'agit dorénavant de satisfaire m conditions sécantes :

$$G_n \Delta F_i = \Delta x_i \text{ pour } i = n - m, n - m + 1, \dots, n - 1.$$

On fait dans la suite l'hypothèse que les ΔF_i sont linéairement indépendants. On peut regrouper ces m conditions sous forme matricielle :

$$G_n \mathcal{F}_n = \mathcal{X}_n, \quad (2.2.9)$$

où \mathcal{F}_n est une matrice dont les colonnes sont les ΔF_i et \mathcal{X}_n un vecteur composé des Δx_i . Les conditions normales sont alors regroupées dans la contrainte : $(G_n - G_{n-m})q = 0$ pour tout vecteur q orthogonal au sous espace vectoriel formé par les colonnes de \mathcal{F}_n . De la même manière que précédemment, on a alors, si \mathcal{F}_n est de rang plein :

$$G_n = G_{n-m} + (\mathcal{X}_n - G_{n-m} \mathcal{F}_n)(\mathcal{F}_n^T \mathcal{F}_n)^{-1} \mathcal{F}_n^T, \quad (2.2.10)$$

et finalement :

$$x_{n+1} = x_n - G_{n-m} F(x_n) - (\mathcal{X}_n - G_{n-m} \mathcal{F}_n) \gamma_n, \quad (2.2.11)$$

avec le vecteur colonne γ_n obtenu en résolvant le problème de minimisation $\min_{\gamma} \|\mathcal{F}_n \gamma - F(x_n)\|$ ou, de manière équivalente, le système issu des conditions d'orthogonalités $(\mathcal{F}_n^T \mathcal{F}_n) \gamma_n = \mathcal{F}_n^T F(x_n)$. On montre dans la section suivante 2.3 le lien existant entre ces méthodes de Broyden généralisées et l'accélération d'Anderson.

2.3 Accélération d'Anderson

2.3.1 Présentation générale

L'accélération d'Anderson est issue des travaux sur la résolution itérative d'équations non-linéaires d'Anderson [And65]. Il s'agit d'une méthode de résolution de problèmes de type point fixe $f(x) = x$, comme nous les avons déjà décrits en section 2.1. L'idée est d'exprimer x_{n+1} comme une combinaison linéaire des dernières observations de f et de x . Initialement, le processus itératif introduit par Anderson a été défini, pour un ordre m paramètre de la méthode, comme :

$$x_{n+1} = \beta_n \left(f(x_n) + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} (f(x_{n-i}) - f(x_n)) \right) + (1 - \beta_n) \left(x_n + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} (x_{n-i} - x_n) \right), \quad (2.3.1)$$

en minimisant pour l'itération $n + 1$:

$$\min_{(\theta_1, \dots, \theta_m)} \left\| (f(x_n) - x_n) + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} \left((f(x_{n-i}) - x_{n-i}) - (f(x_n) - x_n) \right) \right\|_2, \quad (2.3.2)$$

β_n correspond à un facteur de relaxation pouvant varier à chaque itération. L'idée derrière l'accélération d'Anderson est donc de prendre en compte l'information contenue dans les m dernières itérations pour résoudre plus efficacement un système d'équations non-linéaires. En

posant : $\theta_0^{(n)} = 1 - \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)}$, on peut réécrire (2.3.1) en :

$$x_{n+1} = \beta_n \sum_{i=0}^m \theta_i^{(n)} f(x_{n-i}) + (1 - \beta_n) \sum_{i=0}^m \theta_i^{(n)} x_{n-i}. \quad (2.3.3)$$

Actuellement, on trouve dans la littérature des expressions équivalentes, à savoir :

$$x_{n+1} = \beta_n \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} f(x_{n-m+i}) + (1 - \beta_n) \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} x_{n-m+i}, \quad (2.3.4)$$

avec les $(\alpha_i^{(n)})_{i=0, \dots, m}$ minimisant $\left\| \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} (f(x_{n-m+i}) - x_{n-m+i}) \right\|_2$ cette fois-ci sous la contrainte $\sum_{i=0}^m \alpha_i = 1$. On a simplement inversé la numérotation des coefficients d'Anderson, avec pour i entre 0 et m , $\alpha_i^{(n)} = \theta_{m-i}^{(n)}$.

Le cas simple où f est linéaire permet d'avoir une compréhension intuitive de l'intérêt de la méthode. Il s'agit alors de chercher $x_{\min} = \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} x_{n-m+i}$ qui minimise la norme ℓ_2 du résidu $f(x_{\min}) - x_{\min}$ dans le sous-espace contenant les $m + 1$ dernières valeurs calculées de x , à savoir $\{x_{n-m}, \dots, x_n\}$. Dans le cas général, plus on est proche de la solution x_{sol} , plus l'hypothèse de la linéarité de f est vérifiée et on comprend l'efficacité de la méthode.

L'accélération d'Anderson appartient à la même famille de méthodes d'accélération que celles développées par PULAY avec succès en chimie [Pul80, Pul82], par ROHWEDDER et SCHNEIDER [RS11] ou encore MARKS et LUKE [ML08] en électronique, mais aussi par KRESSE et FURTHMÜLLER [KF96b][KF96a], LE BRIS [LB05] ou encore YANG ET AL. [YMLW09]. Elle est également utilisée en neutronique pour accélérer la résolution de l'équation de transport des neutrons par WILLERT et PARK dans [WPK14] et [WPT15] par exemple.

2.3.2 Lien avec les méthodes de type Quasi-Newton

FANG et SAAD ont résumé les différentes méthodes de type Quasi-Newton dans [FS09] et ont souligné la relation entre l'accélération d'Anderson et les méthodes de type Quasi-Newton, plus précisément avec les méthodes multi-sécantes, qu'EYERT évoque dans [Eye96] et qu'on a introduites au paragraphe 2.2.3.1. EYERT a ainsi mis en évidence un isomorphisme entre l'accélération d'Anderson et la méthode multi-sécante inverse, qu'on explicite par la suite. FANG et SAAD introduisent quant à eux une nouvelle famille de méthodes incluant celle d'Anderson.

On donne ici le schéma de calcul de l'accélération d'Anderson, tel que présenté dans [FS09] et pour lequel on applique les corrections soulignées dans [CFW⁺13]. Pour cela, on se donne une fonction F dont on cherche le zéro. La recherche de ce zéro revient à déterminer le point fixe de la fonction définie par $f := F + \text{Id}$. On peut appliquer l'accélération d'Anderson à f ainsi définie et on a alors par définition :

$$x_{n+1} = \beta_n \left(f(x_n) + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} (f(x_{n-i}) - f(x_n)) \right) + (1 - \beta_n) \left(x_n + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} (x_{n-i} - x_n) \right),$$

avec les $\theta^{(n)}$ minimisant (2.3.2). Si on remplace f par sa définition, on obtient :

$$x_{n+1} = \beta_n \left(F(x_n) + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} (F(x_{n-i}) - F(x_n)) \right) + x_n + \sum_{i=1}^m \theta_i^{(n)} (x_{n-i} - x_n).$$

Qu'on peut réécrire, en prenant $\beta_n := \beta > 0$ constant² :

$$x_{n+1} = \beta \tilde{F}_n + \tilde{x}_n, \quad (2.3.5)$$

avec :

$$\tilde{x}_n = x_n - \sum_{i=n-m}^{n-1} \gamma_i^{(n)} \Delta x_i := x_n - \mathcal{X}_n \gamma_n, \quad (2.3.6)$$

et :

$$\tilde{F}_n = F_n - \sum_{i=n-m}^{n-1} \gamma_i^{(n)} \Delta F_i := F_n - \tilde{\mathcal{F}}_n \gamma_n, \quad (2.3.7)$$

où on a noté : $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, $\gamma_n = [\gamma_{n-m}^{(n)}, \dots, \gamma_{n-1}^{(n)}]$ avec $\gamma_i^{(n)} = \sum_{j=n-i}^m \theta_j^{(n)}$ pour i entre $n-m$ et $n-1$, et finalement $\Delta F_i = F_{i+1} - F_i$, avec $F_i := F(x_i)$.

Si on note ces équations sous la forme $\tilde{x}_n = \sum_{j=n-m}^n \omega_j x_j$ et $\tilde{F}_n = \sum_{j=n-m}^n \omega_j F_j$, on vérifie qu'on a finalement bien $\sum_{j=n-m}^n \omega_j = 1$. Dans les faits, on calcule avec l'accélération d'Anderson différents *poids* à appliquer à chacune des m dernières itérations dans le calcul de la nouvelle itérée. Notons qu'on retrouve la formulation originelle d'Anderson qu'on a introduite en (2.3.1) en y prenant $\beta_n = \beta$. Dans la formulation originelle, celle faisant intervenir les α_i ou les θ_i , on calcule la différence entre l'itération courante et toutes les anciennes itérations alors que dans la formulation retenue ici, faisant intervenir les γ_i , on calcule les différences relatives des m dernières itérations. En termes de mémoire, cette deuxième stratégie est beaucoup plus efficace. Le passage d'une formulation à l'autre se fait simplement *via* un jeu d'écrire dans la définition des coefficients d'Anderson.

On déduit de (2.3.2) la manière dont on détermine γ_n : en remplaçant f par sa définition et les $\theta^{(n)}$ par les $\gamma^{(n)}$, on trouve qu'on doit minimiser $\|F_n - \mathcal{F}_n \gamma_n\|^2$. On retrouve donc (2.2.11) : le lien avec les méthodes de Broyden généralisé est fait ici. On peut déterminer naïvement les coefficients d'Anderson $\gamma^{(n)}$ en résolvant alors le système d'équations qui en découle, en supposant que \mathcal{F}_n soit de rang plein :

$$(\mathcal{F}_n^T \mathcal{F}_n) \gamma_n = \mathcal{F}_n^T F_n. \quad (2.3.8)$$

On obtient alors avec (2.3.5), (2.3.6) et (2.3.7) :

$$x_{n+1} = \tilde{x}_n + \beta \tilde{F}_n = x_n + \beta F_n - (\mathcal{X}_n + \beta \mathcal{F}_n) \gamma_n, \quad (2.3.9)$$

c'est-à-dire avec (2.3.8) :

$$x_{n+1} = \tilde{x}_n + \beta \tilde{F}_n = x_n + \beta F_n - (\mathcal{X}_n + \beta \mathcal{F}_n) (\mathcal{F}_n^T \mathcal{F}_n)^{-1} \mathcal{F}_n^T F_n. \quad (2.3.10)$$

2. Dans [CFW⁺13], les auteurs font remarquer que dans la formulation initiale proposée par FANG et SAAD dans [FS09], on aurait dû avoir $\beta < 0$, car FANG et SAAD considèrent le problème de la recherche d'un point fixe pour une fonction définie comme $f := \text{Id} - F$, comme le fait également remarquer ANDERSON dans [And18]. Comme précisé, on a pris en compte cette correction dans ce manuscrit, puisqu'on étudie $f := \text{Id} + F$.

On retrouve les formules des familles de Broyden généralisées exposées au paragraphe 2.2.3.1 en choisissant dans (2.2.10) et (2.2.11) $G_{n-m} = -\beta \text{Id}$. Finalement, lorsqu'on recherche le zéro d'une fonction F , on peut le déterminer en appliquant l'accélération d'Anderson pour déterminer le point fixe d'une fonction $f := F + \text{Id}$, ce qui conduit à construire implicitement une approximation de l'inverse de la jacobienne de F qui minimise $\|G_n + \beta \text{Id}\|$ sous la contrainte $G_n \mathcal{F}_n = \mathcal{X}_n$.

Concluons ce paragraphe par un court résumé. Les méthodes de Broyden [Bro65] sont des méthodes de type Quasi-Newton, dans lesquelles on approxime la jacobienne de la fonction F dont on cherche le zéro (ou l'inverse de sa jacobienne) à partir de l'itération précédente et de la dernière condition normale ($J_{n+1} \Delta x_n = \Delta F_n$). Pour déterminer le zéro de F , on peut également chercher à déterminer le point fixe d'une fonction $f := F + \text{Id}$ avec l'accélération d'Anderson. Cela revient alors à approximer l'inverse de la jacobienne de F à partir de l'ensemble des conditions normales disponibles ($J_{i+1} \Delta x_n = \Delta F_i, \forall i \leq n$) et avec une contrainte portant sur les coefficients d'Anderson. En introduisant un nombre flexible m d'équations normales à prendre en considération pour l'approximation de la jacobienne d'une fonction ou de son inverse, FANG et SAAD [FS09] ont construit la classe de méthodes multi-sécantes de type Broyden, à l'intérieur de laquelle la famille des méthodes de Broyden est une sous-classe dont on vient de montrer que l'accélération d'Anderson fait partie.

2.3.3 Convergence de la méthode

L'intérêt autour de l'accélération d'Anderson a augmenté ces dernières années, et si sa convergence a longtemps été constatée sans être démontrée, des résultats récents apportent les premiers éléments de preuve. On se propose dans la suite d'introduire certains de ces résultats.

2.3.3.1 Lien avec GMRES

WALKER et NI, dans [WN11], prolongent les travaux de FANG et SAAD dans [FS09]. Ils démontrent le lien entre la méthode GMRES et l'accélération d'Anderson (Type II) avec un facteur de relaxation $\beta = 1$: appliquée dans un cas linéaire pour une fonction $f(x) = Ax + b$, l'accélération d'Anderson est en effet équivalente aux itérations GMRES appliquée à $(\text{Id} - A)x = b$ dans le sens où les résultats d'une itération pour l'une des méthodes permettent de reconstruire facilement ceux de l'autre.

La convergence de l'accélération d'Anderson n'est abordée que localement ici. Elle amène d'ailleurs à une stagnation du processus si l'initialisation est trop éloignée de la solution finale, et ce même dans le cas linéaire. Les travaux de POTRA et ENGLER [PE11] prolongent ceux de WALKER et NI, dans [WN11], et prouvent l'équivalence (au sens déjà défini précédemment) entre la méthode GMRES et l'accélération d'Anderson même pour un facteur de relaxation β_n non nul arbitraire ou choisi de manière optimal et dynamique, pour minimiser le résidu de l'itération courante. Ils prouvent également que pour le cas linéaire avec $m = +\infty$, le choix du paramètre de relaxation n'influe pas les performances de l'accélération. Pour m fini dans le cas linéaire ou pour m quelconque pour des problèmes non-linéaires, le choix de facteur de relaxation est malgré tout important.

POTRA et ENGLER caractérisent totalement le comportement de l'accélération d'Anderson dans le cas linéaire : on aura soit une convergence vers la bonne solution, soit une stagnation des itérés d'Anderson, et ce, sans possibilité de sortir de la situation $x_{n+1}^{\text{And}} = x_n^{\text{And}}$, alors qu'en cas

de stagnation avec la méthode **GMRES** ($r_{n+1}^{\text{GMRES}} = r_k^{\text{GMRES}} \neq 0$), on continuera de générer des sous-espaces de Krylov de plus en plus grands, permettant potentiellement de converger.

2.3.3.2 Convergence locale de la méthode d'Anderson

TOTH et KELLEY [TK15] ont étudié la convergence locale de l'accélération d'Anderson. Sans détailler, on peut notamment citer la convergence r -linéaire³ de cette méthode (quelle que soit la norme ℓ_1 , ℓ_2 ou ℓ_∞ choisie) dans le cas où on l'applique à une application contractante et si les coefficients d'Anderson sont uniformément bornés. De plus, dans le cas linéaire en général et dans le cas particulier non-linéaire et $m = 1$ (on suppose ici simplement l'application continûment différentiable), la convergence locale q -linéaire est garantie, pour une application contractante. Dans [TEE⁺17], les mêmes auteurs analysent l'impact d'un bruit déterministe ou stochastique et arrivent à la conclusion qu'il y aura stagnation des itérations d'Anderson une fois le niveau du bruit atteint par les résidus. Ces résultats sont repris et enrichis dans [Kel18] par KELLEY. On en déduit qu'en cas d'accumulation d'erreurs dans la mémoire sur laquelle est basée la méthode, celle-ci aura des difficultés à converger.

2.3.3.3 À propos de la convergence globale de la méthode d'Anderson

Dernièrement, POLLOCK et REBHOLZ ont apporté des éléments de réponse nouveaux concernant la convergence globale de l'accélération d'Anderson et la garantie d'une amélioration de la vitesse de convergence. Dans [PRX19] ils s'intéressent initialement à un cas particulier, qu'ils généralisent dans [EPRX20] aux applications contractantes. L'ensemble de ces travaux aboutissent à [PR21]. La convergence de la méthode y est prouvée pour les fonctions contractantes, alors qu'elle n'est garantie pour les autres que dans le cas où le problème d'optimisation introduit par la méthode d'accélération est suffisamment réussi, dans un sens qu'on définit dans ce qui suit. Notons dès à présent que les auteurs, qui reprennent le formalisme de WALKER et NI et de FANG et SAAD, supposent que les colonnes de \mathcal{F}_n sont suffisamment indépendantes linéairement. Comme souligné par ANDERSON dans [And18], cela demande néanmoins des efforts particuliers pour pouvoir le garantir.

Dans cette analyse, les auteurs mettent notamment en évidence un lien entre les coefficients calculés lors de l'étape d'optimisation et le gain apporté par cette même étape. Pour comprendre certains points qui nous paraissent intéressants, on se propose de détailler quelques éléments de preuve. Commençons par noter que les auteurs adoptent comme base pour le problème d'optimisation celle constituée de la différence relative entre deux itérations successives. Ainsi, il s'agit de minimiser, en reprenant les notations utilisées dans [PR21], pour l'ordre m_n à l'itération $n + 1$:

$$\min \left\| \sum_{j=n-m_n}^n \alpha_j^{(n)} f_{j+1} \right\|, \text{ avec } \sum_{j=n-m_n}^n \alpha_j^{(n)} = 1,$$

où l'erreur à l'itération n est définie par $f_n = f(x_{n-1}) - x_{n-1}$ et le résidu de l'étape n est donné par $e_n = x_n - x_{n-1}$. On a alors, comme plusieurs fois rencontré déjà :

$$x_{n+1} = \sum_{j=n-m_n}^n \alpha_j^{n+1} x_j + \beta_n \sum_{j=n-m_n}^n \alpha_j^{n+1} f_{j+1} := x_n^\alpha + \beta_n f_{n+1}^\alpha$$

3. On parle de convergence r -linéaire pour une suite (x_n) vers L s'il existe μ entre 0 et 1 tel que $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1} - L}{x_n - L} = \mu$. μ est alors la vitesse de convergence.

Les auteurs définissent le gain Γ_n à l'étape n comme $\|f_n^\alpha\| = \Gamma_n \|f_n\|$. Cette quantité apparaît comme étant clef. Ils démontrent en effet qu'elle est en facteur des termes correspondant à l'itération la plus récente dans l'expression du résidu et que les termes correspondant aux itérations plus anciennes sont eux multipliés par un facteur $\sqrt{1 - \Gamma_n^2}$. Ainsi, une optimisation réussie augmente l'importance des termes d'ordres élevés (correspondants aux itérées anciennes) alors qu'une optimisation non réussie augmente celle des termes de premier ordre (correspondant aux itérées les plus récentes). Concrètement, cela signifie que lorsqu'on est encore loin de la solution, les termes les plus anciens vont ralentir la convergence de la méthode : il faut donc limiter la taille de la mémoire utilisée et garder un ordre m bas. Lorsque les résidus deviennent assez faibles, on peut en revanche se permettre d'augmenter l'ordre, puisqu'alors la prise en compte des itérées anciennes ne pose pas de problème, puisqu'elles sont elles-mêmes proches de la solution. Les auteurs considèrent qu'il est intéressant de faire varier la profondeur m en fonction de ce gain. L'idée est la suivante : les termes d'ordres supérieurs jouent un rôle dans les premières itérations, et ce, d'autant plus que la profondeur de l'algorithme est grande. On cherche donc dans un premier temps à faire diminuer le résidu avec une petite profondeur d'algorithme, jusqu'à ce que les termes d'ordres supérieurs soient suffisamment petits pour être dominés par les termes de premier ordre. On peut ensuite augmenter la profondeur de l'algorithme et donc avoir un meilleur gain, et ce même si le nombre et le poids des termes d'ordres supérieurs augmentent avec m .

L'enjeu de la démonstration est de majorer $\|e_n\|$ par un terme en $\|f_n\|$ et de montrer que la suite $\|f_n\|$ converge vers 0. On ne reproduit pas la démonstration ici, mais on peut retenir que, sous certaines hypothèses, on a une décroissance monotone du résidu qui est assurée, liée à un gain présentant lui aussi une décroissance monotone. La validité de ce résultat est liée au fait que le problème d'optimisation soit suffisamment réussi, c'est-à-dire qu'on ait pour $m + 1$ itérations consécutives $\|f_{n+1} - f_n\| \geq \sigma \|e_n\|$, avec $\sigma > 0$ une constante. On n'observe cependant pas systématiquement cette monotonie dans les expériences numériques pour les fonctions non contractantes.

Remarque sur la convergence de l'accélération d'Anderson : des résultats énoncés précédemment, on en déduit qu'appliquer l'accélération d'Anderson à un point fixe convergent (la fonction f est alors contractante) ne pose aucun problème en termes de convergence. Pour un point fixe non convergent, c'est-à-dire une fonction non contractante, les preuves disponibles concernant la convergence de l'accélération d'Anderson ne permettent pas de conclure *a priori*. Dans les faits, comme présenté en section 2.3.5, on n'observe pas de problème de convergence dans son utilisation.

2.3.4 Discussions autour de l'implémentation de l'accélération d'Anderson

Toujours dans [WN11], WALKER et NI discutent des points clefs dans l'implémentation de l'accélération d'Anderson. On se propose ici d'en reprendre la liste et de l'enrichir :

Le choix du problème des moindres carrés à résoudre Plusieurs formes équivalentes sont utilisables comme nous l'avons déjà vu. La première est celle proposée par KRESSE et FURTHÜLLER dans [KF96b] ou par FANG et SAAD dans [FS09], à savoir :

$$\min_{\gamma_n = (\gamma_0^{(n)}, \dots, \gamma_{m_n}^{(n-1)})} \|f_n - \mathcal{F}_n \gamma_n\|$$

avec $\mathcal{F}_n = (\Delta f_{n-m_n}, \dots, \Delta f_{n-1})$, $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$ et $f_i = f(x_i) - x_i$. Ce formalisme repose sur une base constituée des différences relatives entre itérées successives, et il permet ainsi un stockage simple et est efficace dans la mise à jour des informations à chaque itération. D'après les tests menés par NI et WALKER dans [NW10], il est également plus performant que les autres formes rencontrées. Dans [And18], ANDERSON souligne que, si cette approche a l'avantage de permettre la décomposition QR de \mathcal{F}_n de manière incrémentale, une telle formulation peut entraîner un problème mal normalisé dans lequel les anciennes informations auront plus de poids que les nouvelles. Une autre possibilité, qu'on qualifie d'approche naïve dans la suite, est de directement résoudre le problème sous contrainte :

$$x_{n+1} = \beta_n \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} f(x_{n-m+i}) + (1 - \beta_n) \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} x_{n-m+i},$$

avec les $(\alpha_i^{(n)})_{i=0, \dots, m}$ minimisant $\left\| \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} (f(x_{n-m+i}) - x_{n-m+i}) \right\|_2$ cette fois-ci sous la contrainte $\sum_{i=0}^m \alpha_i = 1$. On peut alors poser par exemple $\alpha_m = 1 - \sum_{i=0}^{m-1} \alpha_i^{(n)}$. On est ensuite en mesure de déterminer directement les α_i , en résolvant à chaque itération n :

$$\forall i < m, \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j^{(n)} \Delta f_{ni} \cdot \Delta f_{nj} = f_n \cdot f_i, \quad (2.3.11)$$

avec $\forall i, j, \Delta f_{ij} := f_i - f_j$ et comme précédemment $f_k = f(x_k) - x_k$. Le risque ici est de ne pas pouvoir contrôler le conditionnement du système permettant la détermination des $\alpha_i^{(n)}$.

La méthode de résolution de ce problème des moindres carrés Le choix de la méthode de résolution dépend ici des attentes en termes de précision et d'efficacité. Si l'efficacité et la rapidité ne sont pas un critère de choix dans le problème considéré (la résolution du problème des moindres carrés est négligeable en termes de coûts de calcul par rapport à l'évaluation de $f(x)$ par exemple), la stratégie proposée par FANG et SAAD dans [FS09] ou même celle donnée par l'équation (2.3.11) sont tout à fait envisageables. Si on cherche un compromis entre efficacité et précision, on pourra suivre le schéma de résolution proposée par WALKER et NI dans [WN11], basée sur une décomposition QR. L'algorithme détaillé peut être trouvé dans [Wal11].

Le choix de la profondeur m dans l'accélération d'Anderson Le choix le plus répandu est $m_k = \min(m, k)$. Si m est trop petit, les informations contenues dans les anciennes itérées risquent d'être trop limitées pour permettre une convergence rapide. À l'inverse, si m est trop grand, le problème des moindres carrés résolus risque d'être mal conditionné d'une part, et d'autre part, des informations non pertinentes vont être conservées avec la condition normale, ralentissant encore la convergence.

Le conditionnement du système et la décomposition QR Différentes méthodes de décomposition QR sont envisageables et certaines sont par ailleurs explorées dans [Ni09]. ANDERSON détaille sa propre stratégie dans [And18] et revient sur celles proposées par FANG et SAAD d'une part et par WALKER et NI d'autre part. L'enjeu est d'arriver à mettre à jour la décomposition QR lors du passage de ΔF_{k-1} à ΔF_k tout en contrôlant le conditionnement du système.

Restart On peut avoir envie, du fait des instabilités de l'accélération d'Anderson, de mettre au point des stratégies de type *restart*. Pour cela, on peut comparer la norme de la nouvelle itérée calculée *via* l'accélération d'Anderson, noté $\|f_{new}\|$, avec celle de l'ancienne itérée, noté $\|f_{old}\|$: si cette première valeur est trop éloignée de cette dernière, on peut considérer que l'étape d'accélération a échoué, si on s'intéresse à un cas linéaire ou si on est proche de la solution par exemple. Dans ce cas, il faut recommencer l'itération, c'est-à-dire concrètement ignorer les directions précédentes (et donc la *mémoire* qu'on avait jusque-là) et réinitialiser la mémoire liée à l'accélération d'Anderson. FANG et SAAD propose un critère de la forme $\|f_{old}\| \leq r\|f_{new}\|$.

2.3.5 Utilisation de l'accélération d'Anderson dans les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique

On se propose ici de donner quelques exemples d'utilisations de l'accélération d'Anderson trouvés dans la littérature en multiphysique des réacteurs.

Dans [BCHP14], une première comparaison est faite pour des problèmes multiphysiques de modélisation de cœurs de réacteurs nucléaires entre l'accélération d'Anderson, la méthode de Gauss–Seidel et la méthode JFNK. Il s'agit d'explorer un couplage entre neutronique et thermohydraulique pour un assemblage typique de REP composé de 17×17 crayons, détaillé dans [Pal13]. L'accélération d'Anderson y est très rapidement explorée, mais non développée, car les intervalles de définition de certaines grandeurs physiques ne sont pas respectés lors des calculs. Ainsi, il semblerait que certaines grandeurs sortent de leur plage de tabulation au cours de la méthode. Les problèmes rencontrés sont donc liés à la modélisation retenue et les auteurs soulignent malgré tout l'intérêt de la méthode et la nécessité de prolonger son étude.

Dans [TKS⁺15], TOTH ET AL. développent un modèle 1D d'un crayon combustible pour étudier la possibilité d'utiliser l'accélération d'Anderson dans le couplage multiphysique entre neutronique et thermohydraulique et ainsi pouvoir comparer cette méthode avec les itérations de Picard couramment utilisées dans les couplages multiphysiques. Le schéma à résoudre est une question en soit lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson. Ici, deux possibilités existent : résoudre un point fixe du type :

$$f_1(\phi, T) = \left(g_\phi(T), g_f(g_w, p(T)), g_w(p(T)) \right),$$

ou un autre de la forme :

$$f_2(T) = \left(g_f(g_w, p(T)), g_w(p(T)) \right),$$

où on a noté T la température du combustible et celle de l'eau et ϕ le flux neutronique. Si à partir des mêmes conditions initiales, ces deux schémas sont équivalents pour une méthode de type itérations de Picard, ce n'est plus vrai pour l'accélération d'Anderson. C'est le deuxième schéma qui a été retenu pour des raisons de mémoire. Plusieurs des désavantages du point fixe classique sont surmontés avec l'utilisation de l'Accélération d'Anderson. Il apparaît en effet que la convergence et la vitesse de convergence dépendent moins du facteur de relaxation β , préservant l'utilisateur d'une recherche parfois longue d'un facteur de relaxation satisfaisant. La plage de convergence en termes de facteur de relaxation semble également moins dépendante du niveau de puissance. Finalement, l'accélération d'Anderson, avec des paramètres non optimaux *a priori*, permet ici d'atteindre les vitesses de convergence d'un point fixe relaxé de manière optimal.

Dans [HBC⁺16], les auteurs des deux études précédentes continuent leur analyse. Ils comparent les mêmes méthodes de couplage que précédemment et s'appuient sur un assemblage 3D de REP classique. Pour améliorer les méthodes de type JFNK, une réflexion est menée sur la génération en amont ou à la volée des bibliothèques de sections efficaces. Une attention particulière est également portée au préconditionnement (avec une matrice qui n'est pas seulement diagonale, mais contient une partie de l'information hors diagonal avec l'impact de la thermohydraulique sur la neutronique par exemple) du système pour la méthode JFNK ainsi que sur l'approximation du produit de la jacobienne avec un vecteur. Concernant l'accélération d'Anderson, on peut retenir que le choix du point fixe à résoudre n'influe pas ici sur les résultats de l'accélération. Le choix du paramètre de relaxation a été fixé à $\beta = 0.75$ et l'ordre à $m = 2$, ce dernier paramètre n'influençant pas d'après les auteurs la performance de la méthode que ce soit en termes de vitesse de convergence ou de robustesse. La convergence de l'accélération d'Anderson est ici globalement satisfaisante, rivalisant avec la méthode de Gauss–Seidel avec un facteur de relaxation optimisé en temps de calcul et en vitesse de convergence.

La même étude de l'influence du facteur de relaxation pour Anderson et la méthode d'itération de Picard est menée, confortant les résultats précédemment exposés : l'utilisation de l'accélération d'Anderson semble diminuer la dépendance vis-à-vis du facteur de relaxation en termes de convergence et offrir une plus large plage de convergence, elle-même moins liée au niveau de puissance imposé. Encore une fois, aucune réelle divergence n'est constatée, puisque les couples de paramètres pour lesquelles l'accélération d'Anderson ne convergent pas provoquent non pas une divergence de la méthode, mais un non-respect des plages pour lesquelles les grandeurs physiques sont définies pour le problème considéré.

D'une manière générale, la méthode JFNK avec un préconditionnement basé sur la physique est meilleure que les deux autres méthodes dans quasiment tous les tests réalisés ici, en termes de nombre d'itérations total. C'est moins vrai en termes de temps de calcul, mais un préconditionnement intelligent semble permettre de rivaliser aussi bien avec Gauss–Seidel qu'avec l'accélération d'Anderson. À l'inverse, une implémentation naïve du JFNK conduit à de mauvaises performances.

Concernant cette série de 3 études :

- On peut noter qu'aucune stratégie de démarrage tardif d'Anderson n'a été utilisée, qui aurait peut-être permis à l'accélération d'Anderson de converger, sans avoir à faire face aux difficultés de définition des propriétés physiques dont on a parlé ici.
- D'une manière générale et comme résumé par KELLEY dans [Kel18], l'accélération d'Anderson a été développée pour des applications dans lesquelles approximer la jacobienne directement ou son produit avec un vecteur n'était pas envisageable. Si d'une manière ou d'une autre, on peut construire une telle approximation à un coût raisonnable, alors les méthodes de type JFNK seront plus performantes en termes de vitesse de convergence. En termes de temps de calcul, cela dépend du surcoût associé à l'appel supplémentaire au code de calcul, comme on l'a détaillé en 2.2.2.

Plus récemment, on peut également citer les travaux de CATTANEO [Cat20, CLM⁺21], concernant le développement d'une modélisation *Best-Estimate* d'un cœur de REP en couplant les codes de neutronique APOLLO3® et de thermohydraulique FLICA4 pour un mini cœur de REP en trois dimensions, composé de 25 assemblages. L'accélération d'Anderson est utilisée pour accélérer la convergence de calculs couplés stationnaires, et ses performances sont comparées au point fixe avec relaxation et avec convergence partielle. On détaille ce dernier point dans la section 2.4. La

capacité de l'accélération d'Anderson à stabiliser le couplage sans avoir besoin d'introduire un facteur de relaxation ainsi qu'à accélérer la convergence en termes de temps de calcul par rapport à la méthode de Gauss–Seidel sans convergence partielle y est soulignée. L'accélération d'Anderson y est appliquée à l'ensemble des grandeurs physiques neutronique et thermohydraulique et thermique, c'est-à-dire à la puissance, à la température combustible et à la densité du modérateur.

Les travaux de LEE et FACCHINI [FLJ21] concernent également l'utilisation de l'accélération d'Anderson pour un couplage à l'échelle du cœur entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Le couplage est réalisé entre le code de neutronique NTRACER développé à l'université de Séoul [JSLJ13] et ses modules de contre-réactions simplifiées thermohydraulique et thermique. Ils montrent que l'accélération d'Anderson permet de limiter les oscillations au cours du calcul couplé. Elle réduit également le nombre d'itérations neutroniques et thermohydrauliques nécessaires pour atteindre la convergence. Le temps total de calcul y est réduit d'un quart par rapport à la méthode de Gauss–Seidel avec introduction d'un facteur de relaxation. Dans [LJ22], les auteurs s'intéressent à un problème couplé simplifié 1D entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Là encore, la capacité de l'accélération d'Anderson à accélérer la convergence du couplage en le stabilisant sans avoir à introduire de facteur de relaxation est démontrée. Dans ces deux derniers exemples, le point fixe accéléré est défini par rapport aux grandeurs thermohydraulique et thermique.

Pour finir, on peut également noter que l'intérêt porté à l'accélération d'Anderson augmente également dans la communauté des neutroniciens. Ainsi, différents travaux sont menés en parallèle pour accélérer la convergence de la méthode de la puissance itérée qu'on a décrite au paragraphe 1.1.3.3. On peut à ce titre citer [WPK14, WPT15, CLTC21] ou encore plus récemment [SK22]. Dans [SK22], on peut noter qu'une attention particulière est portée à la définition du point fixe à accélérer : il est en effet nécessaire d'appliquer l'accélération d'Anderson à un point fixe correctement défini, sans omettre d'inconnues, sans quoi la méthode voit ses performances dégradées.

2.4 Couplages entre solveurs partiellement convergés

Dans les simulations multiphysiques de manière générale, lorsqu'on couple en boîtes noires des codes de calculs existants, on rencontre souvent un problème dit de *sur-résolution* : chacune des physiques est résolue précisément à l'intérieur de chaque itération multiphysique, et ce même si on est encore loin de la solution multiphysique du problème. Lorsqu'on est encore loin de cette dernière, il peut s'avérer inutile de résoudre de manière précise chacun des problèmes physiques qui entrent en jeu dans le couplage considéré. Ce point est par exemple souligné dans [WWD20] dans le cadre d'un couplage entre neutronique et thermohydraulique. En limitant la convergence des solveurs, on peut donc gagner en temps de calcul et en nombre d'itérations. Cela peut être mis en place soit en limitant le nombre maximal d'itérations autorisées pour un solveur, soit en contrôlant la précision qui lui est demandée au cours du calcul. On se propose dans cette partie d'introduire ces deux approches. Dans un premier temps, on présente la notion de convergence partielle pour les solveurs et dans un second temps, on introduit les algorithmes de type *Residual Balance*, et plus particulièrement l'*Adaptive Residual Balance*, qui permettent de limiter la sur-résolution au cours du calcul en pilotant la précision des solveurs.

Notons bien ici que la convergence partielle ne s'adresse qu'à des méthodes de résolution itérative des modèles physiques. Dans le périmètre de ce travail, on peut considérer deux types d'itérations différentes :

- les itérations sur la non-linéarité ou bien sur la convergence d’une valeur propre, typiquement comme c’est le cas pour les solveurs neutroniques ;
- ou bien les itérations d’un solveur, lorsqu’il s’agit de résoudre un problème linéaire ou non-linéaire, comme c’est typiquement le cas pour le solveur thermohydraulique.

2.4.1 Introduction de la convergence partielle

L’idée de la convergence partielle est de limiter arbitrairement le nombre d’itérations effectuées à chaque appel d’un solveur, et ce même si la convergence interne dudit solveur n’est pas atteinte. Concrètement, dans le cas des couplages entre neutronique et thermohydraulique, il s’agit de limiter le nombre d’itérations de la méthode de la puissance itérée ainsi que le nombre de pas de temps effectués par le solveur thermohydraulique dans le cas de la résolution d’un état stationnaire *via* un transitoire stabilisé. La convergence interne des solveurs devient alors une condition nécessaire pour la convergence globale de la méthode. C’est cette approche qui est effectivement utilisée dans les calculs industriels.

Notons qu’avec la convergence partielle, l’état final d’un solveur dépend dorénavant de son initialisation. Prenons l’exemple du solveur neutronique, dont on limite le nombre d’itérations autorisées à K_N . Puisque la convergence interne n’est *a priori* pas atteinte en K_N itérations, le flux final dépendra du flux ayant servi à initialiser le problème neutronique. Celui-ci correspond au dernier flux calculé à l’itération multiphysique précédente. C’est également le cas pour le solveur thermohydraulique. L’historique des appels influence donc l’état final de chacun des solveurs.

2.4.2 La convergence partielle comme méthode d’accélération

On peut s’attendre à ce que la convergence partielle fasse gagner en nombre d’itérations internes total tout en faisant perdre en nombre d’itérations multi-physiques : en effet, en limitant le nombre d’itérations internes autorisées, on limite la convergence des solveurs et on s’attendrait à ce que cela aboutisse à un ralentissement de la vitesse de convergence du problème multiphysique. En réalité, l’introduction de la convergence partielle permet également de gagner en termes de vitesse de convergence, ainsi qu’en de temps de calcul. Dans [Cat20, CLM⁺21] par exemple, CATTANEO détermine pour un couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique les niveaux de convergence partielle optimaux pour chacun des solveurs, permettant de minimiser le temps de calcul total, de réduire le nombre d’itérations multiphysiques total et de stabiliser le calcul : l’introduction d’un facteur de relaxation n’est plus nécessaire à partir d’un certain niveau de convergence partielle. Ces paramètres optimaux dépendent du cas d’étude considéré et doivent être déterminés manuellement.

On comprend intuitivement le lien avec l’introduction d’un facteur de relaxation dans le cas d’une convergence monotone : le résultat d’un calcul avec convergence partielle à l’itération globale $n + 1$ se situe alors “entre” les deux résultats des calculs convergés x_n et $x_{n+1} = f(x_n)$. Si on introduit un facteur de relaxation, $x_{n+1} = \alpha f(x_n) + (1 - \alpha)x_n$ se situe également entre x_n et $f(x_n)$. La convergence partielle permet donc, de la même manière que l’introduction d’un facteur de relaxation, de stabiliser la convergence de la méthode de Gauss–Seidel, d’accélérer la convergence multiphysique, et elle présente en plus l’avantage de limiter le nombre d’itérations mono-physiques effectuées.

Dans [Cat20, CLM⁺21], les auteurs utilisent également la convergence partielle combinée à l’accélération d’Anderson, qui est appliquée à l’ensemble des grandeurs physiques neutroniques

(puissance) et thermohydrauliques (température du combustible et densité du modérateur). Ils aboutissent à la conclusion que la convergence partielle bruite la mémoire d'Anderson, dégradant ses performances, voire rendant le schéma instable.

2.4.3 La méthode de l'Adaptive Residual Balance

Un moyen autre de contrôler la sur-résolution au cours du calcul multiphysique est de faire évoluer la précision demandée à chacun des solveurs au fur et à mesure du calcul multiphysique. C'est le principe des méthodes de type *Residual Balance* proposée par SENEAL dans [Sen18], dans le cadre des couplages multiphysiques, méthode qu'on détaille ici. On peut également citer les travaux de ERN et VOHRALÍK [EV13] : ils développent une méthode de Newton inexacte pour des solveurs itératifs, linéaires ou non, méthode dans laquelle les critères de convergence internes sont mis à jour à partir d'estimation *a posteriori* de l'erreur précédente commise, ainsi qu'à partir du raffinement du maillage sur lequel s'appuie le solveur.

2.4.3.1 Principe de la méthode

SENEAL s'inspire de la méthode proposée par LIPNIKOV ET AL. dans [LSV13]. Il s'agit d'imposer à chacun des solveurs d'un problème multiphysique une tolérance relative qui évoluera au cours du calcul pour que la convergence globale soit plus rapide. Concrètement, on peut par exemple partir de critères de convergence lâches pour chacun des solveurs et resserrer ces critères à chaque itération multiphysique d'un facteur 10, jusqu'à atteindre la précision souhaitée. Plutôt que faire décroître la tolérance de manière arbitraire, SENEAL propose de la faire évoluer pour chacun des solveurs en fonction de la norme du résidu de l'autre solveur. L'idée générale est d'appeler l'un des solveurs uniquement quand le résidu du second est devenu inférieur au résidu du premier. De ce fait, on n'effectue *a priori* que des appels *utiles* aux solveurs, ainsi que des itérations efficaces du point de vue du problème multiphysique. On cherche également à conserver le taux de convergence multiphysique, pour ne pas au contraire *sous-résoudre* le problème global en cherchant à limiter la sur-résolution.

L'idée générale de l'algorithme peut être décrite de la manière suivante. On considère donc deux solveurs, N et TH. Le premier solveur effectue une première itération et sauvegarde la norme initiale de son résidu $\|R_0^N\|$. Puis, le second solveur récupère les informations nécessaires ainsi que $\|R_0^N\|$ et calcule la norme initiale de son propre résidu $\|R_0^{TH}\|$. Il effectue ensuite $n \geq 1$ itérations jusqu'à ce qu'une des conditions suivantes soit remplie :

$$\|R_n^{TH}\| < \text{abs}_{\text{tol}} \quad \text{ou} \quad \frac{\|R_n^{TH}\|}{\|R_0^{TH}\|} < \text{rel}_{\text{tol}}^{TH},$$

avec :

$$\text{abs}_{\text{tol}} = \max(A\|R_0^N\|, \text{abs}_{\text{tol}}^{TH}),$$

auquel cas, le solveur N est de nouveau appelé avec des critères de convergence symétriques. On désigne ici par résidu l'erreur telle que calculée par les solveurs. On aura ici $R_0^N = N(x_0^N) - x_0^N$ par exemple. Les paramètres $\text{abs}_{\text{tol}}^{TH/N}$ et $\text{rel}_{\text{tol}}^{TH/N}$ sont respectivement les tolérances absolue et relative, dont les valeurs seraient utilisées si le solveur était utilisé seul. On note également l'apparition d'un coefficient A . Il s'agit d'un paramètre que doit choisir l'utilisateur, pour s'assurer que le résidu du solveur appelé va atteindre l'ordre de grandeur de celui de l'autre code. Numériquement, $A = 0.1$ fournit des résultats satisfaisants d'après [Sen18] et [LSV13]. Dans [Sen18], l'ordre de

grandeur des gains théoriques en termes de coûts de calcul est discuté. Il y apparaît que la méthode *Residual Balance* est plus performante que la méthode de Picard exceptée pour les problèmes faiblement couplés, pour lesquels le nombre d'itérations globales est généralement plus faible. Les résultats donnés indiquent un gain de temps d'un tiers, en considérant des taux de convergence constants, une convergence quadratique pour chacun des solveurs qui sont considérés par ailleurs comme ayant le même comportement et ayant besoin du même nombre d'itérations internes pour converger.

2.4.3.2 Algorithmes

La méthode du *Residual Balance* On notera dans ce paragraphe $\|R_{i,j_N}^N\|$ et $\|R_{i,j_{TH}}^{TH}\|$ les normes des résidus, respectivement pour les solveurs N et TH, à l'itération multiphysique i et pour l'itération interne au solveur j_N (respectivement j_{TH}) du solveur N (respectivement TH). On présente dans la suite l'algorithme du *Residual Balance* introduit par SENECAI dans [Sen18].

Critère d'arrêt On définit les critères d'arrêts pour chacun des deux solveurs dans les équations ci-dessous. On se place dans cet exemple dans le cas où le solveur N est appelé en premier. Il s'agit d'itérer jusqu'à ce que les résidus $\|R_{i,j_N}^N\|$ et $\|R_{i,j_{TH}}^{TH}\|$ vérifient :

$$\|R_{i,j_N}^N\| < \begin{cases} a \|R_{0,0}^N\| & \text{si } i = 0 \\ a \|R_{i-1,0}^{TH}\| & \text{si } i > 0 \end{cases}, \quad (2.4.1)$$

et ensuite :

$$\|R_{i,j_{TH}}^{TH}\| < a \|R_{i,0}^N\|. \quad (2.4.2)$$

a est un paramètre que l'utilisateur doit préciser, avec $a = 0.1$ fournissant de bons résultats.

Normalisation des résidus Dans le cas où les résidus des deux solveurs n'ont pas le même ordre de grandeur, il convient alors de les normaliser par leur précision cible respective, pour être en mesure de comparer les convergences des solveurs. Dans la majorité des cas, on a deux critères internes au solveur concernant la norme des résidus, l'un absolu et l'autre relatif. Par exemple, pour N, à l'itération multiphysique i , on itère jusqu'à avoir :

$$\|R_{i,j_N}^N\| < \varepsilon_a^N \quad \text{en critère absolu,}$$

ou bien :

$$\|R_{i,j_N}^N\| < \varepsilon_r^N \|R_{i,0}^N\| \quad \text{en critère relatif.}$$

Pour le solveur N, on normalise alors son résidu R_{i,j_N}^N à une itération multiphysique i et une itération interne j_N par :

$$\|\hat{R}_{i,j_N}^N\| := \frac{\|R_{i,j_N}^N\|}{\varepsilon^N},$$

avec :

$$\varepsilon^N = \max(\varepsilon_a^N, \varepsilon_r^N * \|R_{0,0}^N\|).$$

On réécrit alors les équations (2.4.1) et (2.4.2) avec les résidus normalisés :

$$\|\hat{R}_{i,j_N}^N\| < \begin{cases} a * \|\hat{R}_{0,0}^N\| & \text{si } i = 0 \\ a * \|\hat{R}_{i-1,0}^{TH}\| & \text{si } i > 0 \end{cases}, \quad (2.4.3)$$

et :

$$\|\hat{R}_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}\| < a \|\hat{R}_{i,0}^{\text{N}}\|. \quad (2.4.4)$$

On peut alors définir le résidu total pour le problème couplé, à l'itération multiphysique i comme étant :

$$\|R_i^{\text{tot}}\| := \|\hat{R}_{i,j_N}^{\text{N}}\| + \|\hat{R}_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}\|. \quad (2.4.5)$$

Il s'agit simplement de la somme des résidus respectifs de chacun des solveurs, chacun ayant été normalisé.

Adaptive Residual Balance Method Dans [Sen18], une variante est proposée dans laquelle la valeur du coefficient a dans (2.4.3) et (2.4.4) évolue au cours du calcul multiphysique. Il s'agit de l'*Adaptive Residual Balance Method*. Pour cela, on définit le taux de convergence du problème couplé comme étant le quotient du résidu total actuel, défini en (2.4.5), et de celui de l'itération précédente :

$$\rho_i := \frac{\|R_i^{\text{tot}}\|}{\|R_{i-1}^{\text{tot}}\|} \quad (2.4.6)$$

L'idée est d'au moins maintenir ce taux de convergence au cours du couplage. Il faut pour cela que le solveur actif voit son résidu diminuer d'au moins ρ_i par rapport au résidu du solveur inactif. Dans [Sen18], ce taux de réduction est même fixé à $\rho_i/2$, pour garantir une décroissance de ρ_i au cours de la simulation. On réécrit donc les équations (2.4.3) et (2.4.4) de la manière suivante :

$$\|\hat{R}_{i,j_N}^{\text{N}}\| < \begin{cases} a \|\hat{R}_{0,0}^{\text{N}}\| & \text{si } i = 0 \\ \frac{\rho_i}{2} \|\hat{R}_{i-1,0}^{\text{TH}}\| & \text{si } i > 0 \end{cases},$$

c'est-à-dire :

$$\frac{\|R_{i,j_N}^{\text{N}}\|}{\varepsilon^{\text{N}}} < \begin{cases} a \frac{\|R_{0,0}^{\text{N}}\|}{\varepsilon^{\text{N}}} & \text{si } i = 0 \\ \frac{\rho_i}{2} \frac{\|R_{i-1,0}^{\text{TH}}\|}{\varepsilon^{\text{TH}}} & \text{si } i > 0 \end{cases}.$$

Pour le second solveur, on a un critère équivalent, à savoir :

$$\frac{\|R_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}\|}{\varepsilon^{\text{TH}}} < \begin{cases} a \frac{\|R_{0,0}^{\text{N}}\|}{\varepsilon^{\text{N}}} & \text{si } i = 0 \\ \frac{\rho_i}{2} \frac{\|R_{i,0}^{\text{TH}}\|}{\varepsilon^{\text{TH}}} & \text{si } i > 0 \end{cases}.$$

Ainsi, après une itération globale, on a accès au taux de convergence global ρ_i , mais on a quand même besoin d'une valeur par défaut de a pour la première itération. On donne finalement dans l'algorithme 1 la méthode de l'*Adaptive Residual Balance*.

Dans le cas d'un couplage en boîtes noires entre des solveurs préexistants, la seule difficulté d'implémentation correspond à l'accès aux résidus initiaux $\|R_{i,0}^{\text{N}}\|$ et $\|R_{i,0}^{\text{TH}}\|$. En effet, on a rarement accès aux erreurs initiales ou intermédiaires lorsqu'on utilise des solveurs préexistants puisque la grandeur d'intérêt accessible est généralement l'erreur finale. Autrement, la méthode permet *a priori* de réaliser des couplages entre deux solveurs sans que l'utilisateur n'ait à choisir de paramètre.

Données : Critères de convergence multiphysique et précision sur les solveurs maximales demandées, valeur initiale de a

tant que Critères de convergence multi-physiques non-atteints **faire**

Solveur TH :

$$j_{TH} = 0$$

si $i = 0$ **alors**

$$\rho_0 = a$$

$$\|R_0^{tot}\| = \frac{\|R_{0,0}^{TH}\|}{\varepsilon^{TH}}$$

tant que $\|R_{0,j_N}^{TH}\| > \rho_0 \|R_{0,0}^{TH}\|$ **faire**

 On effectue une itération du solveur TH.

$$j_{TH} + = 1$$

sinon

$$\|R_i^{tot}\| = \frac{\|R_{i,0}^{TH}\|}{\varepsilon^{TH}} + \frac{\|R_{i-1,j_N}^N\|}{\varepsilon^N}$$

$$\rho_i = \frac{\|R_i^{tot}\|}{\|R_{i-1}^{tot}\|}$$

tant que $\|R_{i,j_{TH}}^{TH}\| > \frac{\rho_i}{2} \frac{\|R_{i-1,0}^N\|}{\varepsilon^N} \varepsilon^{TH}$ **faire**

 On effectue une itération du solveur TH.

$$j_{TH} + = 1$$

On échange les données entre le solveur TH et le solveur N, notamment $\|R_{i,0}^{TH}\|$ et

$$\|R_{i,j_{TH}}^{TH}\|$$

Solveur N :

$$\|R_{i+1/2}^{tot}\| = \frac{\|R_{i,0}^N\|}{\varepsilon^N} + \frac{\|R_{i,j_N}^{TH}\|}{\varepsilon^{TH}}$$

si $i = 0$ **alors**

$$\rho_{1/2} = a$$

sinon

$$\rho_{i+1/2} = \frac{\|R_{i+1/2}^{tot}\|}{\|R_{i-1/2}^{tot}\|}$$

$$j_N = 0$$

tant que $\|R_{i,j_N}^N\| > \frac{\rho_{i+1/2}}{2} \frac{\|R_{i,0}^{TH}\|}{\varepsilon^{TH}} \varepsilon^N$ **faire**

 On effectue une itération du solveur N.

$$j_N + = 1$$

$$i + = 1$$

On échange les données entre le solveur N et le solveur TH, notamment $\|R_{i,0}^N\|$ et

$$\|R_{i,j_N}^N\|$$

Algorithme 1 : Description de la méthode de l'Adaptive Residual Balance

2.4.3.3 Utilisation de l'*Adaptive Residual Balance* dans la littérature

SENECAL ET AL. explorent dans [SJ18] les performances de l'*Adaptive Residual Balance Method* sur différents exemples de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Les auteurs s'intéressent notamment à un benchmark correspondant à une éjection accidentelle de grappe de contrôle dans un réacteur à eau bouillante. L'utilisation de l'*Adaptive Residual Balance* permet une réduction par un facteur 2 environ du temps de calcul total du fait d'une réduction du nombre d'itérations mono-physiques réalisées.

Dans [RP20], REYNOLDS et PALMER utilisent également l'*Adaptive Residual Balance* pour coupler l'équation de transport neutronique à celles régissant les neutrons retardés pour un réacteur présentant un combustible liquide. Le gain de temps estimé en limitant la sur-résolution est d'un tiers.

Si elle a peu été utilisée dans la littérature jusque-là, la méthode de l'*Adaptive Residual Balance*, assez récente, semble malgré tout permettre un contrôle efficace de la sur-résolution entre les solveurs au cours de la simulation multiphysique en termes de nombre d'itérations mono-physiques effectuées et donc en termes de temps de calcul.

2.4.4 La méthode du *Dynamic Residual Balance*

Cette thèse a été l'occasion de proposer un nouvel algorithme de couplage, inspiré de l'*Adaptive Residual Balance*. Il s'agit de la méthode du *Dynamic Residual Balance*, dans lequel on a cherché à se libérer du paramètre a introduit dans l'algorithme 1, qui sert à initialiser les taux de convergence ρ_0 et $\rho_{1/2}$ pour chacun des solveurs. On verra en effet section 4.2 l'influence de ce paramètre a sur les performances de l'*Adaptive Residual Balance*. La version dite *Dynamic* proposée vise également à garantir la décroissance monotone des précisions calculées au cours du couplage, vers leur valeur respective. Cette méthode est détaillée au paragraphe 4.2.3.

2.5 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a introduit différentes méthodes de couplage couramment utilisées en multiphysique des réacteurs.

La méthode de Gauss–Seidel est la plus largement utilisée et la plus simple à mettre en place. Cependant, elle peut être lente à converger et, dans le cadre des couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique, sa stabilité n'est pas garantie. On est alors obligé d'introduire un facteur de relaxation pour stabiliser et accélérer le schéma de calcul couplé. La recherche d'une valeur satisfaisante pour ce facteur de relaxation doit se faire manuellement et sa valeur optimale dépend du problème considéré et des modélisations retenues. Une alternative est d'utiliser des méthodes de type relaxation dynamique, comme la méthode de la sécante, qui permettent de calculer au fur et à mesure du calcul multiphysique un facteur de relaxation satisfaisant.

Une autre approche consiste à implémenter des méthodes de type *JFNK* : l'idée est alors de se ramener à la recherche du zéro d'une fonction $F := f - \text{Id}$ et d'approximer le produit de sa jacobienne par un vecteur, pour pouvoir mettre en place un algorithme de Newton approché, permettant *a priori* une convergence plus rapide en termes de nombre d'itérations multiphysiques que la méthode de Gauss–Seidel. Cette approximation passe par un appel supplémentaire aux différents codes de calcul, appel qui peut en revanche se révéler coûteux en termes de temps de

calcul. De plus, un effort particulier doit être entrepris pour préconditionner la méthode. De ce fait, on ne pourra pas simplement l'utiliser pour des problèmes de nature différente.

L'accélération d'Anderson est une méthode visant quant à elle à accélérer directement la convergence du point-fixe. Il s'agit d'utiliser les informations contenues dans les précédentes itérations pour déterminer une nouvelle itérée accélérée. Elle offre l'avantage d'être facilement implémentable et de ne pas présenter de paramètres ou d'étapes qui seraient dépendants du problème considéré. Ses performances en termes de vitesse de convergence du problème multiphysique semblent prometteuses, malgré une attention particulière à porter à la définition du point-fixe qu'il s'agit d'accélérer.

Enfin, une dernière manière de réduire le temps de calcul des simulations multiphysiques est de réduire la sur-résolution au cours du calcul entre les différents solveurs impliqués. Cela peut se faire par exemple en limitant le nombre d'itérations autorisées à chaque appel des solveurs, et on parle alors de convergence partielle. Le niveau optimal de convergence partielle dépend du problème considéré et doit être déterminé manuellement. On peut autrement contrôler la précision demandée à chacun des codes de calcul au cours de la simulation. Il s'agit de méthodes de type *Residual Balance*. L'*Adaptive Residual Balance* permet ainsi de contrôler la précision demandée à chacun des solveurs sans avoir de paramètre à optimiser. On doit en revanche être en mesure d'avoir accès aux premières erreurs effectuées par les codes de calcul, à chaque appel, ce qui peut être une limitation. C'est également le cas pour la version *Dynamic* développée dans le cadre de cette thèse.

Dans le chapitre suivant, on définit le problème multiphysique qu'on étudie dans la suite et on met en place les cas d'étude qui serviront à étudier les différentes stratégies de couplage.

Chapitre 3

Mise en place du couplage multiphysique et des cas d'étude

On présente dans ce chapitre les cas d'étude qui nous servent par la suite à déterminer, à partir des différents algorithmes de couplage présentés dans le chapitre 2, les méthodologies de couplage les plus performantes en termes de temps de calcul et de nombre d'itérations effectuées. Pour cela, les codes de calcul qui sont utilisés dans la partie suivante sont introduits dans une première section, ainsi que les aspects multiphysiques concernant l'échange des données entre les solveurs. On retient le code de neutronique métier du CEA, APOLLO3®, ainsi que son module de contre-réactions thermohydraulique et thermique, THEDI. Le problème multiphysique est ensuite défini et les différentes échelles de modélisation sont données. On travaille ainsi à l'échelle crayons pour la neutronique et la thermique, et à l'échelle assemblage pour la thermohydraulique. Finalement, on introduit les deux cas d'étude qui serviront de support pour la comparaison et l'analyse des algorithmes de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Il s'agit d'un petit cœur de REP, issu d'un benchmark international. Ces deux cas d'étude permettent de comparer le comportement des différentes méthodes numériques pour des problèmes de tailles et de complexités variées.

Sommaire

3.1	Présentation des solveurs retenus	64
3.1.1	APOLLO3®	64
3.1.1.1	Présentation du code	64
3.1.1.2	Résolution de l'équation de transport MINOS	64
3.1.2	THEDI	66
3.1.2.1	Présentation du code	66
3.1.2.2	Transitoire stabilisé	68
3.1.3	C3PO	68
3.2	Mise en place des différents cas d'étude	69
3.2.1	Échelles de modélisations et définition du point fixe retenu	69
3.2.2	Mini cœur de REP	70
3.2.3	KAIST - Problème 1A	73
3.3	Bilan du chapitre	74

3.1 Présentation des solveurs retenus

Dans cette section, on introduit les codes de calcul qui seront utilisés dans la suite. On présente les solveurs neutronique et thermohydraulique retenus puis la librairie de couplage multiphysique, permettant d'échanger simplement des données entre les codes.

3.1.1 Apollo3®

3.1.1.1 Présentation du code

Le Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées ([SERMA](#)) est le service du [CEA](#) en charge du développement des codes de calcul neutronique. On peut par exemple citer les codes déterministes APOLLO2 [[SMS+88](#), [SZCD+10](#)] et CRONOS2 [[LLFM92](#)], respectivement dédiés aux calculs réseaux et cœur des [REP](#). Plus récemment, un nouveau code de calcul neutronique a été développé, APOLLO3®, permettant de réaliser à la fois les calculs réseaux et cœur du schéma à deux étapes introduit au paragraphe [1.1.2.2](#), pour toutes les filières de réacteurs.

APOLLO3® est un code de calcul déterministe développé en **C++** et **Fortran 90**. Il remplace APOLLO2, dans le but d'améliorer les performances du code, notamment en termes d'architecture logicielle. La partie dédiée au calcul réseau a été héritée d'APOLLO2 et enrichie. On ne s'attarde pas dans le cadre de ce travail sur celle-ci.

Concernant la partie dédiée au calcul à l'échelle du cœur, plusieurs solveurs sont disponibles pour résoudre l'équation de transport en stationnaire ([1.1.4](#)). MINOS permet de résoudre l'approximation SP_N introduite au paragraphe [1.1.3.2](#). En choisissant $N = 1$, on retrouve l'approximation de la diffusion. Du point de vue du maillage spatial, MINOS est utilisable sur des maillages cartésiens ou hexagonaux, en trois dimensions. La discrétisation spatiale des équations SP_N est faite à l'aide des éléments finis de Raviart-Thomas-Nédélec [[Néd86](#)]. MINARET [[LMM13](#)] est un second solveur implémenté dans APOLLO3®. Il permet de résoudre l'équation de transport neutronique *via* la méthode S_N . La discrétisation spatiale des équations résolues est faite à l'aide des éléments finis de Galerkin discontinue. Le maillage peut être en deux ou trois dimensions et peut être non-structuré.

On utilise dans la suite MINOS : en effet, la méthode SP_N ainsi que l'approximation de la diffusion sont les méthodes typiquement utilisées dans les études de sûreté et permettent un bon compromis entre temps de calcul et précision des résultats. Dans le paragraphe suivant, on se penche en détails sur l'implémentation du solveur SP_N dans MINOS.

3.1.1.2 Résolution de l'équation de transport Minos

L'implémentation du solveur SP_N dans MINOS est détaillée dans [[BL07](#)]. On donne ici les principales étapes du calcul, permettant de comprendre la manière dont est résolue cette approximation de transport ([1.1.1](#)).

Système matriciel résolu On repart du système ([1.1.7](#)) rendant compte du problème SP_N , on a pour rappel :

$$\begin{cases} T_i \vec{\phi}_i + H \vec{\nabla} \phi_p & = \vec{S}_i \\ H^T \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i + T_p \phi_p & = S_p \end{cases} .$$

On se donne alors deux bases fonctionnelles $\vec{\psi}_i$ et ψ_p . Si on projette la première équation sur $\vec{\psi}_i$ et qu'on multiplie la seconde par ψ_p , d'une part, et qu'on applique le théorème de Green-Ostrogradsky pour la première équation d'autre part, on obtient la formulation variationnelle du problème SP_N à savoir :

$$\begin{cases} - \int_{\mathfrak{D}} T_i \vec{\phi}_i \cdot \vec{\psi}_i - \int_{\partial \mathfrak{D}} (H \mathfrak{D}_p^{-1} H^{\mathbf{T}})(\vec{\phi}_i \cdot \vec{n})(\vec{\psi}_i \cdot \vec{n}) + \int_{\mathfrak{D}} H \vec{\nabla} \phi_p (\vec{\nabla} \cdot \vec{\psi}_i) = - \int_{\mathfrak{D}} \vec{S}_i \cdot \vec{\psi}_i \\ \int_{\mathfrak{D}} H^{\mathbf{T}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i \psi_p) + \int_{\mathfrak{D}} T_p \phi_p \psi_p = \int_{\mathfrak{D}} S_p \psi_p \end{cases} \quad (3.1.1)$$

On peut réécrire ce système sous forme matricielle. On donne ici la forme générale de celui-ci, pour chaque groupe d'énergie g , qu'on omet donc de préciser pour alléger les notations :

$$\begin{pmatrix} -\Gamma_x & 0 & 0 & B_x \\ 0 & -\Gamma_y & 0 & B_y \\ 0 & 0 & -\Gamma_z & B_z \\ B_x^{\mathbf{T}} & B_y^{\mathbf{T}} & B_z^{\mathbf{T}} & T \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \phi_i^x \\ \phi_i^y \\ \phi_i^z \\ \phi_e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -S_i^x \\ -S_i^y \\ -S_i^z \\ S_e \end{pmatrix}, \quad (3.1.2)$$

avec $\Gamma_d := A_d + A_d^b$ et $A_d := \sum_{\tau} \Sigma_i^{\tau} \int_{\tau} p_d q_d$, $A_d^b := H \sum_{\tau} (\Gamma_e^{-1} H^{\mathbf{T}}) \int_{\partial \tau \cap \partial \mathfrak{D}} p_d q_d$, $S_i^d := \sum_{\tau} \int_{\tau} S_i^d q_d$; $B_d := H \sum_{\tau} \int_{\tau} \frac{\partial p_d}{\partial d} v$, $T := \sum_{\tau} \Sigma_p^{\tau} \int_{\tau} uv$, $S_p := \sum_{\tau} \int_{\tau} S_p v$, où on a noté τ un élément de la triangularisation de \mathfrak{D} , u, v les fonctions de base pour le flux pair et p_d, q_d les fonctions de bases pour la composante d du flux impair.

Schéma itératif La résolution du problème de transport, ou des problèmes approximatés que sont la diffusion et la méthode SP_N se fait jusqu'à atteindre le niveau de précision souhaité sur le k_{eff} et sur le flux ϕ , déterminés avec la méthode de la puissance itérée comme définie au paragraphe 1.1.3.3. Dans le contexte SP_N , la source de fission, qu'on a noté $\mathcal{F}\psi$ dans le paragraphe 1.1.1, correspond à $\mathcal{F}\psi := \sum_g (\Sigma_f^g \phi_0^g)$. Une itération de la puissance itérée correspond à une itération dite externe.

Pour chaque itération externe, on doit déterminer un nouveau flux. Cela se fait en résolvant (3.1.2).

La résolution de ce système se fait avec un double niveau d'itérations, d'une part sur les variables d'espaces et d'autre part sur les groupes d'énergie. Concernant le couplage énergétique, il s'agit simplement d'une méthode de Gauss-Seidel par bloc, en commençant les blocs correspondants aux groupes les plus énergétiques vers les groupes les moins énergétiques. Pour chacun d'entre eux, on déduit de (3.1.2) un sous-système sur les composantes impaires du flux uniquement, en notant que :

$$T_p \phi_p = S_p - B_x^{\mathbf{T}} \phi_i^x - B_y^{\mathbf{T}} \phi_i^y - B_z^{\mathbf{T}} \phi_i^z. \quad (3.1.3)$$

Le système pour les composantes spatiales du flux impair est alors donné par :

$$\begin{pmatrix} W_x & B_x T^{-1} B_y^{\mathbf{T}} & B_x T^{-1} B_z^{\mathbf{T}} \\ B_y T^{-1} B_z^{\mathbf{T}} & W_y & B_y T^{-1} B_z^{\mathbf{T}} \\ B_z T^{-1} B_x^{\mathbf{T}} & B_z T^{-1} B_y^{\mathbf{T}} & W_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \phi_i^x \\ \phi_i^y \\ \phi_i^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_i^x \\ \tilde{S}_i^y \\ \tilde{S}_i^z \end{pmatrix}, \quad (3.1.4)$$

où on a noté $W_d := R_d + B_d T^{-1} B_d^T$ et $\tilde{S}_i^d := S_i^d + B_d T^{-1} S_p$. La résolution de ce système se fait par des itérations internes à chaque groupe d'énergie *via* un balayage des différentes directions. Le nombre N d'itérations internes est un paramètre fixé par l'utilisateur (typiquement $N = 1$ ou 2). Pour un groupe d'énergie, on définit le terme de courant directionnel comme $J_d = B_d^T \phi_i^d$ et le terme de courant total comme $J = \sum_d J_d$. Les itérations internes correspondent alors à une méthode de Gauss-Seidel par bloc, chaque bloc correspondant à une des trois composantes du flux impair. Pour chaque itération interne n , ce balayage des directions se fait selon le schéma suivant, où on note en indice la direction $[\cdot]_d$, $d = x, y, z$:

- $[X^n]_d = [S_p - J^n]_d + [J_d^n]_d$: mise à jour de source paire $[S_p - J^n]$ dans la direction d , avec la valeur du courant $[J_d^n]_d$ calculé pour la direction d à l'itération interne précédente (voir troisième point de ce schéma) ;
- $W_d[\phi_i^{d,n}]_d = [S_i^d]_d + B_d T^{-1} [X^n]_d$: mise à jour de la source impaire $[S_i^d]_d + B_d T^{-1} [X^n]_d$ dans la direction d et calcul de la composante impaire du flux dans cette même direction $[\phi_i^{d,n}]_d$;
- $[J_d^{n+1}]_d = B_d^T [\phi_i^{d,n}]_d$: calcul du courant pour l'itération interne suivante dans la direction d ;
- $[S_p - J^n]_{d+1} = [X^n]_d - [J_d^{n+1}]_d$: calcul de la source paire pour la prochaine direction $d + 1$

Une fois qu'on a réalisé N itérations internes, on met à jour le flux pair pour le groupe g considéré avec (3.1.3), et celui-ci est utilisé pour mettre à jour le terme source pour le groupe d'énergie suivant. Lorsque les G groupes d'énergie ont été traités, on calcule la nouvelle source de fission $S_p = \sum_g (\Sigma_f^g \phi_0^g)$, on met à jour le k_{eff} puis on normalise la nouvelle source de fission par cette nouvelle valeur du k_{eff} . On effectue ensuite une nouvelle itération externe.

3.1.2 Thedi

3.1.2.1 Présentation du code

Le Service de Thermo-hydraulique et de Mécaniques des Fluides est le service du CEA en charge du développement des codes de calcul thermohydraulique. On peut par exemple citer le code système CATHARE3 ou le code sous-canal FLICA4 qu'on a introduits au paragraphe 1.2.1.3. Au sein du SERMA, un module de contre-réaction thermohydraulique et thermique a été développé pour le code de neutronique APOLLO3® : il s'agit du module THEDI, présenté au paragraphe 1.2.1.3. Il ne permet de réaliser que des simulations multi-1D à l'échelle assemblage ou quart d'assemblage, avec une description thermique 1D radiale. Malgré tout, il permet de réaliser des simulations multiphysiques couplées satisfaisantes en termes de précision et de représentativité des résultats obtenus, comme cela est illustré par exemple dans [PLC19]. Plus rapide en termes de temps de calcul et étant le module de contre-réaction thermohydraulique et thermique dédié à APOLLO3®, THEDI est utilisé dans la suite de cette thèse pour la partie thermohydraulique et thermique des couplages. On présente dans la suite plus en détail ce solveur.

Thermo-hydraulique 1D à 4 équations Comme précisé au paragraphe 1.2.1.3, THEDI est basé sur un modèle à 4 équations, rendant compte de la conservation de la masse totale, de celle de la masse de vapeur, de la conservation de la quantité de mouvement et de celle de l'énergie interne. En termes de conditions aux limites, on impose :

- une température et un taux de vide aux deux extrémités (utilisés seulement pour les extrémités où le débit est entrant) ;
- une pression à une des deux extrémités ;

— à l'autre extrémité, une pression ou débit imposé ;

On doit finalement résoudre les 4 équations suivantes [Pat20b], dans lesquelles on a noté z l'axe vertical pris ascendant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Masse totale} : \\ \text{Masse vapeur} : \\ \text{Mouvement total} : \\ \text{Énergie interne totale} : \end{array} \right. \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m v_m}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial \alpha \rho_v}{\partial t} + \frac{\partial \alpha \rho_v v_m}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\alpha \rho_v (1 - \alpha) \rho_l v_r}{\rho_m} \right) = \Gamma \\ \frac{\partial v_m}{\partial t} + v_m \frac{\partial v_m}{\partial z} + \frac{1}{\rho_m} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{(1 - \alpha) \rho_l \alpha \rho_v v_r^2}{\rho_m} \right) \\ + \frac{1}{\rho_m} \frac{\partial p}{\partial z} + g + \frac{1}{\rho_m} C v_m |v_m| = 0 \\ \frac{\partial \rho_m e_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_m e_m v_m) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{(1 - \alpha) \rho_l \alpha \rho_v v_r (e_v - e_l)}{\rho_m} \right) + p \frac{\partial v_m}{\partial z} \\ + p \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\alpha (1 - \alpha) v_r (\rho_l - \rho_v)}{\rho_m} \right) = q + h_w (T_p - T_l) \end{array} ,$$

avec ρ_m la densité du mélange, ρ_v la densité de la vapeur, ρ_l la densité du liquide, v_m la vitesse du mélange, v_r l'écart de vitesse entre les phases, α le taux de vide (fraction volumique de vapeur), Γ la production de vapeur, p la pression, g l'accélération de pesanteur, C le coefficient de frottement avec la paroi, e_m l'énergie interne du mélange, e_v l'énergie interne de la vapeur, e_l l'énergie interne du liquide, T_l la température du liquide, q la source de chaleur volumique, h_w le coefficient d'échange thermique avec la paroi, T_p la température de la paroi, v_l la vitesse du liquide, v_v la vitesse de la vapeur, T_v la température de la vapeur, T_{sat} la température de saturation.

Ces équations sont complétées par des relations de fermetures explicitées dans [Pat20a]. On précise malgré tout la définition de la masse volumique du mélange et de sa vitesse, à savoir :

$$\rho_m := \alpha \rho_v + (1 - \alpha) \rho_l \text{ et } v_m := \frac{\alpha \rho_v v_v + (1 - \alpha) \rho_l v_l}{\rho_m}.$$

La résolution de ces équations se fait différences finies avec le schéma numérique Stability Enhancing Two-Step (SETS) [Mah79, Mah82].

Modèle thermique La thermique est résolue en 1D radiale : ainsi, le rayon d'un crayon combustible, de l'ordre du centimètre étant très petit devant sa hauteur, d'environ quatre mètres, cela rend les échanges thermiques axiaux négligeables devant ceux radiaux. Cela est renforcé par le fait que le gradient de température radial est beaucoup plus important que celui axial. Les conditions aux limites nécessaires sont les suivantes : une température imposée à une extrémité et une température imposée ou un flux de chaleur nul à l'autre extrémité. Il s'agit ensuite de résoudre le modèle de diffusion thermique standard, qu'on rappelle ici :

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) + P,$$

avec T la température, k la conductivité thermique, ρC_p la capacité thermique volumique, P la puissance volumique.

Pour cela, on a besoin d'explicitier trois non-linéarités des coefficients k , ρ et C_p . On suppose donc les caractéristiques de matériaux connues (k et ρC_p), caractéristiques qui peuvent dépendre de la température, ainsi que la puissance volumique. En termes de résolution, l'espace est discrétisé par différences finies et le laplacien est discrétisé comme une différence de flux de chaleur qui sont supposés proportionnels aux surfaces d'échange entre les mailles, définition consistante avec celle du laplacien en coordonnées sphériques, cylindriques ou cartésiennes. Le schéma numérique est implicite, inconditionnellement stable. Le système non linéaire obtenu est résolu avec l'algorithme de Newton.

3.1.2.2 Transitoire stabilisé

Pour s'approcher du comportement usuel des codes de calcul thermohydraulique et avoir accès aux erreurs relatives commises au cours du calcul thermohydraulique, une résolution d'un état stationnaire par un transitoire stabilisé a également été implémentée pour THEDI. Il s'agit de résoudre le problème thermohydraulique comme un transitoire stabilisé avec un pas de temps dt fixe. Pour cela, on définit l'erreur entre le pas de temps $n + 1$ et n comme :

$$\text{Res}_{n+1}^{\text{TH}} := \frac{\|\Delta X_{n+1}\|_2}{\|X_n\|_2}$$

avec $X := \left(\frac{T_l}{T_l^0}; \frac{P}{P^0}; \frac{v_m}{v_m^0}; \frac{\alpha}{\alpha^0}\right)$, où on a normalisé chacune des grandeurs physiques (les grandeurs avec un exposant 0 représentant des valeurs caractéristiques servant à normaliser les variables), et $\Delta X_{n+1} := X_{n+1} - X_n$. Une fois qu'on a atteint la précision souhaitée ε_{TH} , c'est-à-dire que $\text{Res}_{n+1}^{\text{TH}} < \varepsilon_{\text{TH}}$, on effectue un calcul thermique.

3.1.3 C3PO

Pour réaliser des couplages multiphysiques entre des codes de calcul existants, il est nécessaire de pouvoir les faire communiquer entre eux, c'est-à-dire concrètement de pouvoir échanger des champs physiques, qui ont *a priori* une représentation propre à chacun des solveurs. De plus, ces derniers travaillant sur des maillages *a priori* différents, on doit être en mesure de réaliser des opérations de projections et interpolations entre les différents maillages. La librairie de couplage Collaborative Code Coupling PlatForm (**C3PO**) [c3p] a été développée au **CEA** pour répondre à ce besoin.

Il s'agit d'une librairie **Python** proposant un ensemble de méthodes numériques pour réaliser les couplages entre codes calculs, ces derniers devant simplement disposer d'une interface ICoCo [DP12]. Elle s'appuie sur la plateforme SALOME [RC07] notamment pour la représentation des champs physiques en **MED** (Modèle d'Échange des Données). Cette standardisation du stockage et de la manipulation des données permet notamment de simplifier la modularité des couplages entre différents codes de calcul. **C3PO** met également à disposition l'ensemble de fonctions proposées par la librairie **MEDCoupling** permettant d'interpoler et de projeter les champs **MED** échangés par les solveurs couplés entre leurs maillages respectifs.

Parmi les méthodes de couplage proposées, on peut citer :

- la méthode du point fixe avec relaxation ou non ;
- l'accélération d'Anderson telle que proposée par WALKER dans [Wal11] a été implémentée dans le cadre de cette thèse ;

- la méthode du **JFNK** ;

Ont également été implémentées dans le cadre de ce travail la méthode de la sécante telle que présentée en section 2.1.5, celle de l'*Adaptive Residual Balance* telle qu'introduite au paragraphe 2.4.3.2, et sa version dynamique, détaillée en section 4.2.3.

3.2 Mise en place des différents cas d'étude

Pour étudier les différentes méthodes de couplage retenues en section 2.5, on met en place des cas d'étude caractéristiques des problèmes rencontrés en physique des réacteurs. Dans la suite, on introduit les deux cas tests à partir desquels les performances des différentes méthodes de couplage sont évaluées et comparées, notamment en termes de temps de calcul ainsi qu'en termes de nombre d'itérations mono et multiphysiques.

3.2.1 Échelles de modélisations et définition du point fixe retenu

Comme on l'a vu dans le chapitre 1, différentes finesses de discrétisation sont envisageables pour chacune des disciplines. On cherche dans ce travail à mener des études sur des cas représentatifs des études industrielles menées au **CEA** ou à **EDF** par exemple. Malgré tout, on souhaite trouver un compromis en termes de temps de calcul et précisions des résultats. On choisit donc d'avoir une modélisation à l'échelle crayons concernant la modélisation neutronique et thermique, tandis qu'on se place à l'échelle assemblage pour la thermohydraulique. On peut visualiser les échelles retenues figure 3.1.

Il convient également de définir le problème couplé que l'on souhaite résoudre. Comme on l'a vu par exemple en section 2.3.5, plusieurs possibilités de point fixe $f(x) = x$ existent en physique des réacteurs. Si note d'une part P_f la puissance combustible, P_w la puissance déposée dans le modérateur, T_f la température combustible et ρ_w la densité du modérateur, on peut ainsi introduire :

- N l'opérateur neutronique qui, à partir d'une nappe de température combustible et de la densité du modérateur calcule une nappe de puissance combustible et déposée dans le modérateur : $N(T_f, \rho_w) := (P_f, P_w)$;
- TH l'opérateur thermohydraulique, qui, à partir d'une nappe de puissance combustible et modérateur, met à jour celle de la température combustible et de la densité du modérateur : $TH(P_f, P_w) := (T_f, \rho_w)$.

On peut alors considérer :

- un point fixe sur l'ensemble des inconnues :

$$x := \begin{pmatrix} P_f \\ P_w \\ T_f \\ \rho_w \end{pmatrix} \text{ et } f(x) := \begin{pmatrix} N(T_f, \rho_w) \\ TH(P_f, P_w) \end{pmatrix} ;$$

- un point fixe sur les grandeurs thermohydrauliques uniquement :

$$x := \begin{pmatrix} T_f \\ \rho_w \end{pmatrix} \text{ et } f(x) := TH(N(T_f, \rho_w)) ;$$

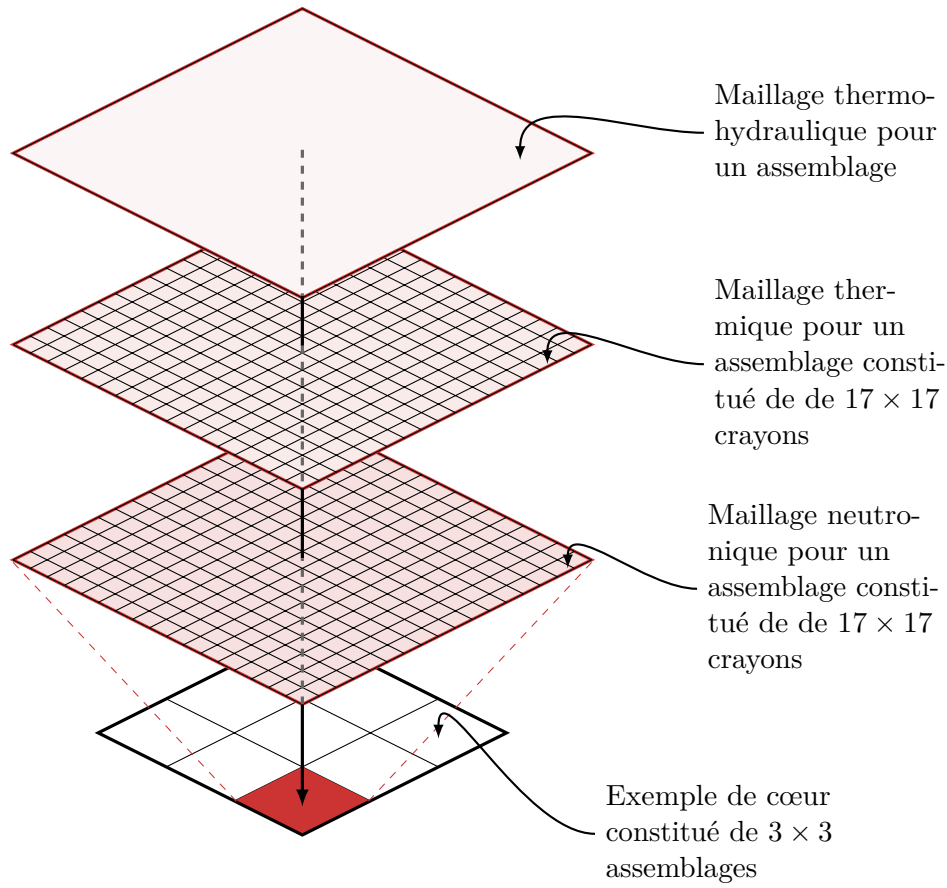


FIGURE 3.1 – Description des échelles de modélisation retenues pour la neutronique, thermohydraulique et thermique.

— un point fixe sur les nappes de puissance uniquement :

$$x := (P_f, P_w) \text{ et } f(x) := N(\text{TH}(P_f, P_w)); \quad (3.2.1)$$

On choisit dans la suite ce dernier problème à résoudre. Il permet en effet d'avoir des inconnues présentant la même unité. Dans la suite, on introduit les deux cas d'étude qui servent d'appui pour comparer les performances des méthodes numériques retenues en section 2.5 en termes de réduction du temps de calcul global, vitesse de convergence et réduction du nombre d'itérations mono et multiphysiques. Finalement, le schéma de couplage retenu est résumé par la figure 3.2.

3.2.2 Mini cœur de REP

Le premier cas auquel on s'intéresse est un mini-cœur de REP constitué de 5×5 assemblages, développé par CATTANEO dans le cadre de ses recherches sur le développement d'un modèle *High Fidelity* d'un cœur de REP [Cat20, CLM⁺21]. Les assemblages sont entourés d'un réflecteur lourd, composé d'acier inoxydable à 95%, le reste étant composé d'eau. Les assemblages combustibles sont composés d'oxyde d'uranium enrichi à 4%, dont la carte de chargement en *burn-up* est donnée figure 3.3. D'un point de vue géométrique, les crayons sont répartis périodiquement au sein des assemblages, chacun mesurant environ 21cm de large. La partie active du cœur mesure 4 mètres

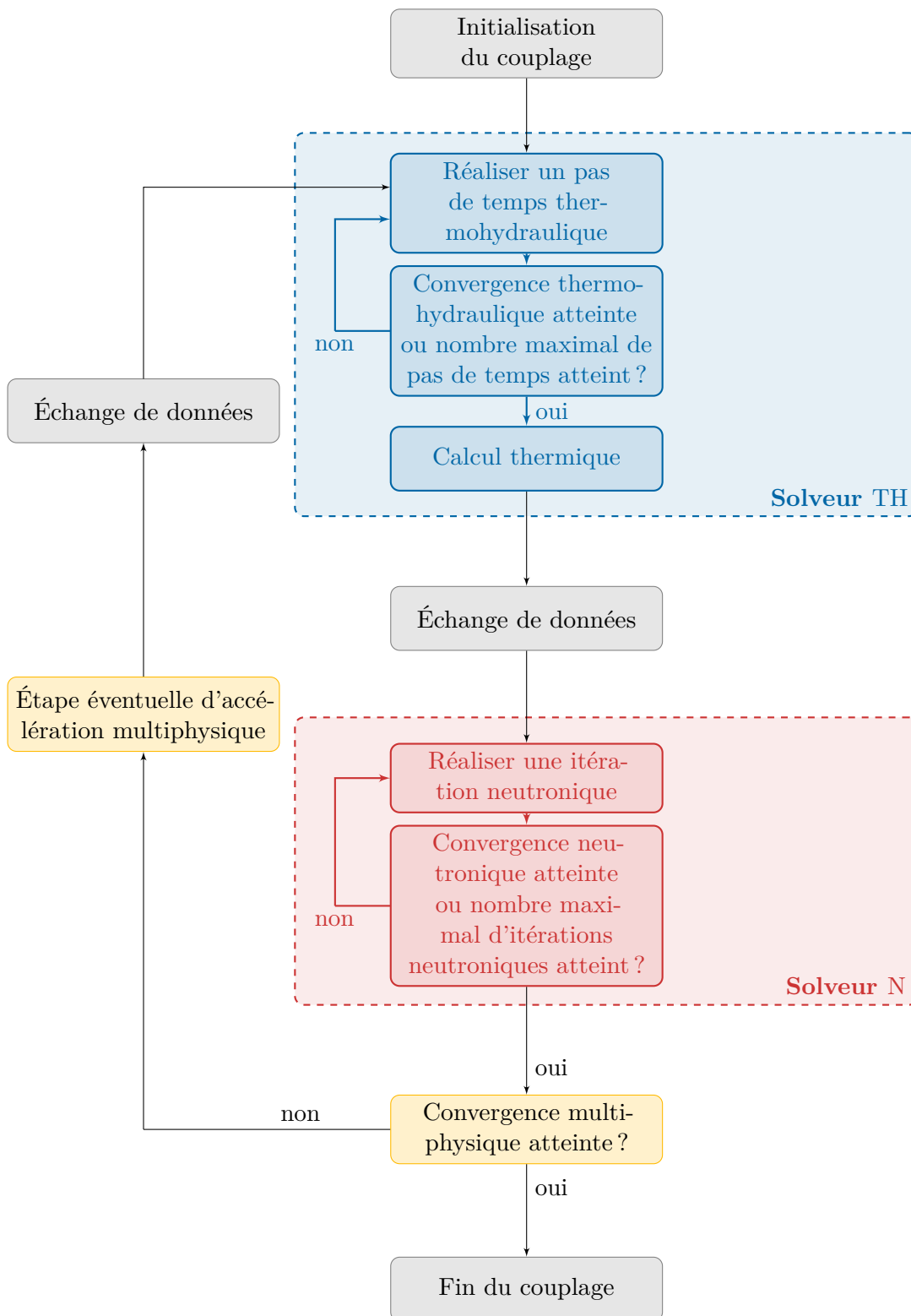


FIGURE 3.2 – Représentation schématique du problème multiphysique étudié : l'étape d'accélération multiphysique peut correspondre à une itération de l'accélération d'Anderson ou de la méthode de la sécante par exemple, ou simplement à l'application d'une relaxation fixe.

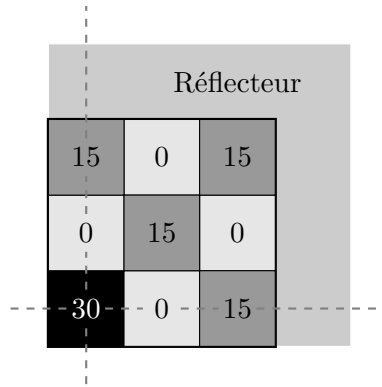


FIGURE 3.3 – Carte de chargement du quart nord-est du mini-cœur de REP ; les valeurs de *burn-up* sont indiquées sur chacun des assemblages et sont données en MWd/kg.

Critère de convergence neutronique	Critère de convergence thermohydraulique	Critère de convergence multiphysique
$\begin{cases} 1 \times 10^{-5} & \text{pour le flux} \\ 1 \times 10^{-6} & \text{pour le } k_{\text{eff}} \end{cases}$	1×10^{-8}	5.5×10^{-5}

TABLEAU 3.1 – Critères de convergence relatifs retenus pour le mini-cœur.

et est entourée axialement par du réflecteur également, mesurant également 21cm radialement et respectivement 18cm et 26cm axialement, en bas et en haut du cœur.

En termes de conditions nominales d'exploitation, le débit modérateur est fixé à 2450kg.s^{-1} et la température d'entrée du modérateur à 566K pour une pression en sortie du cœur de 157bar. La puissance nominale considérée est de 450MW thermique. L'ensemble de la puissance générée dans un assemblage, par les réactions de fission par exemple, n'est pas déposée en totalité dans les crayons combustibles. Une partie de celle-ci est directement déposée dans le modérateur. On fixe à 2.6% la part de la puissance générée dans un assemblage qui sera considérée directement déposée dans le modérateur présent à l'intérieur dudit assemblage. Il s'agit d'une répartition classique dans les couplages entre neutronique et thermohydraulique, qu'on peut par exemple retrouver dans [Cat20]. Enfin, on considère un coefficient d'échange thermique constant pour l'épaisseur d'hélium, décrit en section 1.4.3, et ce, pour l'ensemble des assemblages. On retient : $h_{\text{gap}} = 5000 \text{W/m}^2/\text{K}$, ce qui correspond à une valeur typique pour des assemblages en début de cycle. Du fait des symétries, on ne simule que le quart nord-est du cœur. Finalement, on considère du vide comme condition aux limites neutronique dans toutes les directions.

Enfin, d'un point de vue neutronique, on détermine le flux *via* l'approximation de la diffusion, avec 8 groupes d'énergie. On peut noter qu'il s'agit ici d'une modélisation peu répandue, associée à une description à l'échelle crayon du problème neutronique : l'hypothèse de la diffusion est généralement utilisée avec 2 groupes d'énergie, pour une modélisation à l'échelle assemblage. On fait ici le choix de complexifier le calcul d'un point de vue neutronique, notamment pour rendre la résolution du problème plus coûteux en termes de temps de calcul. Finalement, on donne dans le tableau 3.1 les différents critères de convergence retenus pour ce cas d'étude. Notons qu'ils correspondent à des critères de convergence mono-physique plus poussés que les valeurs par défauts associées à chacun des solveurs, à savoir 1×10^{-4} et 1×10^{-5} respectivement pour

le flux et le k_{eff} pour MINOS et 1×10^{-6} pour la thermohydraulique avec THEDI. Le critère de convergence multiphysique correspond lui à un critère plus souple que la valeur par défaut de C3PO, correspondant à 1×10^{-5} . Un critère plus resserré pour la précision multiphysique aboutit en effet à un grand nombre d'itérations multiphysiques finales constitués uniquement d'une itération neutronique et d'un pas de temps thermohydraulique. La valeur finale retenue permet d'échapper à ce phénomène.

3.2.3 KAIST - Problème 1A

Le problème 1A du benchmark KAIST est initialement issu d'un problème uniquement neutronique, en deux dimensions. On donne le schéma du cœur figure 3.4. L'ensemble des considérations géométriques peut être trouvé dans [kai]. Les différents types d'assemblage constituant le cœur y sont également détaillés : on retient que l'enrichissement varie d'un assemblage à l'autre et que certains crayons dans les assemblages notés BA sont constitués de gadolinium, un poison neutronique consommable dont le but est de contrôler la réactivité dans le cœur et dont les effets diminuent au fur et à mesure qu'il est soumis à un flux neutronique. Le type de combustible varie également, puisqu'en plus de l'oxyde d'uranium, on trouve du MOX, un mélange d'uranium et de plutonium utilisé en France notamment. D'une manière générale, la complexité de ce cas d'étude est plus grande que celle du mini-cœur décrit au paragraphe précédent.

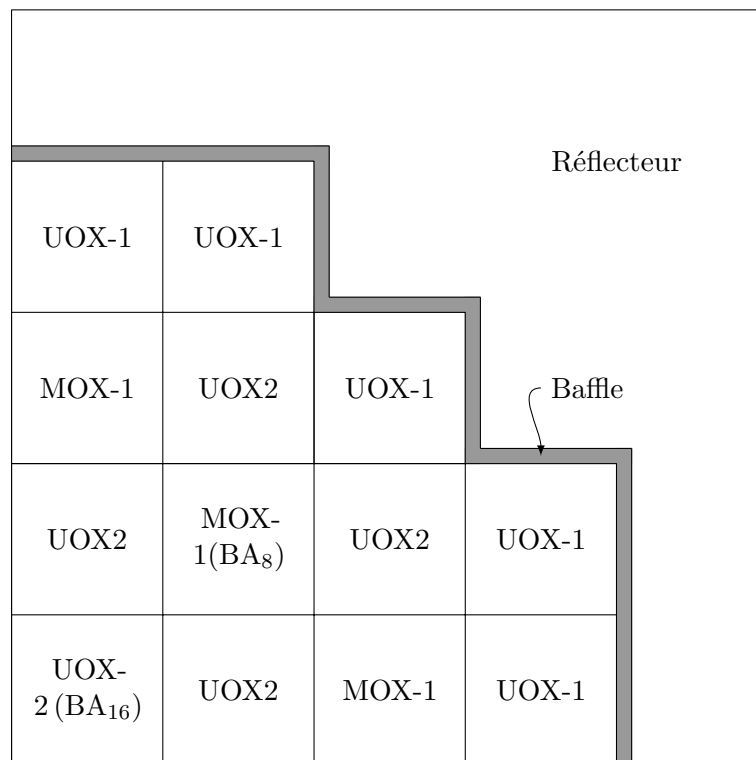


FIGURE 3.4 – Représentation schématique du benchmark KAIST-Problème 1A

Pour s'inscrire dans une démarche reproductible, on modifie ce cas d'étude pour le rendre multiphysique. Pour cela, on extrude la géométrie pour modéliser un cœur en trois dimensions d'une hauteur active de 2m, et, si la température combustible est fixée initialement à 900K, on la mettra à jour, tout comme la densité du modérateur, selon le schéma de couplage donnée en 3.2.

Critère de convergence neutronique	Critère de convergence thermohydraulique	Critère de convergence multiphysique
$\begin{cases} 1 \times 10^{-4} & \text{pour le flux} \\ 1 \times 10^{-5} & \text{pour le } k_{\text{eff}} \end{cases}$	1×10^{-6}	1×10^{-5}

TABLEAU 3.2 – Critères de convergence relatifs retenus pour le problème 1A de KAIST.

On initialise uniformément la température modérateur à 570K. Elle est mise à jour au cours du couplage en fonction de la densité du modérateur. Le coefficient d'échange thermique est également gardé constant à $h_{\text{gap}} = 5000\text{W}/\text{m}^2/\text{K}$. Ici encore, du fait des symétries, on ne simule que le quart nord-est. Les conditions aux limites à l'extérieur du réflecteur sont du vide. Le débit massique est fixé à $3575\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ et la température du modérateur à l'entrée du cœur à 570K, pour une pression en sortie du cœur fixé à 157 bar. On se place à 50% de la puissance nominale, fixée à l'origine à 900MW, toutes les barres de contrôles étant extraites du cœur. On baisse le niveau de puissance pour obtenir, sans barre de contrôle, une nappe de puissance garantissant un écoulement liquide, sans ébullition.

Enfin, d'un point de vue neutronique, on utilise l'approximation SP_3 pour déterminer une solution approchée du flux, avec 8 groupes d'énergie. On peut noter qu'il s'agit ici d'une modélisation classique : on peut par exemple citer les travaux de CATTANEO [Cat20], dans lesquels il présente cette modélisation neutronique comme un bon compromis entre temps de calcul et précision du résultat. Finalement, on donne dans le tableau 3.2 les différents critères de convergence retenus pour ce cas d'étude qui correspondent aux valeurs par défaut de MINOS, THEDI et C3PO.

3.3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a dans un premier temps introduit les solveurs neutronique d'une part et thermohydraulique et thermique d'autre part qui sont utilisés dans la suite pour mettre en place le couplage multiphysique. Il s'agit respectivement du solveur SP_N MINOS d'APOLLO3®, code métier en neutronique développé au CEA, et du solveur THEDI, basé sur un modèle à 4 équations. Ce dernier est le module de contre-réactions également développé au CEA pour d'APOLLO3®. Ces deux solveurs ont ainsi naturellement vocation à être couplés lors d'études multiphysiques : il s'agit donc d'un cadre particulièrement adapté pour la mise en place d'une méthodologie de couplage qui se veut efficace en termes de temps de calcul et de nombre d'itérations mono et multiphysiques. De ce point de vue, le couplage est réalisé avec la librairie Python C3PO, permettant de mettre en place des schémas de couplage tel que présentés par la figure 3.2.

Ensuite, on a défini le problème mathématique qu'on souhaite résoudre, correspondant au couplage entre un solveur neutronique et un solveur thermohydraulique et thermique, couplage décrivant l'état stationnaire d'un cœur de réacteur. On cherche ainsi à résoudre un point fixe sur la nappe de puissance neutronique, donné par l'équation (3.2.1), puissance générée principalement du fait des réactions de fission ayant lieu dans un cœur de REP. Les échelles retenues pour les différentes modélisations ont également été introduites : on considère ainsi une description à l'échelle cellule pour la neutronique et la thermique et une description à l'échelle de l'assemblage pour la thermohydraulique. Cette modélisation correspond à un compromis entre temps de calcul et précision des résultats physiques obtenus.

Enfin, deux cas d'études ont été mis en place : l'objectif est d'étudier les performances des algorithmes de couplage retenus en section 2.5 pour différentes tailles de cœur de réacteur et différents types d'assemblage combustible. On a ainsi développé :

- un petit cœur de REP constitué de 5×5 assemblages d'oxyde d'uranium enrichi à 4% et ayant des caractéristiques géométriques correspondantes à celles des REP français. Pour ce cas, on utilise l'approximation de la diffusion déterminer une approximation du flux neutronique solution de l'équation de transport ;
- le cœur de réacteur correspondant au problème 1A du benchmark KAIST [kai], constitué d'assemblage d'oxyde d'uranium et de MOX. Les assemblages présentent des taux d'enrichissement différents et certains incluent des crayons en gadolinium, poison neutronique consommable. Par rapport au petit cœur de REP, ce cas d'étude est donc plus complexe d'un point de vue neutronique. Sa petite taille, 2 mètres de hauteur, rend en revanche le couplage plus stable. On utilise la méthode SP_3 pour déterminer une approximation du flux neutronique avec MINOS.

On s'est donné des niveaux de précision à atteindre différents en fonction du cas d'étude, pour le problème neutronique, thermohydraulique et thermique et enfin pour le problème général multiphysique : cela permet de déterminer les performances des méthodes de couplage pour différents niveaux de précision.

Conclusion de la première partie

Dans cette première partie, on a introduit les différentes physiques permettant de décrire un état stationnaire d'un cœur de REP. Pour chacune d'entre elles, on s'est intéressé aux différentes échelles de modélisation possibles et on a décrit quelques problèmes caractéristiques de ces échelles de modélisation. Chacun de ces problèmes peut être décrit par un système d'équations non-linéaires. On peut alors développer un solveur pour résoudre directement le problème dans son ensemble : c'est l'approche monolithique. Une autre méthode, plus simple, pour résoudre un tel système est celle du couplage en boîtes noires : il s'agit alors d'utiliser des codes de calcul mono-physique préexistants, permettant chacun de résoudre une sous-partie du problème multiphysique et d'itérer entre ces solveurs jusqu'à atteindre la convergence globale de l'ensemble. L'utilisation de codes de calcul préexistants permet de limiter les efforts de développement et de pouvoir modéliser un large éventail de situations physiques. On se restreint dans cette thèse au couplage en boîtes noires.

Dans ce cadre, la modélisation multiphysique de cœur de REP peut conceptuellement se ramener à résoudre un large système d'équations différentielles non-linéaires. Concrètement, on cherche alors à déterminer le point fixe d'une fonction f rendant compte de ce système. Différentes méthodes numériques permettant de résoudre ou d'accélérer la résolution de ce type de problème ont été présentées dans un second temps.

La méthode de Gauss-Seidel est la méthode la plus simple et répandue pour réaliser des couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Elle converge cependant lentement et peut présenter des problèmes de stabilité. Généralement, on peut améliorer ses performances et améliorer sa stabilité en introduisant un facteur de relaxation, dont il faut malgré tout déterminer une valeur satisfaisante, en fonction du problème étudié. La méthode de la sécante permet de s'épargner cette recherche et de calculer au fur et à mesure du calcul multiphysique un facteur de relaxation satisfaisant.

L'accélération d'Anderson connaît un fort intérêt dernièrement dans la communauté de la multiphysique des réacteurs. Cette méthode cherche directement à accélérer la résolution du point fixe, en tirant parti des informations portées par les m dernières itérations. Son utilisation permet d'augmenter la vitesse de convergence et de stabiliser le calcul sans avoir à introduire de facteur de relaxation.

On peut également essayer de limiter la sur-résolution entre les solveurs monophysiques au cours du calcul multiphysique. Sans augmenter la vitesse de convergence, on est alors capable de diminuer le temps de calcul global en réduisant le nombre d'itérations monophysiques effectuées par chacun des solveurs. Cela peut passer par de la convergence partielle des solveurs ou l'implémentation de méthodes de type *Residual Balance*. Ces dernières nécessitent d'avoir accès aux erreurs monophysiques réalisées par chacun des solveurs, à chaque appel.

Enfin, les méthodes de type JFNK ont été présentées. On cherche alors à résoudre un problème équivalent à celui du point fixe, à savoir la recherche du zéro de la fonction $F := f - Id$. L'idée est d'approcher le produit de la jacobienne de F par un vecteur Δx pour pouvoir mettre en place un

algorithme de type Newton. Si les performances en termes de réduction du nombre d'itérations sont prometteuses, cela nécessite une étape de préconditionnement, qui dépend alors des problèmes considérés et demande des ressources en termes de développement plus importantes.

L'objectif de cette thèse est de déterminer un ensemble de méthodes et stratégies de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique, devant être applicables de manière systématique et efficace à un large panel de problèmes, en termes de vitesse convergence du calcul multiphysique couplé, de minimisation du temps de calcul associé et du nombre d'itérations multi et mono physiques effectuées, sans être spécifiques à chaque étude potentielle. On cherche ainsi à déterminer des algorithmes de couplage dont l'efficacité n'est pas dépendante d'une étape d'optimisation qui dépendrait du problème considéré. De ce fait, il nous paraît pertinent de s'intéresser dans la suite à la relaxation dynamique *via* la méthode de la sécante, ainsi qu'à l'accélération d'Anderson et aux méthodes de type *Residual Balance*. À l'inverse, l'importance de l'étape du préconditionnement pour la méthode *JFNK* nous pousse à l'écartier. Enfin, l'étude de l'introduction d'une relaxation dans la méthode de Gauss-Seidel ainsi que l'utilisation de la convergence partielle doivent nécessairement être abordées, étant donné leur utilisation systématique dans les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique, notamment dans les études industrielles, et ce même si on souhaite avoir à disposition des méthodes de couplage dont les performances ne passent pas par l'optimisation de ces paramètres.

Dans un dernier chapitre, les solveurs utilisés pour les aspects neutronique d'une part et thermohydraulique et thermique d'autre part ont été présentés, ainsi que la librairie de couplage permettant de réaliser les couplages. Il s'agit respectivement d'APOLLO3®, de THEDI et de C3PO. On a également mis en place deux cas d'étude représentatifs de la multiphysique d'un réacteur. Le premier est un mini-cœur de *REP* tandis que le second est issu d'un benchmark international neutronique, KAIST, qu'on a modifié pour en faire un problème multiphysique.

Dans la suite, on cherche à comparer les performances de ces différentes méthodes numériques aussi bien en termes de temps de calcul qu'en nombre d'itérations mono et multiphysiques effectuées. L'objectif est ainsi de déterminer les méthodologies et stratégies de couplage les plus efficaces et générales lorsqu'il s'agit de déterminer un état stationnaire de cœur de *REP*.

Deuxième partie

Optimisation d'un couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique

Table des matières de la partie II

Introduction de la deuxième partie	83
4 Mise en place d'une méthodologie pour les couplages en boîtes noires	85
4.1 Optimisation du facteur de relaxation et du niveau de convergence partielle	86
4.1.1 Optimisation du facteur de relaxation	86
4.1.2 Mise en évidence du niveau de convergence partielle optimal et du lien avec la relaxation	89
4.1.3 Apport du calcul couplé par rapport aux simulations mono-physiques	94
4.2 Développement d'une méthode de type <i>Residual Balance</i> sans paramètre libre	95
4.2.1 Implémentation de la méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> dans C3PO	95
4.2.2 Mise en évidence de la capacité de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> à contrôler la sur-résolution lors du couplage	96
4.2.3 Développement de la méthode <i>Dynamic Residual Balance</i> et étude de ses performances	100
4.3 Limites des méthodes d'accélération par rapport à la convergence partielle	105
4.3.1 Implémentation de l'accélération d'Anderson et de la méthode de la sécante dans C3PO	105
4.3.2 Mise en évidence des limites des méthodes d'accélération sans convergence partielle	105
4.3.3 Impact de la convergence partielle sur les méthodes d'accélération	109
4.4 Bilan du chapitre	116
5 Optimisation des couplages en boîtes noires via l'accélération de la résolution du problème à valeur propre dans Minos	119
5.1 Implémentation de l'accélération d'Anderson pour MINOS	120
5.1.1 Définition du point fixe complet à accélérer et implémentation d'Anderson dans MINOS	120
5.1.2 Validation de l'approche et mise en évidence de ses performances	121
5.2 Optimisation de l'implémentation de l'accélération d'Anderson	124
5.2.1 Prise en compte de la linéarité entre la source et le flux dans l'accélération d'Anderson	124
5.2.2 Performance de l'accélération d'Anderson appliquée à la source et répercutée sur le flux	127

5.2.3	Choix retenus dans l'implémentation d'Anderson	129
5.2.4	Optimisation de la stratégie de lancement	129
5.2.5	Impact mémoire de l'accélération d'Anderson	133
5.3	Impact d'une neutronique accélérée sur les couplages en boîtes noires	134
5.3.1	Performance des couplages avec convergence fine	134
5.3.2	Performance des couplages à convergence partielle	139
5.4	Bilan du chapitre	143
6	Méthodologie pour les couplages intrusifs	145
6.1	Développement d'un schéma de couplage intrusif sur le flux neutronique convergé .	146
6.1.1	Conservation de la cohérence entre le flux et la nappe de puissance	146
6.1.2	Développement d'un couplerSolverAPI	147
6.1.3	Changement de paradigme	149
6.2	Intérêt de l'approche hybride pour les couplages avec convergence partielle	149
6.2.1	Accélération des couplages hybrides avec Anderson	149
6.2.2	Introduction des couplages bas niveau	156
6.3	Optimisation des couplages hybrides à convergence fine	158
6.4	Bilan du chapitre	166
	Conclusion de la deuxième partie	169

Introduction de la deuxième partie

L'objectif de cette partie est de mettre en œuvre les algorithmes de couplage vus précédemment, entre le solveur neutronique MINOS d'APOLLO3® d'une part et celui thermohydraulique et thermique THEDI d'autre part. L'enjeu est multiple. On cherche ainsi à élaborer des méthodes de couplage garantissant la convergence des simulations multiphysiques. Il s'agit également de contrôler le temps nécessaire à la réalisation des calculs couplés, mais aussi de limiter le nombre total d'itérations monophysiques effectuées au cours de ces simulations. Pour comparer les performances de ces méthodes de couplage, on s'appuie sur les deux cas d'étude présentés au chapitre 3.

Dans le chapitre 4, on s'intéresse aux couplages en boîtes noires. Il s'agit dans un premier temps, d'utiliser la méthode de Gauss-Seidel et d'optimiser le niveau de convergence partielle et la valeur du facteur de relaxation. Cette optimisation est, comme nous le verrons, dépendante du cas d'étude considéré. Cela permet également d'avoir à disposition un temps de calcul global minimal de référence, qui nous servira dans la suite d'objectif à atteindre. Ensuite, on évalue les performances de l'*Adaptive Residual Balance* et on en propose une variante, la méthode du *Dynamic Residual Balance*, permettant de contrôler plus finement la décroissance monotone des précisions imposées aux solveurs au cours du calcul multiphysique. Enfin, on met en évidence les limites des méthodes d'accélération (accélération d'Anderson et méthode de la sécante) pour réduire le temps de calcul du couplage, principalement en raison de la convergence rapide des problèmes multiphysiques considérés et du grand nombre d'itérations neutroniques effectuées à chaque appel de MINOS. En revanche, elles permettent de stabiliser le schéma numérique. Combinées à la convergence partielle, les performances de ces dernières méthodes sont dégradées : la convergence partielle introduit en effet l'équivalent d'un bruit numérique dans la mémoire d'Anderson ou de celle de la méthode de la sécante, ce qui dégrade la qualité des itérées accélérées produites et ralentit donc *in fine* la convergence multiphysique.

Dans le chapitre 5, on cherche à accélérer la résolution des équations SP_N dans MINOS, afin de rendre compétitifs les calculs couplés avec convergence fine des solveurs. Pour cela, on implémente l'accélération d'Anderson comme méthode d'accélération de la méthode de la puissance itérée. Cela permet de réduire d'un facteur 3 à 7 le nombre d'itérations neutroniques. Il est par ailleurs possible de tirer parti de la linéarité entre le flux et la source de fission pour réduire le surcoût par itération neutronique, en termes de temps de calcul : il s'agit d'appliquer l'accélération d'Anderson aux termes sources uniquement, et de maintenir la cohérence entre le flux et la source en appliquant les coefficients d'Anderson aux composantes du flux dans un second temps. Cela permet de réduire le surcoût en temps de calcul associé à l'utilisation de l'accélération d'Anderson d'un facteur 3 à 7. Finalement, on met en évidence l'apport d'une convergence rapide du solveur MINOS pour les couplages multiphysiques : on montre en effet qu'on est désormais en mesure de réaliser des calculs couplés avec convergence fine en un temps raisonnable. Combinée à des méthodes d'accélération pour le couplage multiphysique, comme la méthode de la sécante ou l'accélération d'Anderson,

qu'on applique toutes les deux à la nappe de puissance, on est par ailleurs en mesure de garantir la stabilité du couplage et sa convergence en un temps de calcul comparable aux cas optimisés qu'on a déterminés au chapitre 4.

Finalement, on s'intéresse dans le chapitre 6 à des couplages intrusifs. Il s'agit de mettre en place des couplages multiphysiques sur le flux neutronique et non plus sur la nappe de puissance. Cela doit permettre d'améliorer les performances de l'accélération d'Anderson, appliquée comme algorithme de couplage multiphysique, en lui donnant accès aux grandeurs bas niveaux, dont dépend l'initialisation du solveur neutronique. Dans un premier temps, on montre l'intérêt de ces couplages intrusifs, dits hybrides, en termes de réduction du nombre d'itérations neutroniques, lorsque la convergence partielle est utilisée. Pour cela, on met notamment en place un couplage dit bas niveau, dans lequel on met à jour les sections efficaces à chaque itération neutronique, ce qui implique donc un calcul de thermohydraulique. Dans un second temps, on propose une méthodologie de couplage hybride avec convergence fine des solveurs et garantissant la cohérence entre les grandeurs physiques d'intérêts du couplage. On démontre l'intérêt de cette approche en termes de vitesse de convergence multiphysique.

Chapitre 4

Mise en place d'une méthodologie pour les couplages en boîtes noires

L'objectif de ce chapitre est de déterminer les méthodes de couplage en boîtes noires les plus efficaces en termes de temps de calcul total et nombre d'itérations mono et multiphysiques pour le calcul d'un état stationnaire de cœur de REP. On compare donc ici les différentes méthodes qu'on a retenues à la conclusion du chapitre précédent, à savoir la méthode de la sécante, l'accélération d'Anderson et l'*Adaptive Residual Balance*, en termes de temps de calcul et vitesse de convergence multiphysique. On porte une attention particulière à leur caractère généralisable : on entend par là qu'une technique de couplage nécessitant une optimisation précise de certains paramètres pour permettre une convergence rapide du problème multiphysique n'est pas considérée comme étant une approche satisfaisante pour la mise en place d'une méthodologie de couplage en boîtes noires. Finalement, il s'agit de comparer ses méthodes en termes de nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques, de temps de calcul total et de présence de paramètres numériques cas-dépendants. Pour rappel, on s'intéresse ici au problème stationnaire défini sur la nappe de puissance :

$$x := (P_f, P_w) \text{ et } f(x) := N(\text{TH}(P_f, P_w)).$$

Les définitions de P_f et P_w peuvent être trouvées en section 3.2.1 et les solveurs correspondants aux opérateurs N et TH respectivement au paragraphe 3.1.1.1 et 3.1.2.1.

Dans une première section, on explore les approches avec facteur de relaxation fixé introduites en section 2.1.3 et avec convergence partielle, présentées en section 2.4.1. On met en évidence l'importance du choix de ces paramètres et leur dépendance au cas d'étude considéré. Dans une seconde section, on étudie les performances de l'*Adaptive Residual Balance*, détaillée au paragraphe 2.4.3.2, et on développe une méthode permettant de contrôler plus simplement la décroissance des précisions imposées à chacun des solveurs au cours de la simulation multiphysique, dite *Dynamic Residual Balance*. Enfin, on met en évidence les limites de la méthode de la sécante et de l'accélération d'Anderson, introduites respectivement en sections 2.1.5 et 2.3, en termes de temps de calcul par rapport à l'approche avec convergence partielle. On étudie également le comportement de ces méthodes d'accélération utilisées avec convergence partielle du solveur neutronique.

Sommaire

4.1	Optimisation du facteur de relaxation et du niveau de convergence partielle	86
4.1.1	Optimisation du facteur de relaxation	86
4.1.2	Mise en évidence du niveau de convergence partielle optimal et du lien avec la relaxation	89
4.1.3	Apport du calcul couplé par rapport aux simulations mono-physiques	94
4.2	Développement d'une méthode de type <i>Residual Balance</i> sans paramètre libre	95
4.2.1	Implémentation de la méthode de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> dans C3PO	95
4.2.2	Mise en évidence de la capacité de l' <i>Adaptive Residual Balance</i> à contrôler la sur-résolution lors du couplage	96
	4.2.2.1 Contrôle de la sur-résolution entre MINOS et THEDI	96
	4.2.2.2 Sensibilité et faiblesse de la méthode	97
4.2.3	Développement de la méthode <i>Dynamic Residual Balance</i> et étude de ses performances	100
	4.2.3.1 Mise en place de la méthode	100
	4.2.3.2 Étude des performances de la méthode	100
4.3	Limites des méthodes d'accélération par rapport à la convergence partielle	105
4.3.1	Implémentation de l'accélération d'Anderson et de la méthode de la sécante dans C3PO	105
4.3.2	Mise en évidence des limites des méthodes d'accélération sans convergence partielle	105
4.3.3	Impact de la convergence partielle sur les méthodes d'accélération	109
4.4	Bilan du chapitre	116

4.1 Optimisation du facteur de relaxation et du niveau de convergence partielle pour les couplages en boîtes noires

Dans cette section, on s'intéresse aux méthodes de couplage les plus répandues, notamment dans les études de sûreté réalisées par les acteurs industriels comme EDF en France. Il s'agit de déterminer numériquement les valeurs optimales pour le facteur de relaxation et le niveau de convergence partielle, permettant de minimiser le temps de calcul total, pour la simulation stationnaire de chacun des cas d'étude introduits en sections 3.2.2 et 3.2.3.

4.1.1 Optimisation du facteur de relaxation

On étudie dans ce paragraphe l'influence du facteur de relaxation, pour la méthode de Gauss-Seidel relaxée introduite en section 2.1.3, sur le temps de calcul total ainsi que sur le nombre d'itérations mono et multiphysiques, pour le mini-cœur ainsi que pour le problème 1A de KAIST. On donne figure 4.1 l'évolution du temps de calcul total en fonction de ce facteur de relaxation, dans le cas où chacun des solveurs converge aux niveaux de précision souhaités, donnés respectivement dans les tableaux 3.1 et 3.2. On parle alors de convergence fine.

Comme attendu et présenté en section 2.1.3, il existe pour chacun des cas d'étude un facteur de relaxation optimal, permettant de minimiser le temps de calcul et de maximiser la vitesse de convergence. Numériquement, on trouve qu'il s'agit de $\alpha \approx 0.5$ pour le mini-cœur de REP et de

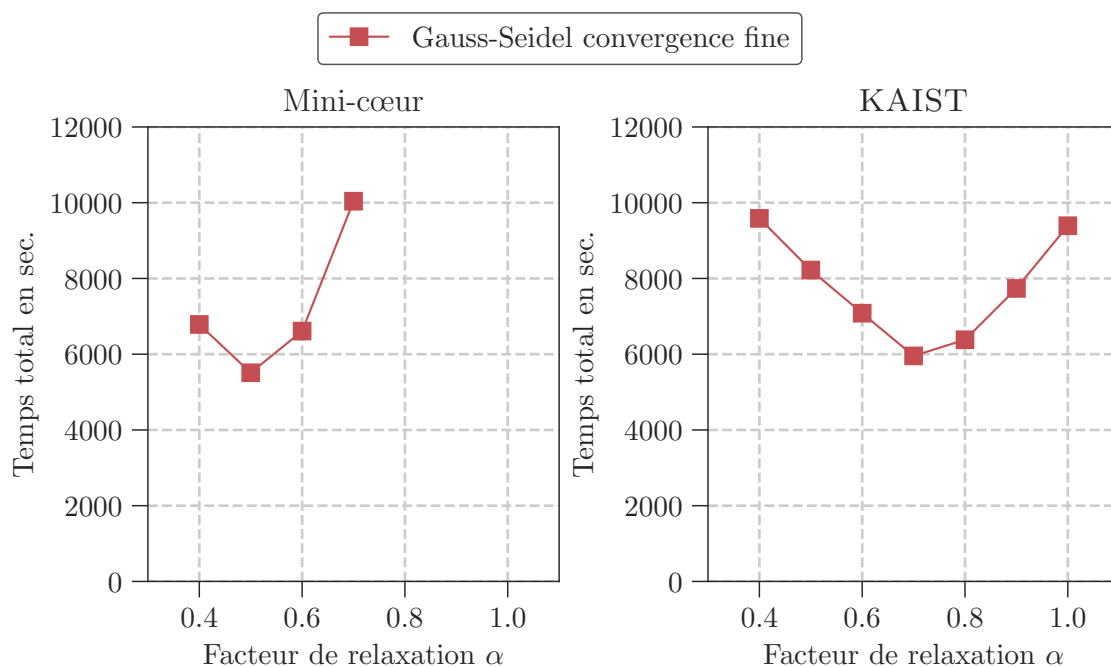


FIGURE 4.1 – Évolution du temps de calcul total en fonction du facteur de relaxation pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST.

$\alpha \approx 0.7$ pour le problème 1A de KAIST. On remarque également que l'introduction d'un facteur de relaxation est nécessaire pour le premier cas d'étude, sans quoi la méthode de Gauss-Seidel ne converge pas : pour des valeurs de α supérieures à 0.7 environ, la puissance neutronique oscille alors entre deux états, sans jamais converger vers la puissance solution. Ce n'est pas vrai pour le second cas d'étude, qui ne pose pas de problème de convergence particulier : le rôle du facteur de relaxation est alors uniquement d'accélérer la convergence de la méthode de Gauss-Seidel, et on gagne ainsi près de 40% de temps de calcul par rapport au cas sans relaxation. Dans la littérature, on trouve généralement que la valeur du facteur de relaxation choisie doit être comprise entre 0.3 et 0.6 [HBC⁺16, LC09], typiquement $\alpha = 0.5$, pour faire converger le calcul : on retrouve ce résultat ici, mais on remarque qu'on n'accélérerait que de 20% le temps de simulation pour le problème 1A de KAIST avec cette valeur par défaut, par rapport à la valeur optimale de α .

On donne par ailleurs figure 4.2 l'évolution de l'erreur relative commise entre deux itérations successives sur la nappe de puissance. Si on note cette dernière $P^{(n)}$, à l'itération multiphysique n , avec un facteur de relaxation α , cette erreur est donnée par :

$$\Delta P^{(n)} := \frac{\|P^{(n)} - P^{(n-1)}\|_2}{\alpha \|P^{(n-1)}\|_2}.$$

On observe qu'effectivement, pour chaque cas d'étude, la valeur du facteur de relaxation permettant de minimiser le temps de calcul correspond également à celle garantissant une convergence en un nombre minimal d'itérations multiphysiques et donc avec une vitesse de convergence maximale.

En termes de temps de calcul, on observe que ce sont les premières itérations multiphysiques qui coûtent le plus : en effet, ce sont elles qui se traduisent par un nombre d'itérations mono-physiques important. C'est attendu : au départ, l'amplitude des variations des contre-réactions

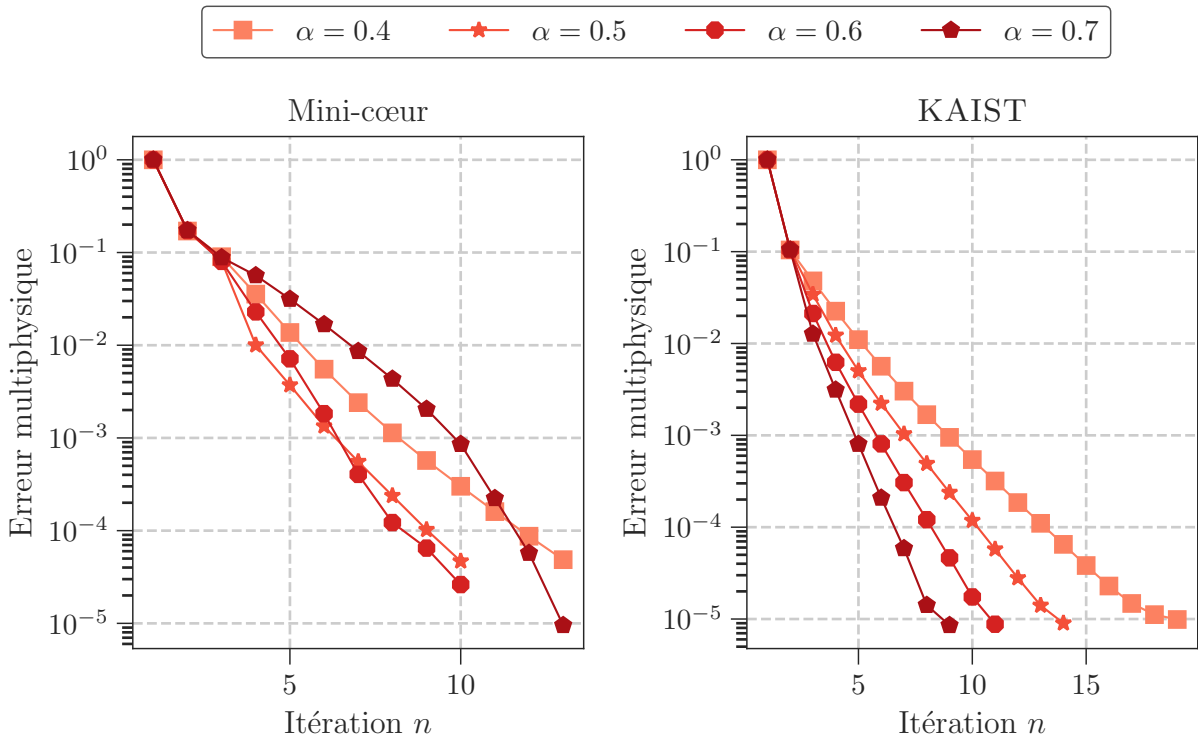


FIGURE 4.2 – Évolution de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique pour différents facteurs de relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST.

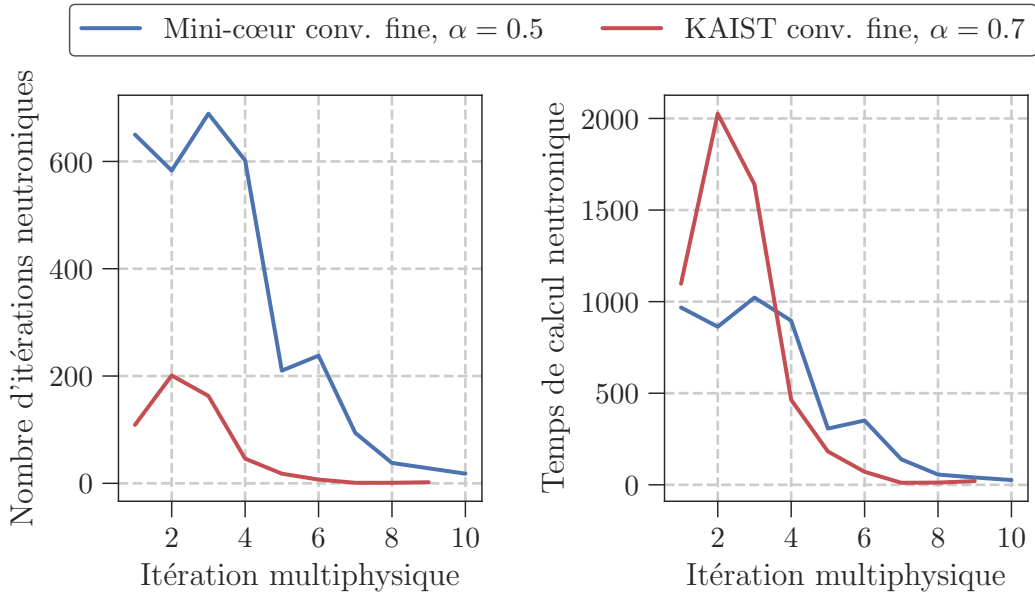


FIGURE 4.3 – Évolution de du nombre d’itérations neutroniques effectuées par itération multiphysique et du temps de calcul neutronique correspondant.

entre neutronique et thermohydraulique, plus spécifiquement l'effet Doppler, est importante, jusqu'à ce que les deux physiques convergent vers leur solution respective. Ainsi, si on prend le cas du mini-cœur avec un facteur de la relaxation de $\alpha = 0.7$, le calcul multiphysique converge en 10 itérations multiphysiques. Les quatre premières correspondent à 2524 itérations neutroniques réalisées, sur un total de 3163, soit près de 80% du temps de calcul neutronique. Ce point est illustré figure 4.3. C'est ce qu'on a appelé dans la section 2.4.1 la sur-résolution. D'où l'intérêt d'introduire de la convergence partielle : on aborde ce point dans le paragraphe suivant.

4.1.2 Mise en évidence du niveau de convergence partielle optimal et du lien avec la relaxation

L'objectif de ce paragraphe est de déterminer le niveau de convergence partielle optimal pour chacun des cas d'étude. Pour cela, on limite dans un premier temps uniquement le nombre d'itérations autorisées pour le solveur neutronique : en effet, CATTANEO ET AL. ont montré dans [CLM⁺21] que la convergence partielle de la partie neutronique du couplage permettait d'obtenir une plage de convergence plus importante en termes de valeurs pour le facteur de relaxation ainsi qu'une meilleure réduction du temps de calcul, obtenant par ailleurs des résultats proches de [CPE⁺15]. Les résultats concernant les deux cas d'étude considérés dans ce travail sont donnés figure 4.4.

On observe qu'il existe pour chacun des cas un niveau de convergence partielle pour le solveur neutronique optimal, permettant de minimiser le temps de calcul global. Ce niveau dépend du cas d'étude : il s'agit de $N = 50$ pour le mini-cœur de REP et de $N = 25$ pour le problème 1A de KAIST. La convergence partielle permet, en limitant la sur-résolution, de limiter le nombre d'itérations monophysiques, limitant de ce fait le temps de calcul. Le temps de calcul est ainsi divisé par 4 entre le cas avec convergence fine et $\alpha = 0.5$ et le cas $N = 50$ et $\alpha = 1$ pour le mini-cœur. Pour KAIST, on a une division par 3 entre le cas avec convergence fine et $\alpha = 0.7$ et le cas $N = 25$ et $\alpha = 0.9$. Dans les deux cas, on observe que, si on choisit un niveau de convergence partielle trop bas, on dégrade le temps de calcul par rapport au cas avec un niveau de convergence partielle optimal.

Par ailleurs, on note que l'introduction de la convergence partielle pour la partie neutronique du couplage permet de stabiliser le calcul : l'ensemble des cas étudiés converge sans avoir besoin d'introduire une relaxation pour $N \leq 50$. De plus, le temps de calcul total semble moins dépendant de l'éventuelle relaxation introduite par rapport aux cas avec convergence fine ou pour lesquels un nombre important d'itérations neutroniques est autorisé ($N \geq 100$). L'importance de déterminer le facteur de relaxation optimal pour un niveau de convergence partielle donné semble alors limitée : il apparaît pertinent de prendre par défaut la valeur $\alpha = 1$ pour un niveau de convergence partielle $N \leq 50$. Dans tous les cas, on a alors un temps de calcul total inférieur au meilleur cas avec convergence fine et facteur de relaxation optimal.

On donne figures 4.5, 4.6 et 4.7 les évolutions des erreurs multiphysiques pour chacun des niveaux de convergence partielle, et pour chaque cas d'étude, en fonction du facteur de relaxation. Remarquons pour commencer que dans certains cas, on converge le problème multiphysique à une précision plus basse que celle demandée initialement : c'est dû au fait qu'on impose, dans le cas de la convergence partielle neutronique, que la convergence interne à MINOS soit atteinte. Tant que ce n'est pas le cas, la simulation multiphysique continue. C'est pour cela par exemple que pour le cas du mini-cœur avec $N = 15$ et $\alpha = 1$, on atteint une erreur multiphysique finale proche de 10^{-6} alors que la précision cible est de 5.5×10^{-5} .

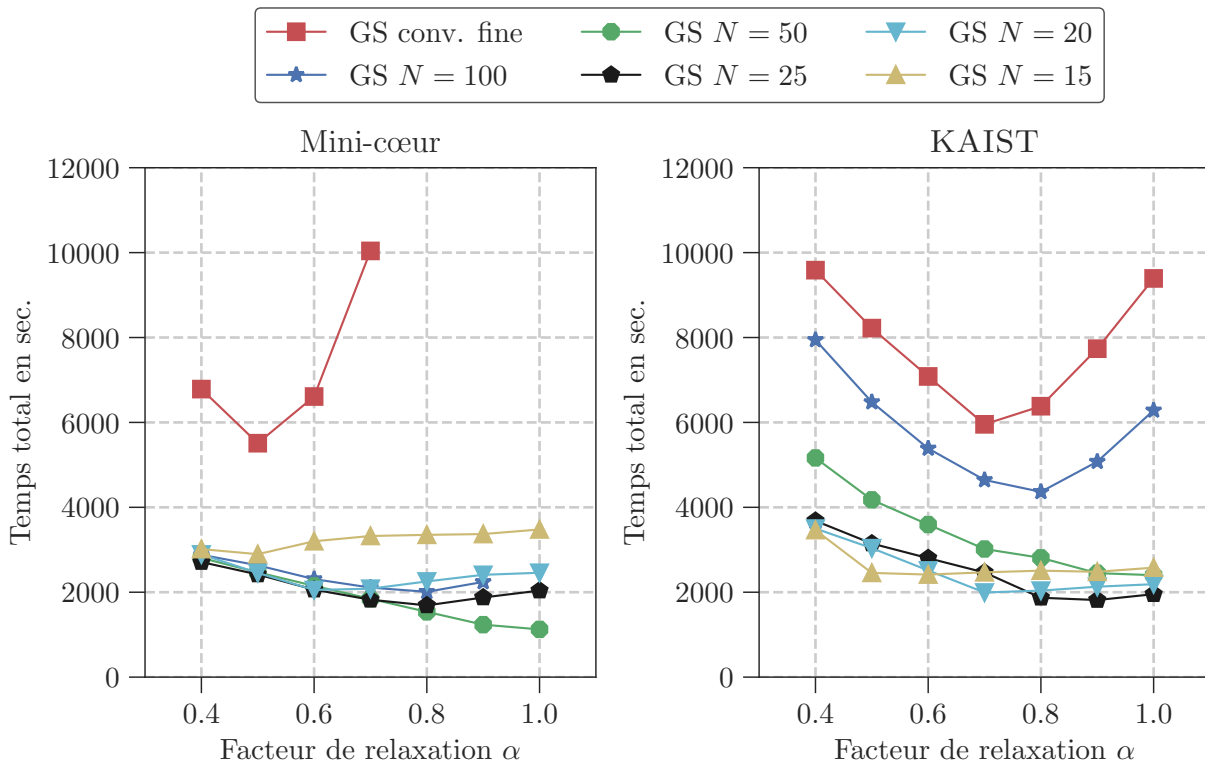


FIGURE 4.4 – Évolution du temps de calcul total en fonction du facteur de relaxation pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST et pour différents niveaux de convergence partielle neutronique - on a noté *GS* pour Gauss-Seidel et on a indiqué par $N = 100$ par exemple le fait que le solveur neutronique n'était autorisé à effectuer qu'au maximum 100 itérations.

On observe également, pour chacun des cas d'étude, que l'influence du facteur de relaxation sur la vitesse de convergence diminue avec le niveau de convergence partielle. Ainsi, s'il y a une véritable différence selon la valeur du facteur de relaxation en termes de nombre d'itérations multiphysiques à effectuer dans le cas avec convergence fixe ou dans le cas avec $N = 100$ par exemple, ce n'est plus vrai pour $N = 20$ ou $N = 15$: cela renforce la conclusion précédente, à savoir que l'introduction d'un facteur de relaxation n'est pas nécessaire dans le cas où on applique un niveau de convergence partielle suffisamment bas, c'est-à-dire pour lequel on impose un nombre maximal faible d'itérations neutroniques autorisées.

Par ailleurs, on note que la convergence partielle neutronique permet de gagner non seulement en temps de calcul mais également en termes de nombre d'itérations multiphysiques par rapport au cas avec convergence fine. Dans ce dernier cas, on converge ainsi le problème du mini-cœur en au mieux 10 itérations multiphysiques (voir figure 4.2) et 9 pour le problème 1A de KAIST, avec des facteurs de relaxation optimisés. Pour $N = 100$, on est en mesure de converger respectivement en 9 et 7 itérations multiphysiques, là encore en ayant besoin d'introduire un facteur de relaxation $\alpha = 0.9$, pour le cas du mini-cœur au moins. Pour $N = 50$, on peut prendre $\alpha = 1$ et on converge alors en respectivement 7 et 6 itérations multiphysiques. Pour $N = 25$, sans relaxation, la convergence est atteinte en respectivement 19 et 8 itérations multiphysiques : ce niveau de convergence partielle entraîne donc de la sous-résolution pour le mini-cœur alors qu'il permet de réduire la sur-résolution pour KAIST. C'est également le cas pour $N = 20$ tandis que pour

Mini-cœur

Gauss-Seidel	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps de calcul total en sec.
$N = \text{conv. fine} ; \alpha = 0.5$	3150	10	5.5×10^3
$N = 100 ; \alpha = 0.8$	782	9	2.0×10^3
$N = 50 ; \alpha = 1$	302	7	1.1×10^3
$N = 25 ; \alpha = 0.8$	328	14	1.7×10^3
$N = 20 ; \alpha = 0.7$	362	19	2.1×10^3
$N = 15 ; \alpha = 0.4$	467	32	3.0×10^3

Problème 1A de KAIST

Gauss-Seidel	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps de calcul total en sec.
$N = \text{conv. fine} ; \alpha = 0.7$	549	9	6.0×10^3
$N = 100 ; \alpha = 0.8$	398	7	4.4×10^3
$N = 50 ; \alpha = 1$	206	6	2.4×10^3
$N = 25 ; \alpha = 0.9$	140	8	1.8×10^3
$N = 20 ; \alpha = 0.7$	147	9	2.0×10^3
$N = 15 ; \alpha = 0.5$	173	17	2.5×10^3

TABLEAU 4.1 – Nombre d'itérations neutroniques, d'itérations multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur et pour KAIST, pour les cas optimaux de chaque niveau de convergence partielle.

$N = 15$, on dégrade la vitesse de convergence pour les deux problèmes. On en déduit que la réduction du temps de calcul par rapport au cas avec convergence fine passe par deux mécanismes. D'une part, un contrôle de la sur-résolution se traduisant par une réduction du nombre total d'itérations neutroniques effectuées, et ce pour tous les niveaux de convergence partielle explorés ici. On peut se référer au tableau 4.1 pour le détail en termes de nombre d'itérations neutroniques totales effectuées pour différents niveaux de convergence partielle et pour chacun des cas d'étude. D'autre part, pour un niveau de convergence partielle optimal, cela s'accompagne également par une réduction du nombre d'itérations multiphysiques : c'est le cas pour $N = 100$ ou $N = 50$ pour le mini-cœur ou pour $N = 100$; $N = 50$ et $N = 25$ pour KAIST.

Finalement, on met ici en évidence le *lien* entre convergence partielle neutronique et introduction d'un facteur de relaxation sur la nappe de puissance : on peut trouver pour chaque cas d'étude différents couples (N, α) aboutissant aux mêmes nombre d'itérations multiphysiques à effectuer. Ainsi, pour le cas du mini-cœur, on peut donner l'exemple de $(N = \text{convergence fine} ; \alpha = 0.5)$ correspondant à $(N = 100 ; \alpha = 0.7)$ ou encore à $(N = 50, \alpha = 0.8)$.

Pour conclure ce paragraphe, remarquons qu'on peut mener la même étude concernant la convergence partielle du solveur thermohydraulique THEDI. Il s'agit alors de limiter le nombre de pas de temps autorisés lors du calcul du transitoire stabilisé. Là encore, en contrôlant le niveau de convergence interne, on réduit à la fois le nombre total de pas de temps thermohydrauliques effectués, mais aussi le nombre d'itérations multiphysiques nécessaire à la convergence du couplage. Il existe, tout comme pour la convergence partielle neutronique, un niveau optimal de convergence partielle thermohydraulique. Le lecteur intéressé peut se référer à l'annexe C pour les résultats de cette optimisation pour le mini-cœur. Dans la suite, on se restreint à la convergence partielle

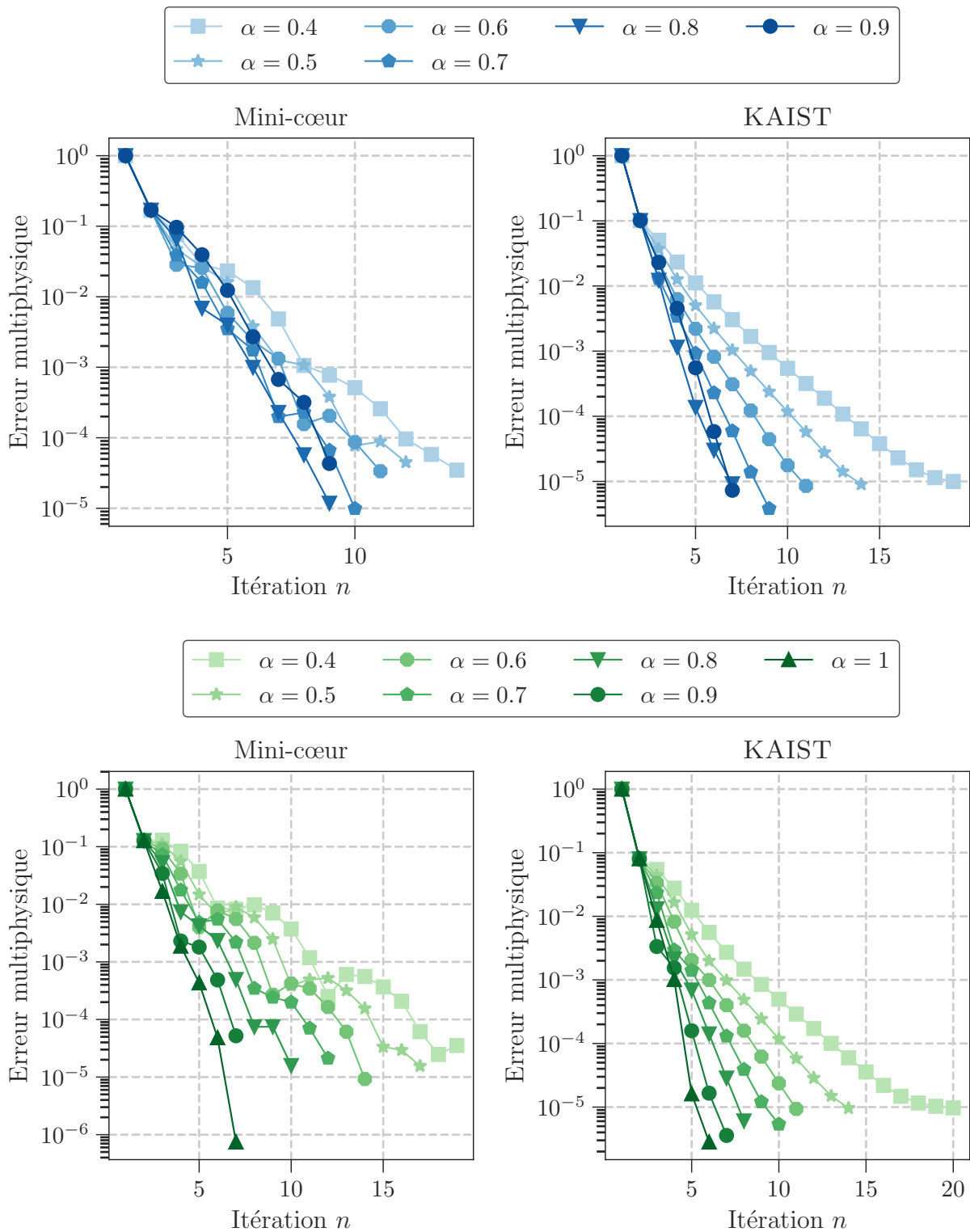


FIGURE 4.5 – Évolution de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST et pour différents niveaux de convergence partielle neutronique (en nuances de bleu $N = 100$ et en nuances de vert $N = 50$).

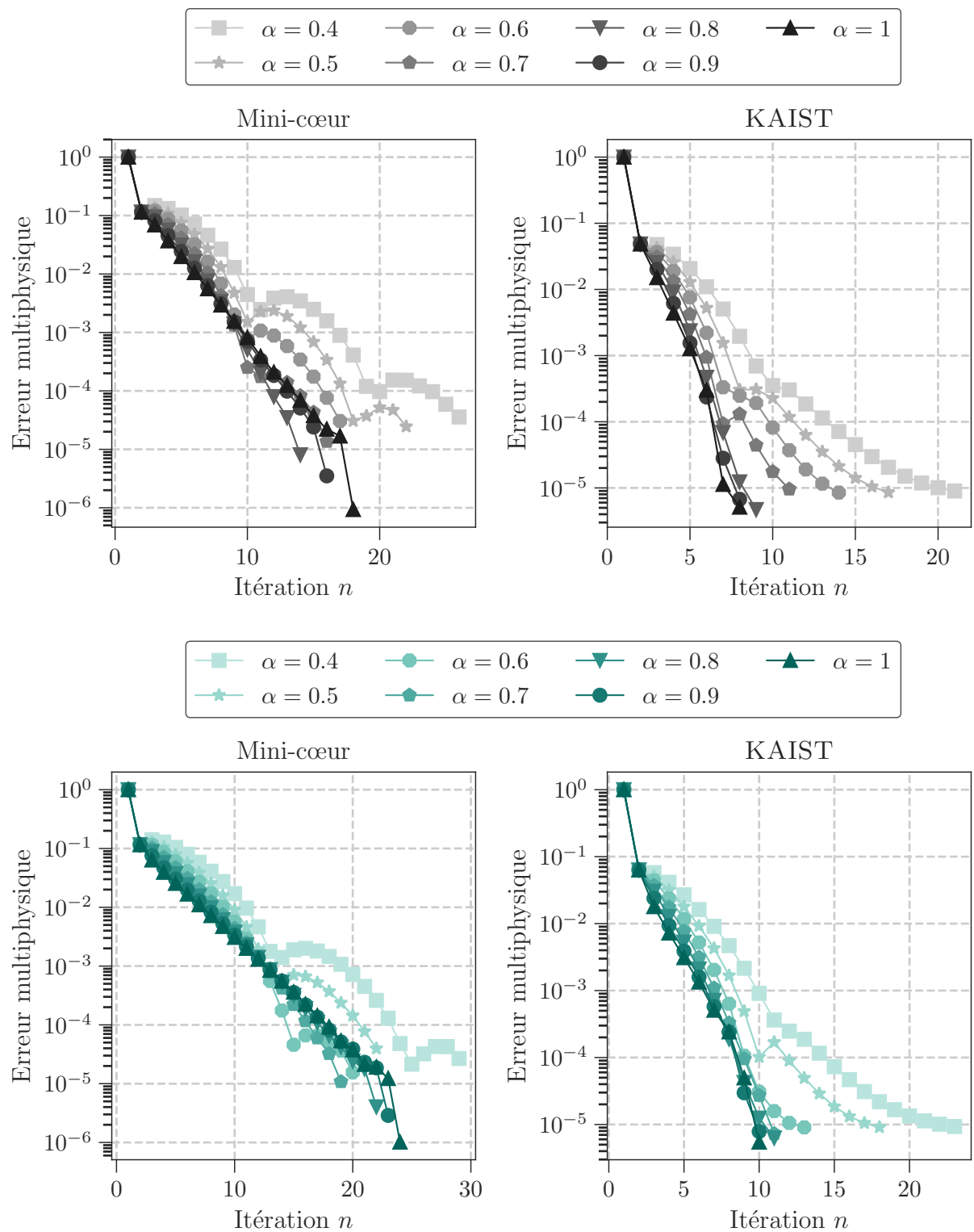


FIGURE 4.6 – Évolution de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST et pour différents niveaux de convergence partielle neutronique (en nuances de gris $N = 25$ et en nuances de cyan $N = 20$).

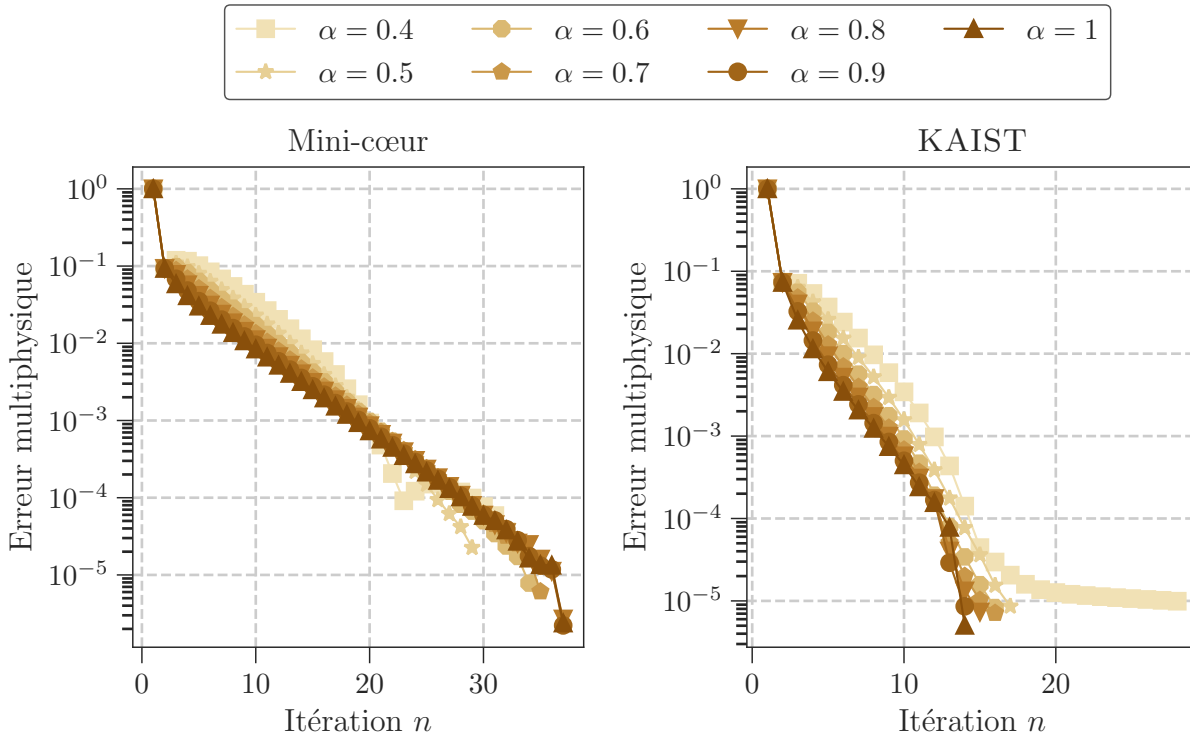


FIGURE 4.7 – Évolution de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST pour un niveau de convergence partielle neutronique ($N = 15$).

neutronique et on se permet donc de parler simplement de “convergence partielle” sans préciser à quelle discipline cela s’applique.

4.1.3 Apport du calcul couplé par rapport aux simulations mono-physiques

Une dernière remarque peut être faite concernant l’utilisation de la convergence partielle. Comme on l’a précisé au paragraphe 1.1.3.3, la résolution du problème à valeur propre neutronique est accélérée dans MINOS par l’accélération de Chebyshev. Celle-ci converge malgré tout assez lentement : ainsi, on a déjà évoqué le cas du mini-cœur avec un facteur de la relaxation de $\alpha = 0.7$ à ce propos, pour lequel les 4 premières itérations multiphysiques, sur 10, correspondent à 2524 itérations neutroniques réalisées, sur un total de 3163. Pour chacune, on met, en ordre de grandeur, environ 600 itérations neutroniques à converger le problème neutronique. Les dernières itérations multiphysiques en revanche ne correspondent en moyenne qu’à une centaine d’itérations neutroniques chacune. Dans ce paragraphe, on fait un pas de côté par rapport au cadre défini au chapitre 3. On considère ainsi simplement le problème du mini-cœur, qu’on initialise en termes de température combustible et de densité modérateur avec les valeurs solutions du problème multiphysique : on considère donc uniquement un problème neutronique, et il n’est plus question de couplage. Sa résolution avec MINOS nécessite alors 820 itérations neutroniques, soit plus que pour chaque niveau de convergence partielle testé et donné tableau 4.1. D’un point de vue neutronique, il semble donc que le couplage avec convergence partielle agisse comme une méthode d’accélération de la convergence. En termes de temps de calcul, la résolution du problème neutronique pur prend

en ordre de grandeur 1200 secondes, soit plus que pour le cas multiphysique avec convergence partielle neutronique optimisée, c'est-à-dire ($N = 50 ; \alpha = 1$).

Bilan de la section : Dans cette section, on a donc mis en évidence l'intérêt d'introduire un facteur de relaxation sur la nappe de puissance pour stabiliser le calcul multiphysique ainsi que pour réduire le temps de calcul total de la simulation. L'apport de la convergence partielle pour le solveur neutronique a également été démontré : on est ainsi en mesure de diviser par 3 le temps de calcul par rapport aux cas avec convergence fine et optimisation de la valeur du facteur de relaxation. La convergence partielle du solveur neutronique permet ainsi de limiter la sur-résolution et d'accélérer la convergence du problème multiphysique. Les deux méthodes impliquent cependant de rechercher numériquement une valeur satisfaisante pour leurs paramètres respectifs, à savoir le facteur de relaxation ou le niveau de convergence partielle. On cherche donc dans la suite à se libérer de cette étape d'optimisation pour avoir à disposition des méthodes génériques de couplage qui permettent également de contrôler la sur-résolution entre les solveurs. Cela passe par l'implémentation de l'*Adaptive Residual Balance* dans C3PO ainsi que par le développement d'une nouvelle méthode, qu'on appelle *Dynamic Residual Balance*.

4.2 Développement d'une méthode de type *Residual Balance* sans paramètre libre

Dans cette section, on s'intéresse à la méthode de l'*Adaptive Residual Balance*, qui permet de faire évoluer les précisions demandées à chacun des solveurs au cours du calcul multiphysique, limitant de ce fait la sur-résolution entre les disciplines. On développe également une méthode qui s'inspire de l'*Adaptive Residual Balance*, nommée *Dynamic Residual Balance*, dont l'objectif est de contrôler de manière plus efficace la décroissance des précisions au cours du calcul et d'avoir à disposition une méthode sans paramètre libre.

4.2.1 Implémentation de la méthode de l'*Adaptive Residual Balance* dans C3PO

La méthode a été introduite dans le paragraphe 2.4.3.2 et décrite par l'algorithme 1. Dans notre cas, le solveur TH correspond donc à THEDI et le solveur N à MINOS. Il est donc nécessaire d'avoir accès aux erreurs initiales commises respectivement par chacun des solveurs : il s'agit de calculer, pour la thermohydraulique, l'erreur commise après un pas de temps suite à la mise à jour de la nappe de puissance et, pour la neutronique, l'erreur commise après une itération de la méthode de la puissance itérée, suite à la mise à jour de la température effective du combustible et de la densité du modérateur. Pour l'aspect thermohydraulique, cela ne représente pas de difficulté particulière du fait de la résolution du stationnaire comme un transitoire stabilisé, comme expliqué en section section 3.1.2.1. Pour l'aspect neutronique, pour rester dans le cadre des couplages en boîtes noires, on est obligé de décomposer un calcul neutronique en deux appels distincts : le premier, en n'autorisant qu'une unique itération, permettant de calculer et de stocker l'erreur initiale sur le flux neutronique, puis un second pour résoudre à proprement parlé le problème à valeur propre. Enfin, on note que par rapport à l'algorithme 1, on contrôle que chacun des solveurs ait atteint le niveau de précision défini dans les tableaux 3.1 et 3.2 pour déclarer atteinte la convergence multiphysique. Une fois qu'un des solveurs, MINOS ou THEDI, a atteint le niveau

souhaité de précision, on impose également au second son niveau de précision cible. Par exemple, pour KAIST, si au cours de la méthode, on cherche à imposer à THEDI disons une précision de 10^{-7} alors que la précision cible est 10^{-6} , on met à jour la précision demandée à THEDI à 10^{-6} ainsi que celle demandée à MINOS à 10^{-4} pour le flux et 10^{-5} pour le k_{eff} . L'implémentation de la méthode peut être trouvée dans [c3p].

4.2.2 Mise en évidence de la capacité de l'*Adaptive Residual Balance* à contrôler la sur-résolution lors du couplage

On détaille dans cette section les résultats obtenus avec la méthode de l'*Adaptive Residual Balance* pour le mini-cœur et pour le problème 1A de KAIST, ainsi que les limites de la méthode.

4.2.2.1 Contrôle de la sur-résolution entre Minos et Thedi

On donne figure 4.8 les temps de calcul nécessaires pour faire converger la simulation multiphysique avec l'*Adaptive Residual Balance*, en fonction du facteur de relaxation, qu'on compare avec les résultats présentés à la section précédente. Remarquons en effet qu'on peut également introduire un facteur de relaxation sur la nappe de puissance avec l'*Adaptive Residual Balance* : on s'attend malgré tout à ce que l'introduction d'une telle relaxation dégrade les performances de la méthode, puisque cela rajouterait de la sous-résolution alors que les précisions calculées sont *a priori* cohérentes entre elles. Pour chacun de ces cas, on a pris $a = 0.1$ comme paramètre initial pour le calcul des premiers niveaux de précisions, valeur par défaut proposée par SENEAL (voir l'algorithme 1 pour la définition et le rôle de a).

La performance de la méthode semble dépendre du cas d'étude : elle réduit de manière efficace le temps de calcul total pour le mini-cœur, par rapport aux couplages réalisés avec Gauss-Seidel relaxé et convergence fine, avec un gain de l'ordre d'un tiers, correspondant au temps obtenu avec un niveau de convergence partielle de $N = 15$. Pour KAIST, l'*Adaptive Residual Balance* permet de gagner légèrement en temps de calcul, mais le gain semble négligeable. Si on observe l'évolution des précisions calculées par la méthode, donnée figure 4.9, on comprend ce résultat. En effet, on observe que pour le problème 1A de KAIST, la décroissance de la précision est très rapide. C'est dû à l'initialisation du problème : ainsi, avant le lancement de la méthode, on doit effectuer un unique pas de temps et une unique itération neutronique et échanger les différentes grandeurs neutroniques et thermohydraulique pour que les solveurs soient initialisés et perturbés. Le niveau de puissance pour ce cas étant plus faible que pour le cas du mini-cœur, cela aboutit à des erreurs faibles dès le départ de la simulation multiphysique et à une décroissance accélérée des précisions : cette décroissance conduit à réaliser rapidement des calculs avec des niveaux de précision proches de la convergence fine, dont on a vu qu'ils étaient synonymes de temps de calcul élevé. Au final, la méthode avec $a = 0.1$ ne permet pas pour ce problème de contrôler convenablement la sur-résolution.

On peut malgré tout faire varier le paramètre libre a de la méthode, qui permet de calculer la première précision thermohydraulique à la première itération multiphysique, comme indiqué dans l'algorithme 1. Puisque la précision décroît trop rapidement, il faut considérer un coefficient plus grand. On donne figure 4.10 le résultat avec $a = 0.1$ pour le mini-cœur et $a = 1$ pour KAIST. On obtient alors une réduction du temps de calcul plus satisfaisante pour KAIST, d'un tiers également. L'optimisation de la méthode semble donc possible, ne serait-ce qu'en jouant sur ce paramètre a . Ainsi, ce dernier est en effet utilisé pour calculer les premières précisions demandées

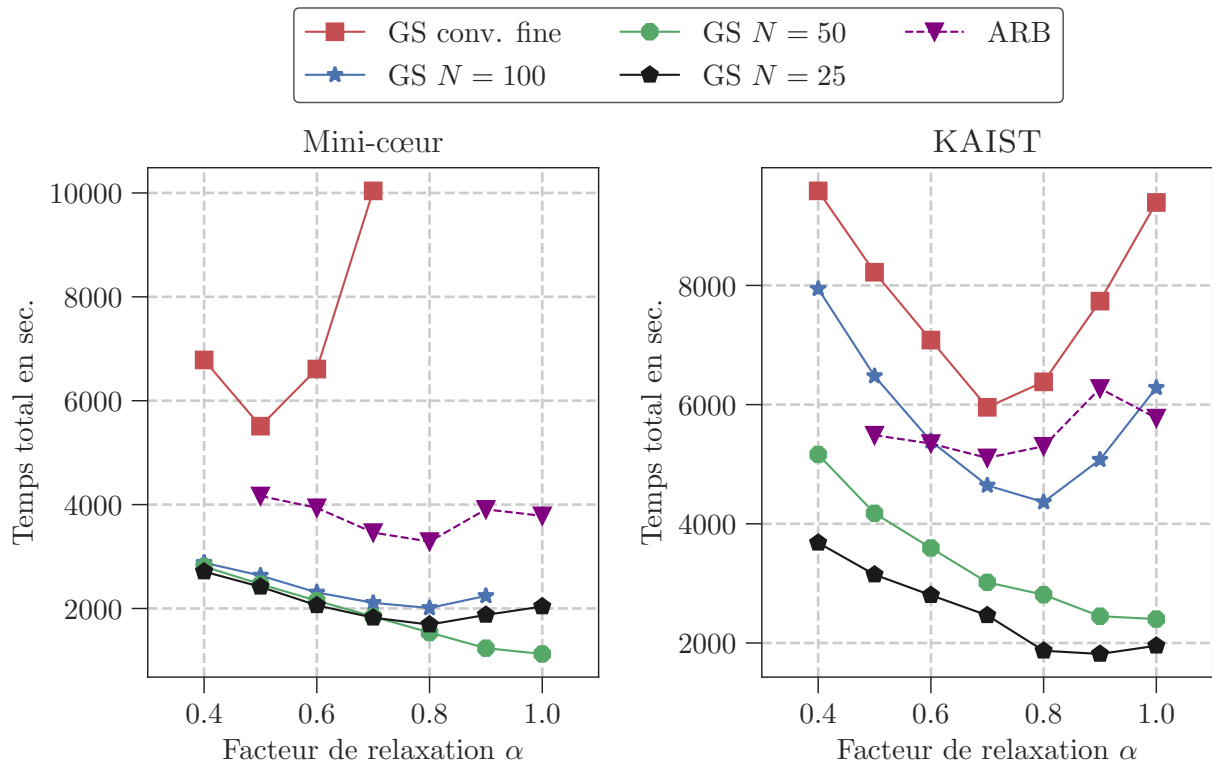


FIGURE 4.8 – Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel, avec et sans convergence partielle, et l’*Adaptive Residual Balance* avec $a = 0.1$, en fonction du facteur de relaxation multiphysique - on a noté *GS* pour *Gauss-Seidel* et *ARB* pour l’*Adaptive Residual Balance*.

aux solveurs. En les modifiant, on peut influencer sur les premiers taux de convergence. De ce fait, les niveaux de précision calculés ensuite, au cours du couplage, seront différents, et donc les premiers résidus totaux également. Cette simple modification du paramètre a impacte donc bien l’évolution future des niveaux de convergence demandés à chacun des solveurs. En jouant sur le paramètre a on est donc en mesure de ralentir ou d’accélérer la décroissance des précisions calculées pour chacun des solveurs par la méthode de l’*Adaptive Residual Balance*. À titre d’indication, on donne figure 4.11 l’évolution des précisions pour les deux solveurs avec $a = 1$ pour le problème 1A de KAIST.

4.2.2.2 Sensibilité et faiblesse de la méthode

La sensibilité de la méthode aux erreurs initiales est illustrée par le changement de comportement de la méthode pour le problème 1A de KAIST en modifiant simplement la valeur de a : on n’a pas proposé ici d’étude systématique de l’influence de ce paramètre, mais on a pu montrer la sensibilité de la méthode à sa valeur. De la même manière, cela signifie que selon l’initialisation des solveurs et les amplitudes des premières contre-réactions, la méthode sera plus ou moins performante. Ce comportement n’est pas pleinement satisfaisant dans l’optique d’une méthode de couplage générale entre un solveur de neutronique et un autre de thermohydraulique/thermique.

Par ailleurs, on observe figures 4.9 et 4.11 que les précisions calculées pour chacun des solveurs ne décroissent pas de manière monotone selon la force des contre-réactions entre les physiques. Ce

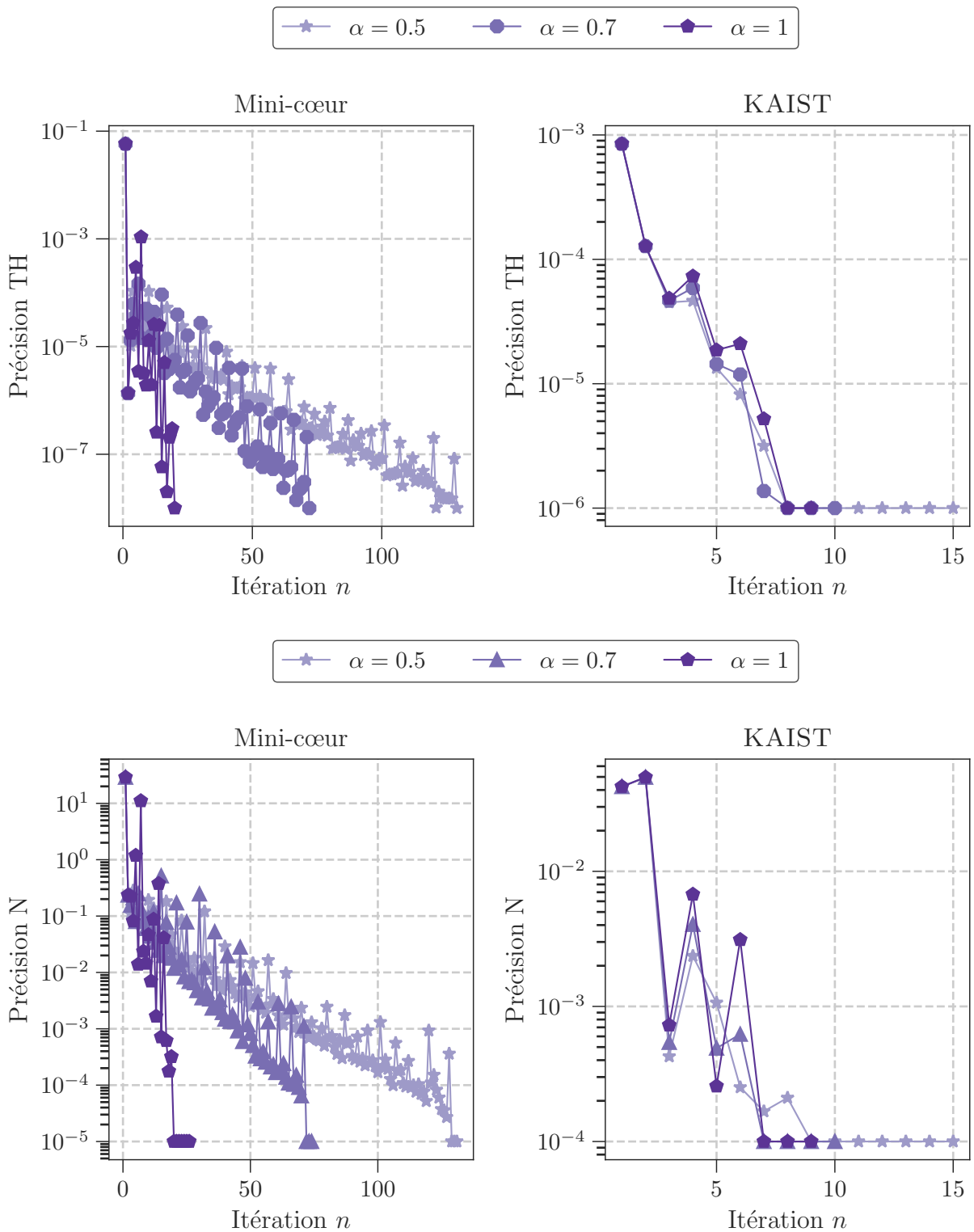


FIGURE 4.9 – Évolution des précisions calculées par la méthode de l'*Adaptive Residual Balance* pour les solveurs thermohydraulique et neutronique au cours du calcul multiphysique, pour $a = 0.1$, $\alpha = 1$, $\alpha = 0.7$ et $\alpha = 0.5$

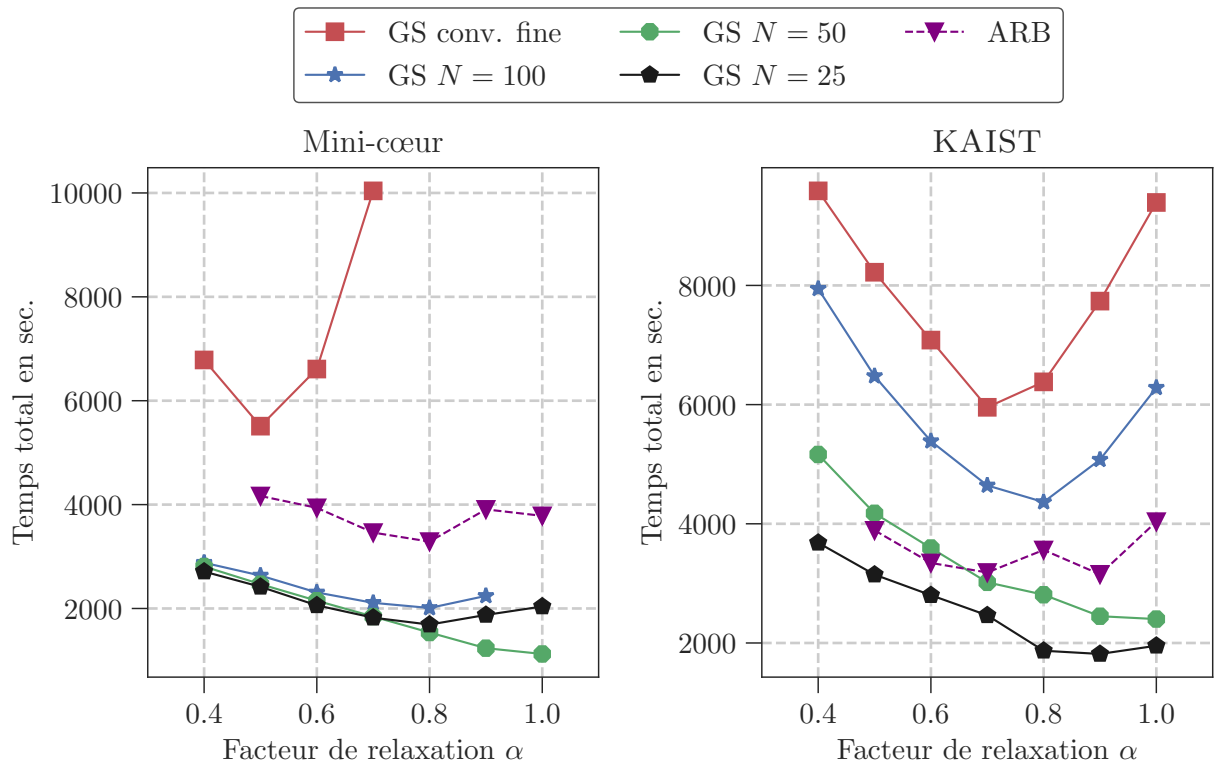


FIGURE 4.10 – Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel (GS) et l'Adaptive Residual Balance (ARB) en fonction du facteur de relaxation, avec $a = 0.1$ pour le mini-cœur et $a = 1$ pour KAIST.

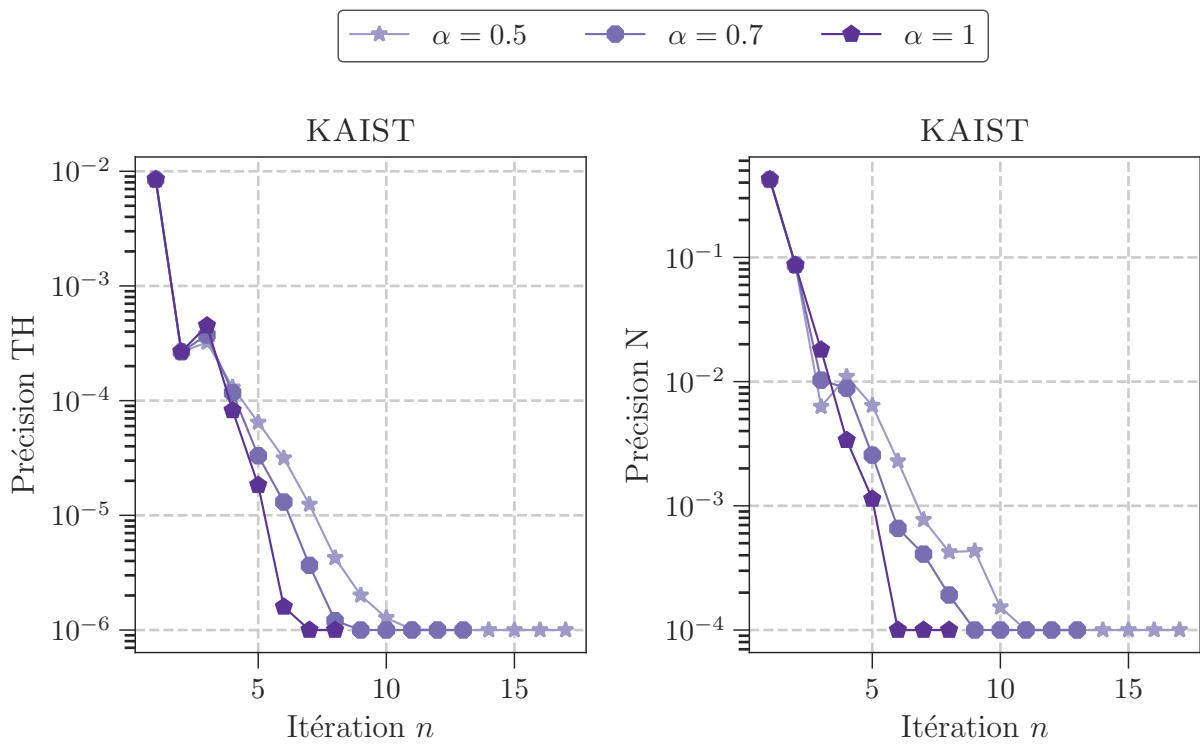


FIGURE 4.11 – Évolution des précisions calculées par la méthode de l'Adaptive Residual Balance pour les solveurs thermohydraulique et neutronique pour KAIST, avec $a = 1$.

comportement se traduit par un nombre important d'itérations multiphysiques et donc d'échange de données entre les codes.

C'est pour ces deux raisons principales que l'on souhaite mettre en place une méthode sans paramètre libre, inspirée de l'*Adaptive Residual Balance* et garantissant une décroissance des précisions calculées. On la présente dans le paragraphe suivant.

4.2.3 Développement de la méthode *Dynamic Residual Balance* et étude de ses performances

4.2.3.1 Mise en place de la méthode

Pour garantir la décroissance monotone des précisions, le plus simple est de choisir comme nouvelle précision le minimum entre la nouvelle précision calculée par la méthode et l'ancienne précision qui était fixée pour l'itération multiphysique précédente. On garantit ainsi que la précision se maintienne *a minima* au niveau précédent.

De plus, on sait par [CLM⁺21] que le contrôle du solveur neutronique semble être plus performant en termes de réduction du temps de calcul que celui du solveur thermohydraulique. On peut alors simplement demander au solveur de thermohydraulique d'atteindre la précision atteinte par le solveur de neutronique. On introduit une asymétrie ici dans le traitement des solveurs.

Reste à déterminer une manière de faire évoluer la précision demandée à MINOS au cours de la simulation multiphysique. Pour cela, le taux de convergence introduit dans l'*Adaptive Residual Balance* est un bon candidat. Pour prendre malgré tout en compte l'évolution des contre-réactions neutronique/thermohydraulique, on peut considérer un taux de convergence moyen, correspondant à la moyenne des taux ρ_i et $\rho_{i+1/2}$ tels que définis dans l'algorithme 1. Par ailleurs, on a vu au paragraphe précédent que pour l'*Adaptive Residual Balance*, il était nécessaire d'initialiser les contre-réactions entre les solveurs en leur faisant réaliser chacun une première itération ou un premier pas de temps. Autrement, la valeur initiale de $R_{0,0}^{TH}$ dans l'algorithme 1 sera trop faible. On peut donc utiliser ces valeurs initiales pour le calcul des précisions initialement demandées aux solveurs : cela permet de se libérer du paramètre a . Finalement, on obtient l'algorithme de la méthode dite du *Dynamic Residual Balance*, donné par l'algorithme 2. Là encore, si une des précisions calculées devient inférieure à la valeur finale souhaitée, on impose alors à chaque solveur sa précision cible respective, donnée pour chaque cas d'étude dans les tableaux 3.1 et 3.2. De même, atteindre ces niveaux de précisions cibles pour chacun des solveurs est toujours un critère de convergence nécessaire pour la convergence multiphysique.

4.2.3.2 Étude des performances de la méthode

On applique cette méthode aux deux cas d'étude. Les résultats sont comparés à l'*Adaptive Residual Balance* ainsi qu'aux cas avec convergence partielle présentés en section 4.1.2. Les résultats en termes de temps de calcul sont donnés figure 4.12. Comme pour l'*Adaptive Residual Balance*, on a testé la méthode pour différentes valeurs du facteur de relaxation, sachant qu'introduire un telle relaxation n'est *a priori* pas nécessaire. Les résultats sont cohérents avec l'esprit de la méthode : ainsi, l'introduction d'une relaxation introduit au pire de la sous-résolution, comme on le voit pour le problème 1A de KAIST pour lequel les performances en termes de temps de calcul de la méthode *Dynamic Residual Balance* sont dégradées par rapport au cas sans relaxation, ou au mieux ne modifie pas son comportement, comme on l'observe pour le cas du mini-cœur. Sans relaxation

Données : critères de convergence multiphysique et précisions cibles pour chaque solveur.

Initialisation : réaliser une première itération pour chacun des solveurs et échanger les champs physiques entre ces derniers. On a donc accès à une erreur initiale thermohydraulique R_{-1}^{TH} et une erreur initiale neutronique R_{-1}^{N} .

tant que Critères de convergence multi-physiques non-atteints **faire**

Solveur TH :

$$j_{TH} = 0$$

si $i = 0$ **alors**

$$\|R_0^{\text{tot}}\| = \frac{\|R_{0,0}^{\text{TH}}\|}{\varepsilon^{\text{TH}}}$$

$$\text{prec}_0^{\text{TH}} = \frac{R_{-1}^{\text{N}}}{\varepsilon^{\text{N}}} \varepsilon^{\text{TH}}$$

tant que $\|R_{0,j_{TH}}^{\text{TH}}\| > \text{prec}_0^{\text{TH}}$ **faire**

 On effectue un pas de temps du solveur TH.

$$j_{TH} + = 1$$

sinon

$$\|R_i^{\text{tot}}\| = \frac{\|R_{i,0}^{\text{TH}}\|}{\varepsilon^{\text{TH}}} + \frac{\|R_{i-1,j_N}^{\text{N}}\|}{\varepsilon^{\text{N}}}$$

$$\rho_i = \frac{\|R_i^{\text{tot}}\|}{\|R_{i-1}^{\text{tot}}\|}$$

$$\text{prec}_i^{\text{TH}} = \min\left(\frac{R_{i-1,j_N}^{\text{N}}}{\varepsilon^{\text{N}}} \varepsilon^{\text{TH}}, \text{prec}_{i-1}^{\text{TH}}\right)$$

tant que $\|R_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}\| > \text{prec}_i^{\text{TH}}$ **faire**

 On effectue un pas de temps du solveur TH.

$$j_{TH} + = 1$$

On échange les données entre le solveur TH et le solveur N, notamment $\|R_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}\|$

Solveur N :

$$j_N = 0$$

$$\|R_{i+1/2}^{\text{tot}}\| = \frac{\|R_{i,0}^{\text{N}}\|}{\varepsilon^{\text{N}}} + \frac{\|R_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}\|}{\varepsilon^{\text{TH}}}$$

si $i = 0$ **alors**

$$\text{prec}_0^{\text{N}} = \frac{R_{0,j_{TH}}^{\text{TH}}}{\varepsilon^{\text{TH}}} \varepsilon^{\text{N}}$$

tant que $\|R_{0,j_N}^{\text{N}}\| > \text{prec}_0^{\text{N}}$ **faire**

 On effectue une itération du solveur N.

$$j_N + = 1$$

sinon

$$\rho_{i+1/2} = \frac{\|R_{i+1/2}^{\text{tot}}\|}{\|R_{i-1/2}^{\text{tot}}\|}$$

$$\rho = \frac{\rho_i + \rho_{i+1/2}}{2}$$

$$\text{prec}_i^{\text{N}} = \min\left(\rho \frac{R_{i,j_{TH}}^{\text{TH}}}{\varepsilon^{\text{TH}}} \varepsilon^{\text{N}}, \text{prec}_{i-1}^{\text{N}}\right)$$

tant que $\|R_{i,j_N}^{\text{N}}\| > \text{prec}_i^{\text{N}}$ **faire**

 On effectue une itération du solveur N.

$$j_N + = 1$$

$$i + = 1$$

On échange les données entre le solveur N et le solveur TH, notamment $\|R_{i,j_N}^{\text{N}}\|$

Algorithme 2 : Description de la méthode *Dynamic Residual Balance*

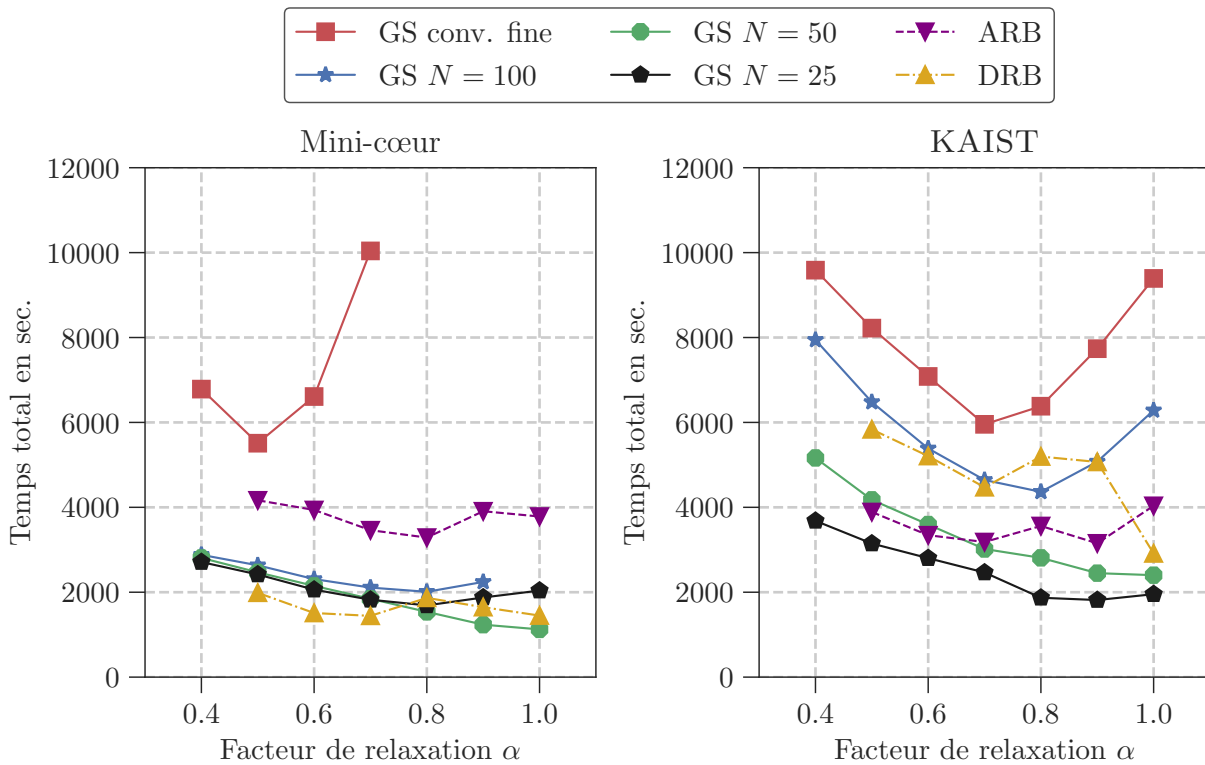


FIGURE 4.12 – Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel, l’*Adaptive Residual Balance* et le *Dynamic Residual Balance* en fonction du facteur de relaxation multiphysique - on a noté GS pour Gauss-Seidel, ARB pour l’*Adaptive Residual Balance* et DRB pour le *Dynamic Residual Balance*.

($\alpha = 1$), pour chacun des cas étudiés, on obtient un temps de calcul total comparable aux cas avec convergence partielle neutronique optimisée, sans avoir à déterminer la valeur optimale d’un quelconque paramètre, ce qui était l’objectif recherché.

On donne figure 4.13 l’évolution des précisions imposées à chacun des solveurs au cours du couplage multiphysique ainsi que de l’erreur multiphysique sur la nappe de puissance, pour le cas $\alpha = 1$ puisqu’on a vu que la méthode *Dynamic Residual Balance* devait être utilisée sans relaxation multiphysique. Il s’agit de comparer l’évolution des précisions avec les figures 4.9 et 4.11, correspondant à l’*Adaptive Residual Balance*. Comme recherché, on observe une décroissance monotone et quasi linéaire des précisions demandées aux solveurs neutronique et thermohydraulique. Ce contrôle permet d’avoir une convergence plus rapide en termes de nombre d’itérations multiphysiques par rapport à l’*Adaptive Residual Balance*. On observe deux comportements différents :

- pour le mini-cœur, les contre-réactions sont fortes du fait du niveau de puissance élevé et de la géométrie élançée du cœur. La décroissance des précisions permet de limiter la sur-résolution et d’économiser en nombre d’itérations mono-physiques effectuées. L’amplitude des contre-réactions entraîne, elle, la décroissance bruitée de l’erreur multiphysique et explique la décroissance en parallèle des précisions demandées respectivement à chacun des solveurs ;
- pour le problème 1A de KAIST, on observe que pour les premières itérations multiphysiques, la précision demandée à la thermohydraulique n’évolue presque pas. Concrètement, dans un premier temps, la partie neutronique voit sa précision décroître seule, jusqu’à ce que les

Mini-cœur		
	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydrauliques
ARB $\alpha = 1 ; a = 0.1$	1682	11262
DRB $\alpha = 1$	533	3586

KAIST		
	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydrauliques
ARB $\alpha = 1 ; a = 1$	253	339
DRB $\alpha = 1$	160	113

TABLEAU 4.2 – Nombre d'itérations neutroniques et de pas de temps thermohydrauliques pour le mini-cœur et pour le problème 1A de KAIST pour les méthodes de l'*Adaptive Residual Balance* et du *Dynamic Residual Balance*.

modifications de la nappe de puissance et le niveau de précision neutronique atteint soient suffisants pour nécessiter une précision plus poussée du point de vue de la thermohydraulique. On contrôle ainsi la sur-résolution de la thermohydraulique dans un premier temps, avant de voir les précisions de chacun des solveurs décroître.

Finalement, la méthode proposée et décrite dans l'algorithme 2 permet de se libérer des contraintes de l'*Adaptive Residual Balance* : on n'a plus aucun paramètre libre à optimiser et on obtient un contrôle satisfaisant des précisions demandées à chacun des solveurs au cours du calcul multiphysique, permettant de contrôler la sur-résolution entre les disciplines. Le nombre total d'itérations neutroniques et thermohydrauliques est donné tableau 4.2 pour les méthodes de l'*Adaptive Residual Balance* et celle du *Dynamic Residual Balance*.

Bilan de la section : Dans cette section, on a donc décrit l'implémentation de la méthode de l'*Adaptive Residual Balance* dans C3PO pour les couplages entre MINOS et THEDI. Cette implémentation permet *a priori* un couplage général entre un solveur de neutronique itératif et un solveur thermohydraulique résolvant un état stationnaire *via* le calcul d'un transitoire stabilisé. Les performances de la méthode en termes de réduction du temps de calcul total dépendent fortement des erreurs initiales de chacun des solveurs ainsi que de la valeur initiale donnée au taux de convergence utilisé dans la méthode. Correctement choisi, on arrive à réduire d'un tiers le temps de calcul par rapport aux cas couplés avec la méthode de Gauss-Seidel et avec convergence fine. Cela s'explique par une réduction du nombre d'itérations monophysiques effectuées. À partir de cette méthode, on a développé celle du *Dynamic Residual Balance*, également disponible dans C3PO, permettant un contrôle des précisions demandées à chacun des solveurs sans aucun paramètre libre et avec une décroissance monotone assurée. Les performances de cette méthode ont également été démontrées : on est ainsi en mesure de contrôler plus finement l'évolution des précisions, ce qui permet de limiter la sur-résolution d'une part et d'accélérer la convergence multiphysique par rapport à l'*Adaptive Residual Balance*. Ces deux méthodes permettent donc de réduire le temps de calcul du problème multiphysique en contrôlant le nombre d'itérations monophysiques

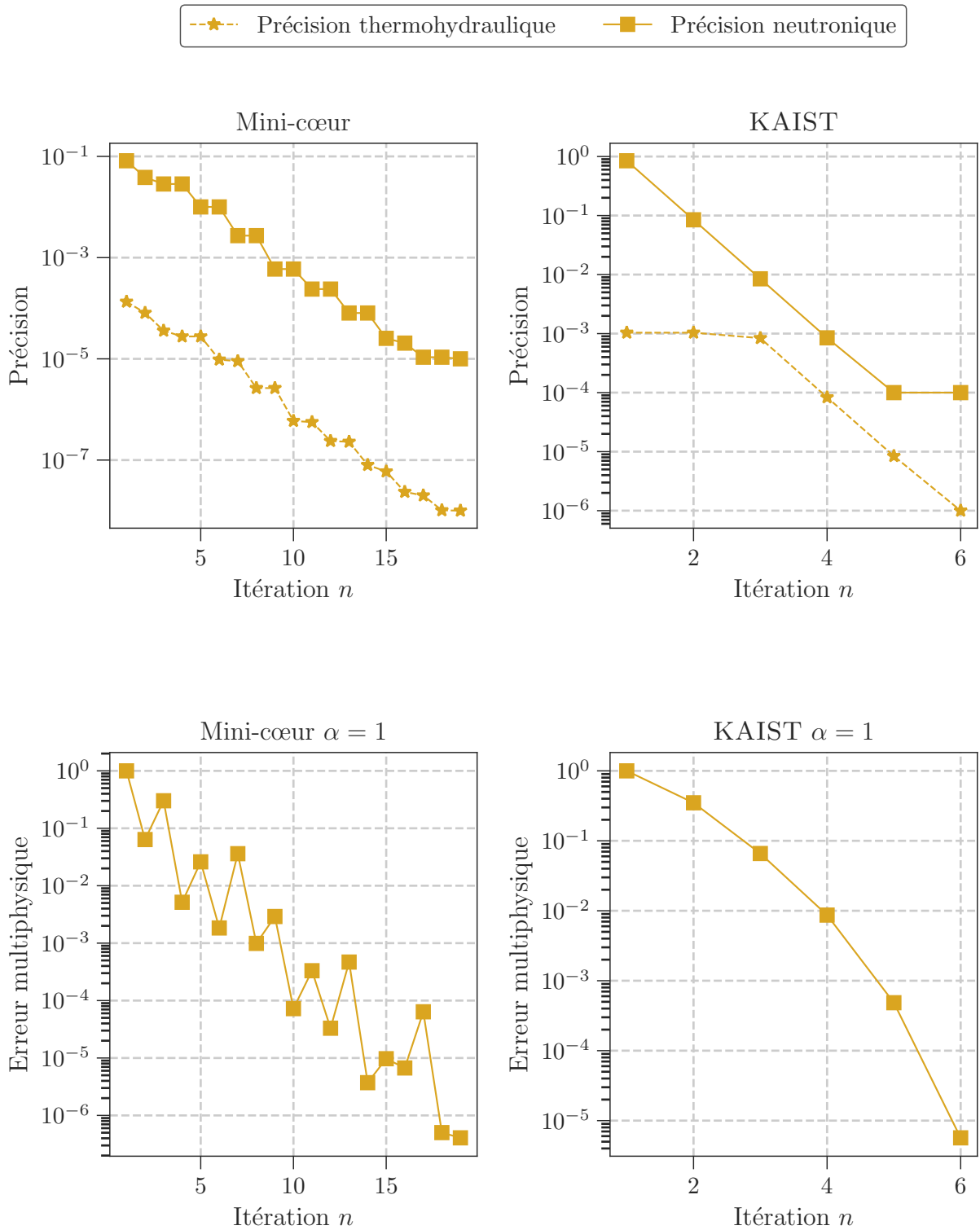


FIGURE 4.13 – Évolution des précisions neutronique et thermohydraulique calculées par le *Dynamic Residual Balance* et de l'erreur multiphysique.

effectuées. Dans la suite, on s'intéresse à des algorithmes d'accélération, dont l'objectif est directement d'améliorer la vitesse de convergence du point fixe.

4.3 Limites des méthodes d'accélération par rapport à la convergence partielle

L'objectif de cette section est de déterminer la manière dont l'accélération d'Anderson et la méthode de la sécante permettent d'accélérer et de stabiliser le calcul multiphysique. On met également en évidence les limites de ces méthodes en termes de réduction du temps de calcul par rapport à la convergence partielle, et la manière dont cette dernière influe sur les performances des méthodes d'accélération.

4.3.1 Implémentation de l'accélération d'Anderson et de la méthode de la sécante dans C3PO

On a donné en section 3.1.3 l'implémentation disponible de l'accélération d'Anderson dans C3PO. Elle repose sur une décomposition QR , décrite dans [Wal11]. Elle permet notamment de contrôler le conditionnement du système linéaire à résoudre pour déterminer les coefficients d'Anderson *via* le conditionnement de la matrice R . Elle permet ainsi de garantir la validité des coefficients calculés. De plus, elle est décrite comme plus efficace en termes de temps de calcul, dans la construction et la mise à jour du système linéaire à résoudre et la détermination des coefficients d'Anderson qui en découle. Notons également qu'on lance l'accélération d'Anderson à l'ordre $m \geq 2$ avec une mémoire pour la méthode partiellement remplie donc : on considère alors l'ordre de la méthode donné par $\min(m, n)$, où n est le numéro de l'itération multiphysique considérée. Cette approche est en effet la plus répandue dans la littérature et permet de limiter le nombre d'itérations multiphysiques libres. C'est un enjeu important, puisqu'on a vu durant la section 4.1.1 que ce sont surtout les premières itérations multiphysiques qui coûtent cher en temps de calcul lors d'un couplage multiphysique.

L'implémentation de la méthode de la sécante ne pose aucune difficulté. Elle a également été implémentée dans le cadre de ce travail et est disponible dans [c3p].

Dans le paragraphe suivant, on met en évidence la capacité de ces deux méthodes d'accélération à stabiliser le schéma de calcul couplé et à garantir sa convergence. En revanche, on montre qu'elles ne permettent pas de rivaliser avec les performances obtenues avec la convergence partielle, exposée en section 4.1.2.

4.3.2 Mise en évidence des limites des méthodes d'accélération sans convergence partielle

On donne figure 4.14 les résultats en termes de temps de calcul total pour le calcul couplé avec l'accélération d'Anderson, à l'ordre $m = 2$ et $m = 5$ et pour différentes valeurs de relaxation, ainsi que pour la méthode de la sécante, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST. On compare ces méthodes avec le point fixe sans et avec convergence partielle optimale (respectivement $N = 50$ et $N = 25$ pour le mini-cœur et KAIST) ainsi qu'avec la méthode du *Dynamic Residual Balance*.

On observe comme attendu que la performance de l'accélération d'Anderson ne dépend pas du facteur de relaxation β qu'on a introduit en section 2.3 et qu'on a noté α sur la figure 4.14

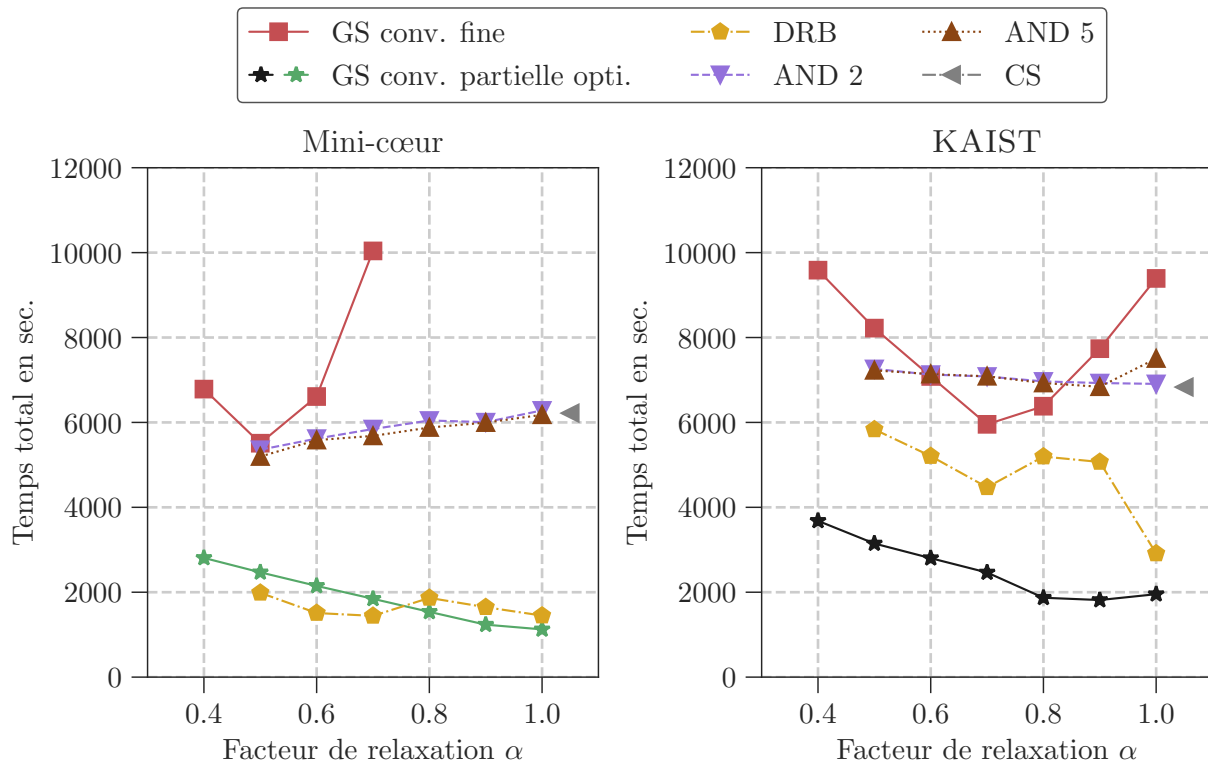


FIGURE 4.14 – Comparaison du temps de calcul total entre Gauss-Seidel avec et sans convergence partielle optimisée, le *Dynamic Residual Balance* et l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation multiphysique - on a noté *AND m* pour l'accélération d'Anderson à l'ordre *m* et *CS* pour la méthode de la sécante, **qu'on a placée en $\alpha = 1.05$ pour des raisons de lisibilité uniquement, le facteur de relaxation évoluant au cours du calcul.**

pour plus de lisibilité et pour simplifier les comparaisons. L'ordre de la méthode ne semble pas entraîner de différence non plus : c'est dû à la convergence rapide des problèmes considérés, en une dizaine d'itérations multiphysiques au maximum, comme on peut le voir sur la figure 4.15, ce qui limite l'intérêt d'utiliser un ordre élevé pour l'accélération d'Anderson. Concernant la méthode de la sécante, elle permet d'obtenir sur ces cas d'étude un temps de calcul total comparable à celui résultant de l'accélération d'Anderson. Pour les deux cas d'étude, sans facteur de relaxation pour Anderson, on n'arrive pas à battre en termes de temps de calcul la méthode de Gauss-Seidel, avec convergence fine et utilisation d'un facteur de relaxation optimal, à savoir $\alpha = 0.5$ pour le mini-cœur et $\alpha = 0.7$ pour KAIST. On est dans tous les cas loin des performances qu'on peut atteindre avec la convergence partielle ou la méthode du *Dynamic Residual Balance*. Malgré tout, l'utilisation de ces méthodes permet de stabiliser le calcul, puisqu'on n'a plus besoin de déterminer une valeur du facteur de relaxation permettant au couplage de converger.

On donne figure 4.15 l'évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul pour la méthode d'Anderson à l'ordre 2 et 5, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante. On compare cette évolution avec les cas optimaux de la méthode de Gauss-Seidel (convergence fine ; $\alpha = 0.5$) et ($N = 50$; $\alpha = 1$) pour le mini-cœur et (convergence fine ; $\alpha = 0.7$) et ($N = 25$; $\alpha = 0.9$) pour KAIST. On observe que l'accélération d'Anderson permet d'augmenter la vitesse de convergence par rapport à la méthode de Gauss-Seidel avec convergence fine et

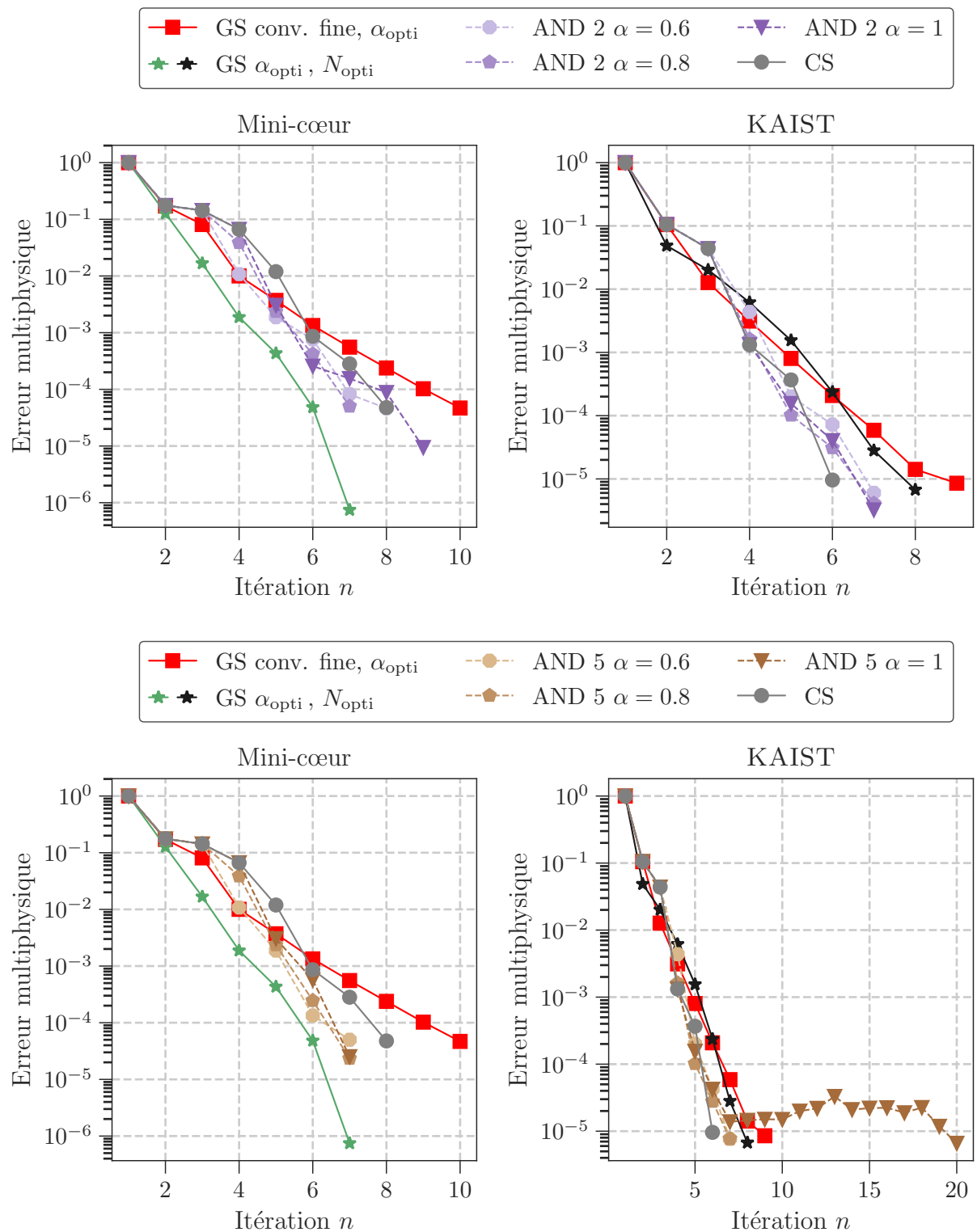


FIGURE 4.15 – Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée (en vert, $N=50$ pour le mini-cœur, en noir $N=25$ pour KAIST), pour l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante (voir figure 4.14 pour la signification des légendes).

Mini-cœur		
	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydrauliques
GS conv. fine $\alpha = 0.5$	3151	8982
GS $N = 50$; $\alpha = 1$	302	6946
CS conv. fine	3776	8550
AND conv. fine $M = 2$; $\alpha = 1$	3773	8331
AND conv. fine $M = 5$; $\alpha = 1$	3768	7981

KAIST		
	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydrauliques
GS conv. fine $\alpha = 0.7$	549	386
GS $N = 25$; $\alpha = 0.9$	140	503
CS conv. fine	639	399
AND conv. fine $M = 2$; $\alpha = 1$	639	296
AND conv. fine $M = 5$; $\alpha = 1$	652	311

TABLEAU 4.3 – Nombre d'itérations neutroniques et de pas de temps thermohydrauliques pour le mini-cœur et pour le problème 1A de KAIST pour les méthodes de Gauss-Seidel avec ou sans convergence partielle optimisée et pour l'accélération d'Anderson ainsi que la méthode de la sécante.

relaxation optimisée et constante. Pour les deux problèmes, quel que soit l'ordre retenu pour Anderson, on a ainsi une convergence plus rapide en termes de nombre d'itérations multiphysiques, avec une vitesse de convergence qui se rapproche de celles qu'on observe pour la méthode de Gauss-Seidel avec convergence partielle du solveur neutronique optimisée et facteur de relaxation optimisé. Remarquons un cas particulier, celui correspondant à l'accélération d'Anderson à l'ordre 5 sans relaxation pour le problème 1A de KAIST, qui converge en un peu moins de 20 itérations multiphysiques alors qu'au départ, sa vitesse de convergence semble identique aux cas avec relaxation qui convergent eux en un peu plus de 5 itérations multiphysiques. En réalité, les 10 dernières itérations multiphysiques sont alors constituées d'un unique pas de temps thermohydraulique suivi d'une unique itération neutronique. Les solveurs ont donc convergés dès l'itération multiphysique numéro 6, mais l'erreur multiphysique n'ayant pas atteint le niveau de précision souhaité, le calcul multiphysique continue. Le fait de n'effectuer qu'un seul pas de temps et qu'une seule itération neutronique bruite fortement la mémoire de la méthode d'Anderson d'où la difficulté à converger pendant cette dizaine d'itérations multiphysiques supplémentaires : ce phénomène a déjà été observé par CATTANEO dans [Cat20] par exemple. Concernant la méthode de la sécante, on observe qu'elle accélère légèrement la convergence en termes d'itérations multiphysiques pour le mini-cœur, et que cette accélération est plus prononcée dans le cas de KAIST. Dans les deux problèmes, on obtient une vitesse de convergence proche de celle obtenue avec Anderson ou de celle observée dans le cas de la convergence partielle neutronique optimisée pour le point fixe. L'utilisation de la méthode de la sécante permet ainsi de se soustraire à la détermination numérique d'une valeur satisfaisante pour le facteur de relaxation, de la même manière que l'accélération d'Anderson, comme on vient de le voir.

On a vu que, même si la vitesse de convergence s'améliore avec la méthode d'Anderson ou avec celle de la sécante par rapport à la méthode de Gauss-Seidel avec convergence fine et facteur de relaxation optimisés, le temps de calcul total n'est pas amélioré, voire même dégradé dans le cas de KAIST. Cela s'explique par le nombre d'itérations monophasiques effectuées. On donne dans le tableau 4.3 le nombre d'itérations monophasiques pour quelques uns de ces couplages. Ce surplus d'itérations monophasiques pour l'accélération d'Anderson et la méthode de la sécante est dû notamment aux premières itérations multiphasiques.

Ces méthodes ne permettent pas d'obtenir des temps de calcul compétitifs par rapport à la méthode de Gauss-Seidel avec convergence partielle : la convergence rapide en termes de nombre d'itérations multiphasiques ne permet ainsi pas aux méthodes d'accélération d'apporter un réel gain et de compenser la sur-résolution entre les physiques. Dans le cas du mini-cœur, si l'on compare la figure 4.3 et le tableau 4.1, on voit par exemple que la première itération multiphasique avec convergence fine nécessite plus d'itérations neutroniques que l'ensemble du calcul multiphasique avec convergence partielle optimisée. On retient malgré tout qu'elles permettent de stabiliser les simulations et ainsi de ne pas avoir à rechercher un facteur de relaxation faisant converger le couplage. L'ordre de la méthode d'Anderson reste à la discrétion de l'utilisateur, mais il influe peu sur le couplage du fait de la convergence multiphasique rapide. Choisir un ordre m entre 2 et 5 est un choix satisfaisant qu'on retrouve dans la littérature, par exemple dans [CLM⁺21, TKS⁺15]. On cherche dans le paragraphe suivant à déterminer si l'utilisation de la convergence partielle neutronique, combinée avec l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante, permet d'améliorer le temps de calcul multiphasique qu'on a obtenu avec la méthode de Gauss-Seidel avec convergence partielle neutronique optimisée ou celui obtenu avec la méthode du *Dynamic Residual Balance*.

4.3.3 Impact de la convergence partielle sur les méthodes d'accélération

Au vu de l'apport limité des méthodes d'accélération du point fixe en termes de temps de calcul total par rapport aux performances obtenues avec la convergence partielle, on cherche dans ce paragraphe à déterminer la manière dont la convergence partielle du solveur neutronique impacte les performances de l'accélération d'Anderson et de la méthode de la sécante. Dans la littérature [CLM⁺21], on trouve ainsi que l'introduction de la convergence partielle, en brisant la mémoire constituée au cours du calcul dans l'accélération d'Anderson, peut dégrader ses performances. On a d'ailleurs vu au paragraphe précédent un exemple de ce résultat : dans la figure 4.15, pour KAIST, l'accélération d'Anderson avec $m = 5$ converge difficilement à partir du moment où chacun des deux solveurs ne fait respectivement plus qu'un pas de temps ou qu'une itération.

Les résultats pour différents niveaux de convergence partielle sont donnés figure 4.16 pour le temps de calcul total. On observe par rapport au cas sans convergence partielle, donné figure 4.14, qu'aussi bien l'ordre m de l'accélération d'Anderson que le facteur de relaxation influencent dorénavant la performance de l'accélération en termes de temps de calcul. Cette remarque est vraie à partir d'un certain niveau de convergence partielle, dépendant du cas d'étude. Il s'agit dans les exemples donnés ici de $N = 100$ pour le mini-cœur et $N = 15$ pour KAIST. Ainsi, pour $N = 100$ et $N = 50$ pour KAIST, le comportement de l'accélération d'Anderson ne varie pas par rapport au cas avec convergence fine donné en figure 4.14.

Un ordre élevé ($m = 5$) associé à un fort niveau de convergence partielle semble particulièrement dégrader le comportement de l'accélération : c'est cohérent, puisqu'alors la mémoire utilisée pour le

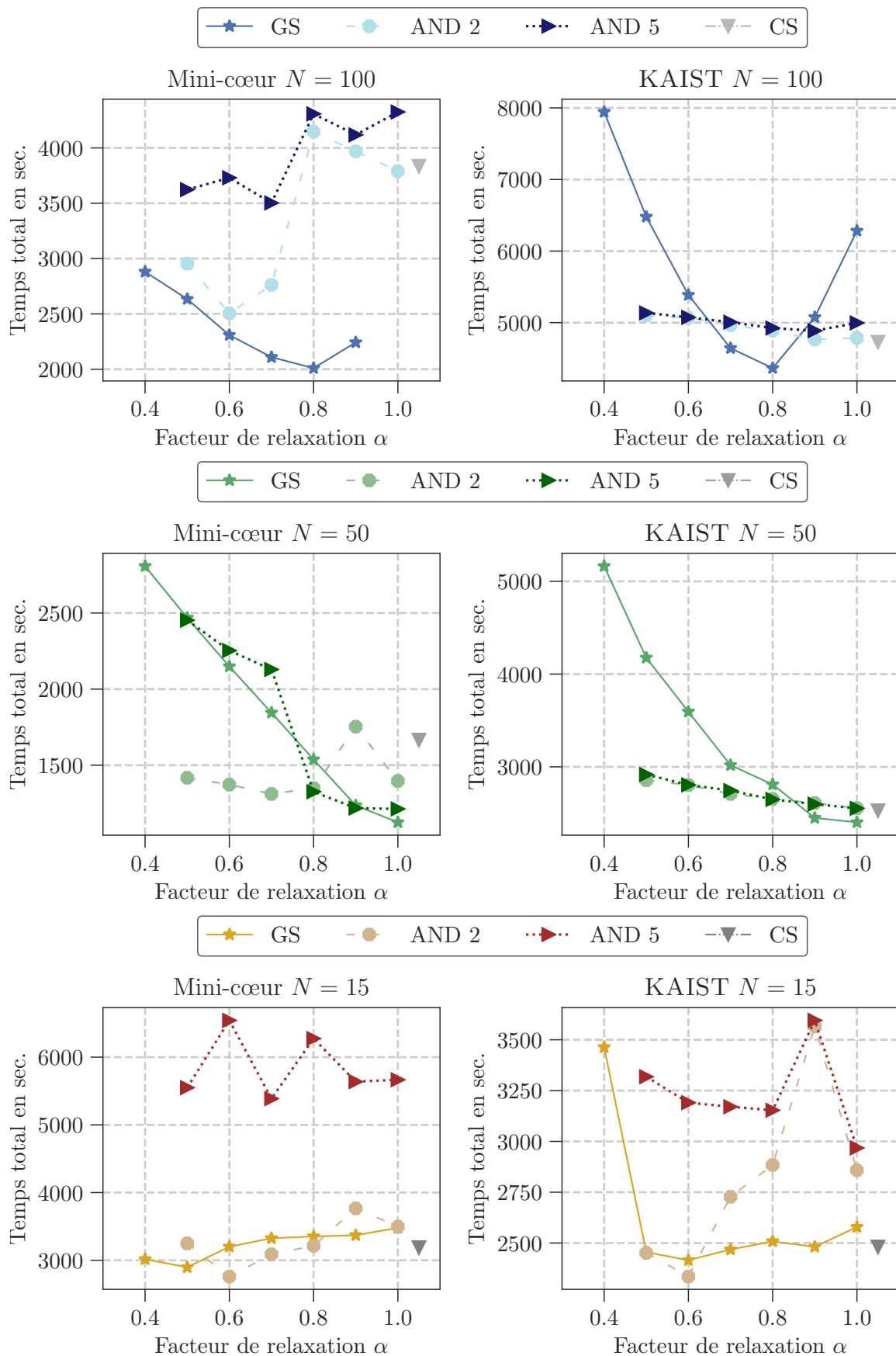


FIGURE 4.16 – Évolution du temps de calcul total en fonction du facteur relaxation, de la méthode de couplage et du niveau de convergence partielle.

problème d'optimisation associé à l'accélération d'Anderson contient pendant plusieurs itérations des vecteurs potentiellement très bruités. On observe ce phénomène pour le cas $N = 15$ notamment. Pour ce dernier cas, on remarque que le fait de conserver un ordre plus faible ($m = 2$) limite ce phénomène dans le cas du mini-cœur. Dans le cas de KAIST, on peut faire la même remarque même si cela est moins marqué : ainsi, les écarts en termes de temps de calcul, à facteur de relaxation fixé, entre la méthode de Gauss-Seidel et l'accélération d'Anderson pour $m = 2$ sont en moyenne deux fois moins élevés que pour $m = 5$.

Lorsque le nombre d'itérations neutroniques autorisées est plus élevé, l'accélération d'Anderson, pour $m = 2$ et $m = 5$, semble donner des résultats comparables à la méthode de Gauss-Seidel, avec une exception : le cas $N = 100$ pour le mini-cœur pour lequel ni l'accélération d'Anderson ni la méthode de la sécante ne montrent un bon comportement. Il faut nuancer ce constat en rappelant que le cas équivalent sans facteur de relaxation pour la méthode de Gauss-Seidel ne converge pas.

La méthode de la sécante permet dans tous les cas d'obtenir des temps de calcul totaux comparables à la méthode de Gauss-Seidel avec relaxation optimisée, à niveau de convergence partielle donné, avec toujours pour exception le cas $N = 100$ du mini-cœur. Ses performances sont finalement assez proches de l'accélération d'Anderson à l'ordre 2.

Pour comprendre ces différences de temps de calcul, il est nécessaire de comparer les vitesses de convergence de ces différents cas. On donne l'évolution des erreurs multiphysiques pour ces trois niveaux de convergence partielle figures 4.17, 4.18, 4.19, qu'il convient de comparer à la figure 4.15 pour le cas avec convergence fine du solveur neutronique.

Pour le problème 1A de KAIST et pour $N = 100$ et $N = 50$, on observe que l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante permettent, en termes de nombre d'itérations multiphysiques, d'accélérer légèrement la convergence ou d'obtenir une vitesse comparable à la méthode de Gauss-Seidel avec un facteur de relaxation optimisé. Comme précédemment, la différence en termes de temps de calcul, qu'on observe figure 4.16, s'explique alors par des différences en termes de nombre total d'itérations monophasiques effectuées. Le fait d'augmenter l'ordre m de la méthode ne semble pas apporter en termes de vitesse de convergence. La même remarque peut être faite pour le mini-cœur avec $N = 50$. Le comportement de l'accélération d'Anderson est alors celui attendu : on a bien une décroissance rapide de l'erreur multiphysique, même si le faible nombre d'itérations multiphysiques ne permet pas d'observer un réel gain en termes de vitesse de convergence. L'apport du facteur de relaxation sur l'accélération d'Anderson, en termes de vitesse de convergence, est limité, voire son introduction peut dégrader la convergence de la méthode, comme on l'observe pour le mini-cœur avec $N = 50$ et $\alpha = 0.6$.

Pour le problème 1A de KAIST avec $N = 15$ et pour le mini-cœur avec $N = 100$ et $N = 15$, on observe une convergence bruitée lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson, et ce quel que soit l'ordre m considéré. Dans le cas $N = 15$, pour chacun des cas d'étude, cela ne se traduit pas par un surcoût particulier en termes de nombre d'itérations multiphysiques effectuées, si l'on compare avec la méthode de Gauss-Seidel utilisée avec un niveau de convergence partielle similaire. L'introduction d'une relaxation semble alors permettre à l'accélération d'Anderson de converger plus rapidement. Sans relaxation, on doit effectuer quelques itérations multiphysiques supplémentaires, ce qui explique en partie les écarts en termes de temps de calcul qu'on observe figure 4.16, la différence en termes de nombre d'itérations monophasiques effectuées, notamment le

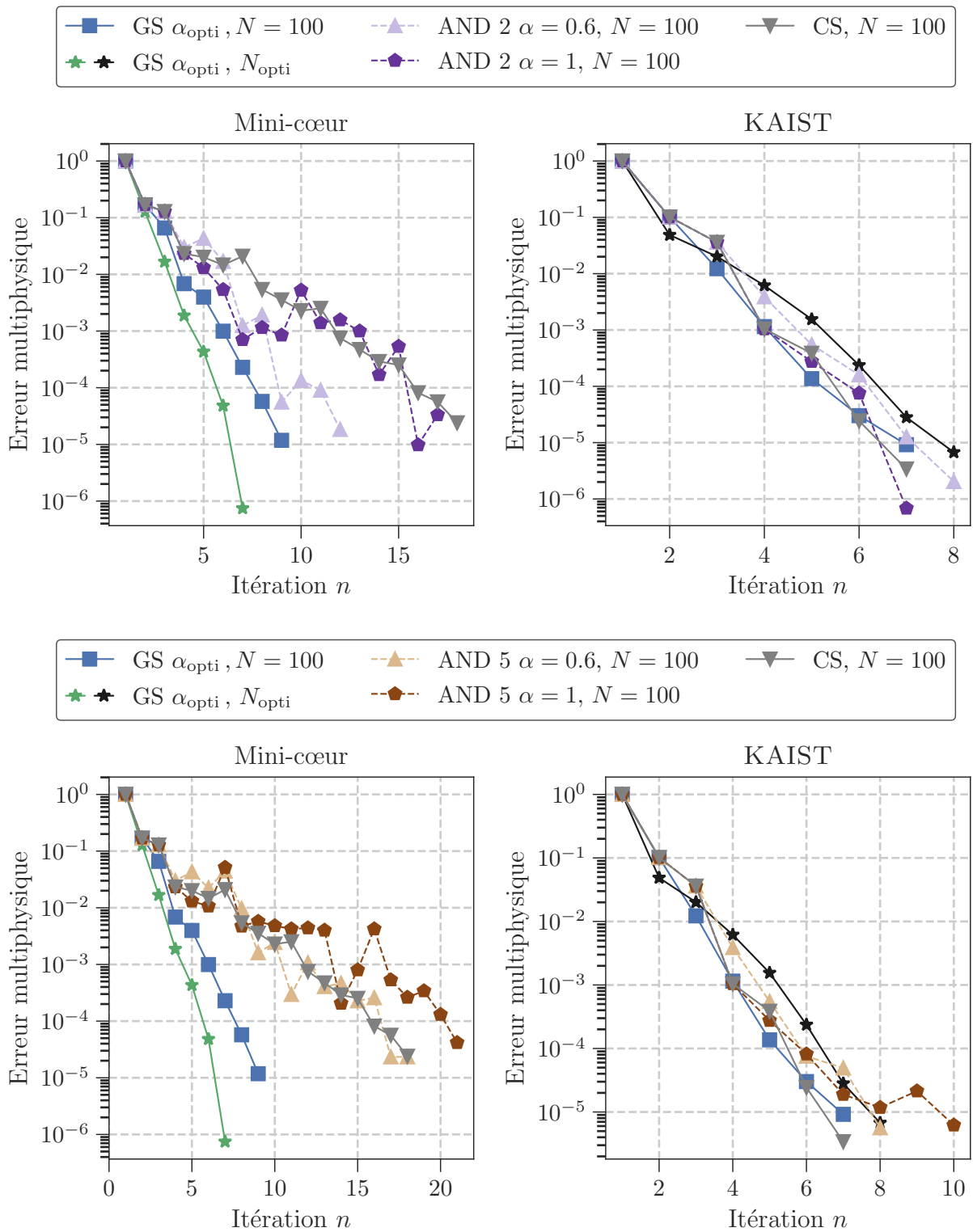


FIGURE 4.17 – Évolution de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée, pour l'accélération d'Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante, avec $N = 100$ (voir figure 4.14 pour la signification des légendes).

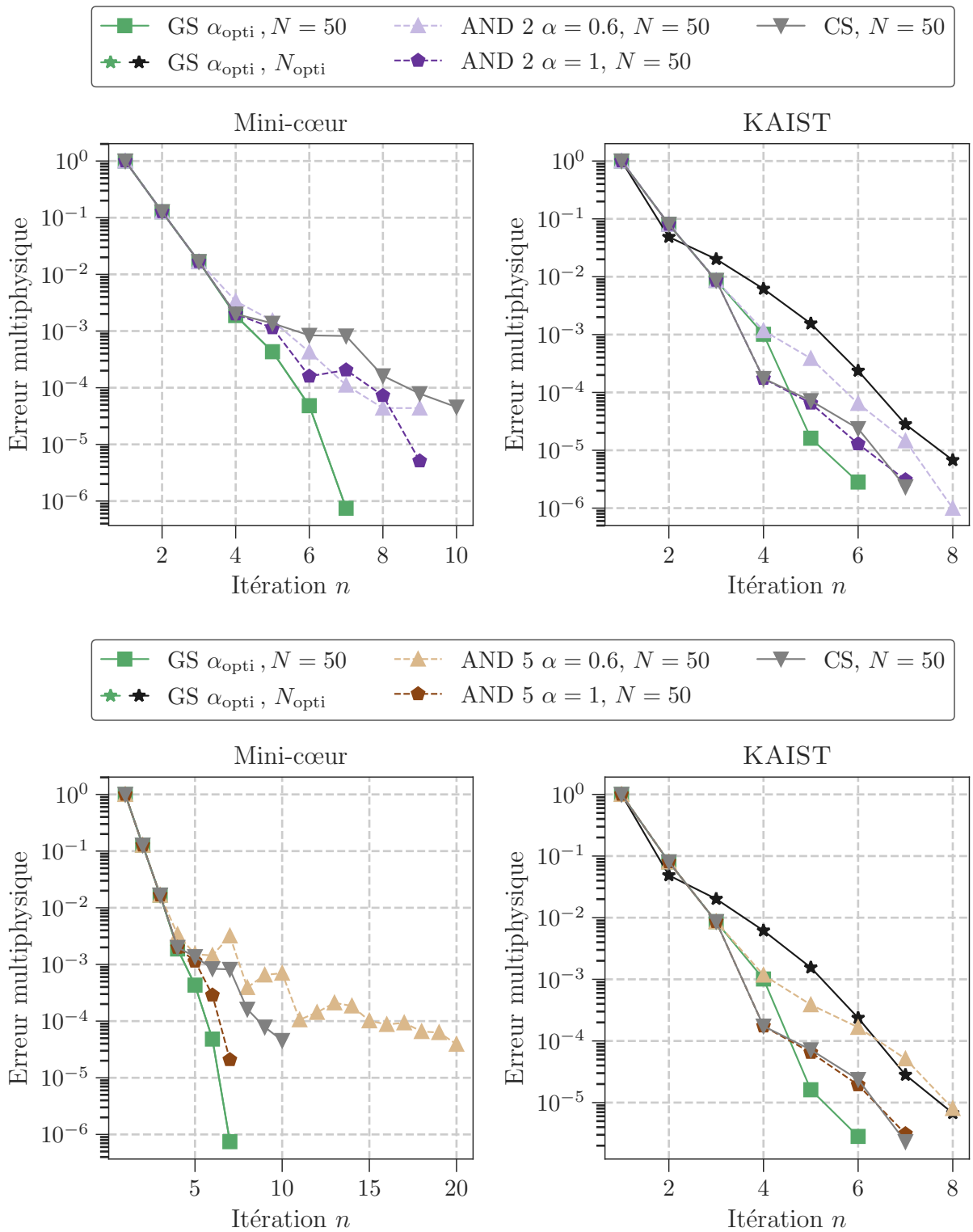


FIGURE 4.18 – Évolution de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée, pour l’accélération d’Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante, avec $N = 50$ (voir figure 4.14 pour la signification des légendes). Remarque : les courbes $GS \alpha_{opti}, N_{opti}$ et $GS \alpha_{opti}, N = 50$ sont confondues pour le mini-cœur.

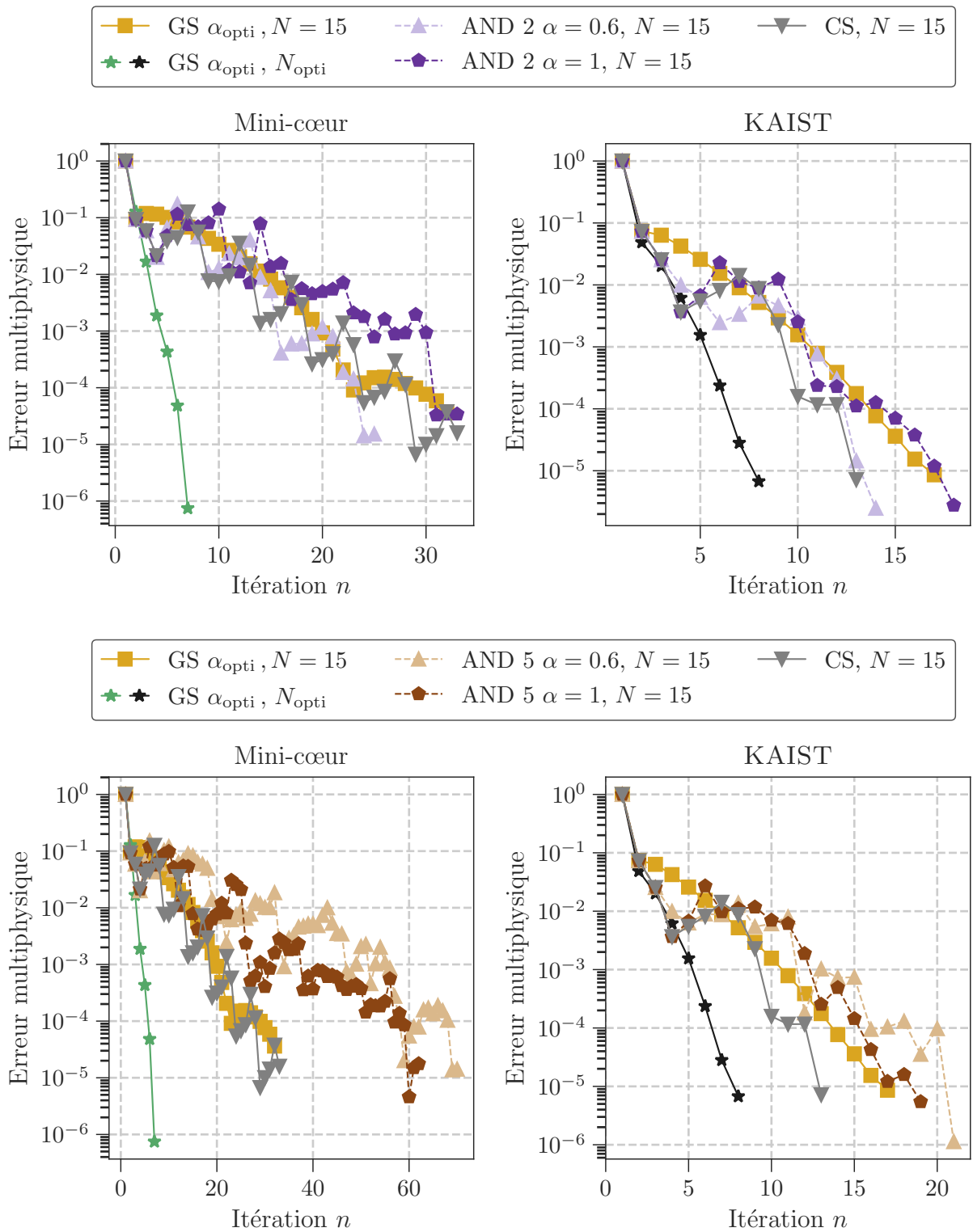


FIGURE 4.19 – Évolution de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique en fonction du facteur relaxation, pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST, pour la méthode de Gauss-Seidel sans et avec convergence partielle optimisée, pour l’accélération d’Anderson, en fonction du facteur de relaxation, et pour la méthode de la sécante, avec $N = 15$ (voir figure 4.14 pour la signification des légendes).

nombre de pas de temps thermohydrauliques, rentrant également en compte. Pour le cas $N = 100$ pour le mini-cœur, la situation est différente. On observe en effet une convergence beaucoup plus lente en termes de nombre d'itérations multiphysiques, qui ne correspond pas du tout à la vitesse de convergence qu'on observe pour la méthode de Gauss-Seidel équivalente ($N = 100$ et $\alpha = 0.8$). Pour ces trois cas particuliers, on peut proposer une explication : on observe en effet que les premières itérations accélérées conduisent à une stagnation de l'erreur multiphysique : les premières itérations accélérées ne sont donc pas pertinentes et on a alors une mémoire bruitée, composée de vecteurs encore éloignés de la solution multiphysique et qui ne semblent pas s'en rapprocher. L'accélération d'Anderson ne permet alors pas d'obtenir une nouvelle itérée extrapolée à partir des m dernières itérations qui soit pertinente, d'où cette vitesse de convergence dégradée et ce comportement bruité. Concernant la méthode de la sécante, puisqu'il s'agit également de calculer une nouvelle itérée à partir des anciennes itérations, les remarques faites pour l'accélération d'Anderson sont également valables, et on remarque ainsi que les performances de cette méthode en termes de vitesse de convergence suivent celles de l'accélération d'Anderson.

Finalement, contrairement à la méthode de Gauss-Seidel pour laquelle on a trouvé un niveau de convergence partielle optimal, permettant de minimiser le temps de calcul et d'améliorer la vitesse de convergence du problème multiphysique, la situation est plus complexe pour les algorithmes d'accélération. Comme souligné par CATTANEO dans [CLM⁺21] par exemple, la convergence partielle dégrade effectivement les performances de l'accélération d'Anderson, et on a confirmé ce point ici. Cela étant dit, une solution simple semble être de contrôler la convergence du problème multiphysique, et d'attendre d'avoir suffisamment convergé, avant de commencer à utiliser l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante. Cela rejoint la stratégie proposée par POLLOCK et REBHOLZ dans [PR21], à savoir commencer avec un ordre m bas puis l'augmenter lorsque l'erreur est suffisamment basse. Ici, il s'agirait de commencer en itérant simplement avec la méthode de Gauss-Seidel, puis d'enclencher l'accélération à un niveau d'erreur multiphysique donné. Cela doit permettre d'accélérer la convergence du couplage malgré l'introduction de la convergence partielle. Bien sûr, la question porte alors sur le choix de ce niveau d'erreur, et on se retrouve avec un nouveau paramètre à explorer.

Une autre possibilité, plus prometteuse, passe par la mise en place de couplages plus intrusifs. En effet, la convergence partielle du solveur neutronique change la nature du point fixe dont on cherche une solution, comme on l'a expliqué en section 2.4, puisque l'état final du solveur neutronique dépend alors de son initialisation. Pour une itération multiphysique n donnée, avec convergence des solveurs à chaque appel et si on reprend les notations données en section 3.2.1, il s'agit en effet de calculer

$$\left(P_f^{(n+1)}, P_w^{(n+1)} \right) = N \left(\text{TH} \left(P_f^{(n)}, P_w^{(n)} \right) \right).$$

Avec convergence partielle, et si on note $\phi^{(n)}$ le flux neutronique multigroupe final calculé à l'itération n , qui sert à initialiser le solveur N à l'itération $n + 1$, on a plutôt :

$$\left(\phi^{(n+1)}, P_f^{(n+1)}, P_w^{(n+1)} \right) = N \left(\phi^{(n)}, \text{TH} \left(P_f^{(n)}, P_w^{(n)} \right) \right),$$

et le point fixe à accélérer doit dorénavant faire intervenir le flux neutronique. Comme la puissance est elle aussi calculée à partir du flux, le point fixe à accélérer peut s'écrire plus simplement :

$$\left(\phi^{(n+1)}\right) = \mathbf{N}\left(\phi^{(n)}, \text{TH}\left(\phi^{(n)}\right)\right). \quad (4.3.1)$$

On sort alors du cadre des couplages en boîtes noires puisqu'il s'agit de pouvoir extrapoler des valeurs du flux, ce qui n'est pas autorisé pour un simple utilisateur en l'état dans MINOS. Cette approche nous semble plus prometteuse : l'utilisation de l'accélération d'Anderson, ou des méthodes d'extrapolation comme celle de la méthode de la sécante, semble en effet à première vue facile à mettre en place pour des gains potentiellement élevés en termes de vitesse de convergence, d'où un intérêt grandissant dans la littérature. Pour obtenir des résultats satisfaisants, il convient cependant de les appliquer correctement, c'est-à-dire sur des problèmes de point fixe correctement définis. Travailler directement sur le flux neutronique plutôt que sur la puissance semble ainsi un moyen d'améliorer la performance de l'accélération d'Anderson en termes de vitesse de convergence multiphysique. On s'attend par ailleurs également à un gain en termes de vitesse de convergence neutronique : l'accélération appliquée au flux neutronique doit ainsi permettre d'accélérer à la fois le problème multiphysique et à la fois le problème neutronique.

Bilan de la section : Dans cette section, on a mis en évidence l'intérêt de l'accélération d'Anderson et de la méthode de la sécante : ces méthodes permettent ainsi, dans le cas de la convergence fine des solveurs, de stabiliser le schéma de couplage multiphysique sans avoir à déterminer un facteur de relaxation multiphysique permettant de faire converger le couplage multiphysique. En termes de temps de calcul total et de vitesse de convergence, ces deux méthodes permettent d'obtenir des résultats proches par rapport au couplage avec la méthode de Gauss-Seidel, lorsqu'on fait converger finement les solveurs en introduisant un facteur de relaxation optimisé. En revanche, l'introduction de la convergence partielle pour le solveur neutronique dégrade le comportement de ces deux méthodes, en termes de vitesse de convergence multiphysique, en bruyant leur mémoire respective. On peut imaginer améliorer ce point en fixant un niveau d'erreur multiphysique à partir duquel l'accélération d'Anderson ou la relaxation dynamique serait déclenchée. Une autre approche, qu'on explore au chapitre 6, est d'appliquer l'accélération d'Anderson directement sur le flux neutronique, puisque la convergence partielle modifie la définition du point fixe que l'on cherche à résoudre.

4.4 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a exploré les différentes méthodes de couplage en boîtes noires retenues au chapitre 2 : la méthode de Gauss-Seidel, avec ou sans facteur de relaxation, l'accélération d'Anderson, la méthode de la sécante et les méthodes de type *Residual Balance*. Pour les trois premières, l'influence de la convergence partielle du solveur neutronique a également été étudiée.

On a mis en évidence la nécessité d'introduire une relaxation pour stabiliser le couplage avec convergence fine entre MINOS et THEDI et le faire converger. La valeur optimale de ce facteur de relaxation peut être déterminée numériquement : elle dépend alors du cas d'étude considéré. L'utilisation d'une valeur optimisée permet d'accélérer la convergence du couplage et de réduire le temps de calcul global. Le temps de calcul total est en majorité porté par les premières itérations

multiphysiques. Leur coût en termes de temps de calcul est essentiellement dû au grand nombre d'itérations neutroniques qui y sont effectuées. Introduire une convergence partielle du solveur neutronique permet donc de gagner en temps de calcul, en limitant la sur-résolution. De plus, cela permet également de stabiliser le schéma de calcul ainsi que d'augmenter la vitesse de convergence multiphysique : ce dernier point est d'après nous à souligner. L'intérêt de la convergence partielle n'est ainsi pas uniquement d'économiser un nombre d'itérations monophysiques. Là encore, le niveau optimal, c'est-à-dire le nombre optimal d'itérations neutroniques à autoriser par appel à MINOS, peut être déterminé numériquement. Il dépend alors du problème considéré. Finalement, l'optimisation du niveau de convergence partielle et du facteur de relaxation permet un réel gain en termes de temps de calcul, en le divisant par 4 pour le mini-cœur et par 3 pour le problème 1A de KAIST.

La détermination de ces valeurs optimales nécessitant une recherche numérique coûteuse, cette approche ne saurait être totalement satisfaisante dans l'optique de déterminer une méthodologie de couplage générique entre neutronique, thermohydraulique et thermique. La capacité de la méthode de l'*Adaptive Residual Balance* à contrôler la sur-résolution a donc été explorée. L'enjeu est alors de faire décroître au fur et à mesure du calcul multiphysique les précisions demandées à chacun des solveurs. On a montré qu'une telle approche permet effectivement de diminuer d'un tiers le temps de calcul, après optimisation du paramètre libre de la méthode : celle-ci est en effet sensible à l'initialisation du taux de convergence et aux amplitudes des premières erreurs de chacun des solveurs. De plus, elle peut entraîner une évolution des précisions bruitée, c'est à dire que les précisions imposées aux solveurs peuvent être relâchées au cours du calcul, ce qui est un comportement que l'on souhaite éviter. De ce fait, on a proposé la méthode du *Dynamic Residual Balance*, qui s'inspire de l'*Adaptive Residual Balance*. L'idée est alors d'introduire une asymétrie entre les solveurs : puisque c'est la neutronique qui coûte le plus cher en temps de calcul dans le couplage étudié, il s'agit de faire évoluer la précision neutronique en fonction d'un taux de convergence moyen, et de simplement demander à la thermohydraulique et à la thermique d'atteindre un niveau de précision correspondant à l'erreur finale atteinte par la neutronique, sans aller au delà. La méthode permet également de garantir une décroissance monotone des précisions. On a montré qu'elle permettait effectivement d'obtenir des temps de calcul totaux proches de la méthode de Gauss-Seidel avec optimisation du niveau de convergence partielle et du facteur de relaxation. L'avantage de cette approche réside dans son absence de paramètre libre : aucune optimisation dépendante du cas d'étude n'est *a priori* nécessaire. Cependant, on a besoin d'accéder aux erreurs initiales des solveurs, ce qui peut être un facteur limitant. Malgré tout, ce type de méthode semble offrir une réelle possibilité de contrôle de la sur-résolution et gagnerait à être étudié plus en détails.

Finalement, on a montré que l'accélération d'Anderson et la méthode de la sécante permettent effectivement de stabiliser le couplage : on n'a pas besoin de d'introduire un facteur de relaxation pour faire converger le calcul multiphysique. Elles augmentent également la vitesse de convergence du problème multiphysique par rapport à la méthode de Gauss-Seidel relaxée avec convergence fine. Cependant, le gain en termes de temps de calcul n'est pas systématique du fait d'un nombre d'itérations monophysiques pouvant être plus important. De plus, ce type de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique convergeant en un nombre relativement faible d'itérations multiphysiques, les apports des méthodes d'accélération, en termes de vitesse de convergence, sont malgré tout limités. L'utilisation combinée de la convergence partielle et de l'accélération d'Anderson ou de la méthode de la sécante a également été étudiée. On a montré que la convergence partielle entraîne la constitution d'une mémoire bruitée pour ces méthodes,

ce qui détériore leurs performances en termes de vitesse de convergence. C'est notamment lié au niveau d'erreur multiphysique à partir duquel ces algorithmes d'accélération sont utilisés pour les premières itérations. Il semble possible d'améliorer ce type de couplage en attendant par exemple d'avoir convergé jusqu'à un niveau donné d'erreur multiphysique, avant de déclencher ces méthodes d'accélération. Cette approche semble cependant limitée, puisqu'on est de nouveau contraint de déterminer des niveaux de précisions satisfaisants qui vont dépendre des cas d'étude, ne permettant pas de déployer une méthodologie de couplage générique entre neutronique, thermohydraulique et thermique. En réalité, la convergence partielle modifie la définition du point fixe que l'on cherche à résoudre, puisque l'état final de l'opérateur neutronique dépend alors du flux neutronique ayant servi à son initialisation. Un moyen plus efficace pour améliorer les performances de l'accélération d'Anderson est alors de l'appliquer directement sur le flux et non plus sur la puissance.

Ces différentes études nous ont permis de mettre en évidence un point critique et limitant lorsqu'on parle de couplage entre solveurs monophysiques préexistants. Il semble qu'aucun algorithme de couplage avec convergence fine ne peut contrebalancer le coût neutronique des premières itérations multiphysiques. Cela est dû au grand nombre d'itérations neutroniques à effectuer notamment pour les premiers appels à APOLLO3®. Pour pouvoir espérer atteindre, sans convergence partielle, les temps de calcul obtenus avec optimisation du niveau de convergence partielle et du facteur de relaxation pour la méthode de Gauss-Seidel, on doit donc accélérer la convergence interne de MINOS. Le chapitre suivant est donc dédié à l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans ce solveur, pour accélérer la résolution du problème à valeur propre neutronique. Cette étape doit également permettre d'explorer dans un second temps les couplages intrusifs, où l'accélération d'Anderson est appliquée directement sur le flux et non plus sur la puissance.

Chapitre 5

Optimisation des couplages en boîtes noires *via* l'accélération de la résolution du problème à valeur propre dans Minos

L'objectif de ce chapitre est d'améliorer la vitesse de convergence du solveur neutronique SP_N MINOS, en implémentant l'accélération d'Anderson comme méthode d'accélération de la méthode de la puissance itérée. En effet, il semble difficile d'espérer pouvoir mettre en place des schémas de couplage avec convergence fine des solveurs rivalisant avec la convergence partielle, en termes de temps de calcul : la vitesse de convergence actuelle de la méthode de la puissance itérée implique ainsi un nombre important d'itérations neutroniques pour converger. Une attention particulière est portée dans cette partie à l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans MINOS : on cherche en effet à ce que ce développement puisse être facilement intégrable dans APOLLO3® et on utilise donc exclusivement les méthodes existantes dans MINOS.

Dans une première section, on met en évidence le point fixe qu'on cherche à résoudre et les variables sur lesquelles doit être appliquée l'accélération d'Anderson. On évalue ses performances en termes de temps de calcul notamment, pour le mini-cœur, en diffusion donc, et pour le problème 1A de KAIST, en SP_3 . Dans une seconde section, on met en place un schéma d'accélération simplifié, en profitant du lien linéaire entre le terme source de fission et le flux neutronique, qui permet de réduire le surcoût en termes de temps de calcul associé à l'utilisation de l'accélération d'Anderson. Enfin, on étudie la manière dont sont impactés les résultats obtenus au chapitre 4 lorsque l'accélération d'Anderson est utilisée dans MINOS à la place de celle de Chebyshev.

Sommaire

5.1	Implémentation de l'accélération d'Anderson pour Minos	120
5.1.1	Définition du point fixe complet à accélérer et implémentation d'Anderson dans MINOS	120
5.1.2	Validation de l'approche et mise en évidence de ses performances	121
5.2	Optimisation de l'implémentation de l'accélération d'Anderson	124
5.2.1	Prise en compte de la linéarité entre la source et le flux dans l'accélération d'Anderson	124
5.2.2	Performance de l'accélération d'Anderson appliquée à la source et répercutée sur le flux	127

5.2.3	Choix retenus dans l'implémentation d'Anderson	129
5.2.4	Optimisation de la stratégie de lancement	129
5.2.4.1	Intérêt du lancement rapide de l'accélération	131
5.2.4.2	Stratégie d'évolution automatique de l'ordre m de l'accélération d'Anderson	131
5.2.5	Impact mémoire de l'accélération d'Anderson	133
5.3	Impact d'une neutronique accélérée sur les couplages en boîtes noires .	134
5.3.1	Performance des couplages avec convergence fine	134
5.3.2	Performance des couplages à convergence partielle	139
5.4	Bilan du chapitre	143

5.1 Implémentation de l'accélération d'Anderson pour la résolution du problème à valeur propre dans Minos

Dans cette section, on implémente l'accélération d'Anderson dans MINOS pour résoudre le problème à valeur propre issu des équations SP_N qu'on a introduites au paragraphe 3.1.1.2. L'objectif est d'accélérer la convergence de la méthode de la puissance itérée, présentée au paragraphe 1.1.3.3 et détaillée en 3.1.1.2 pour son implémentation dans MINOS.

5.1.1 Définition du point fixe complet à accélérer et implémentation d'Anderson dans Minos

L'accélération de Chebyshev, aujourd'hui utilisée par MINOS, est une méthode répandue pour accélérer la méthode de la puissance itérée dans les solveurs neutroniques. Dans MINOS, son implémentation se traduit par le calcul, pour la prochaine itération neutronique, d'un nouveau terme source de fission accéléré, à partir de la source actuelle et des deux sources précédentes. Ainsi, une itération neutronique $k + 1$ consiste à résoudre le système SP_N décrit en 3.1.1.2, connaissant le flux $\phi^{(k)}$, les sections efficaces, et notamment celle de fission Σ_f , et le terme source de fission $S_p^{(k)}$: il s'agit donc de déterminer dans un premier temps un nouveau flux $\phi^{(k+1)}$ et une nouvelle source de fission $S_p^{(k+1/2)}$, avec comme définie en 3.1.1.2, $S_p^{(k+1/2)} := \sum_g (\Sigma_f^g \phi_0^{g,(k+1)})$. À la fin de l'itération neutronique, on détermine alors trois coefficients $\alpha_0^{(k)}$, $\alpha_1^{(k)}$ et $\alpha_2^{(k)}$ qui servent à calculer une source de fission accélérée. C'est cette dernière qui sert de source initiale pour la prochaine itération neutronique. Celle-ci est donnée par $S_p^{(k+1)} = \alpha_0^{(k)} S_p^{(k+1/2)} + \alpha_1^{(k)} S_p^{(k)} + \alpha_2^{(k)} S_p^{(k-1)}$, avec $\alpha_0^{(k)} + \alpha_1^{(k)} + \alpha_2^{(k)} = 1$. La détermination de ces coefficients se fait par l'intermédiaire de 3 produits scalaires, $S_p^{(n+1/2)} \cdot S_p^{(n+1/2)}$, $S_p^{(n+1/2)} \cdot S_p^{(k)}$ et $S_p^{(k)} \cdot S_p^{(k)}$, puis de simples opérations sur des scalaires.

Le point fixe correspondant au problème SP_N est défini sur un vecteur constitué de la source de fission ainsi que des différentes composantes du flux, qu'on réunit en une grandeur ϕ pour simplifier les notations. L'appel au solveur SP_N de MINOS correspond donc à résoudre un problème du type :

$$f((S_p, \phi)) = (S_p, \phi).$$

Contrairement à ce qui est fait pour l'accélération de Chebyshev, il semble nécessaire, lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson, de maintenir la cohérence entre la source de fission et les composantes du flux. Cela est probablement dû à l'amplitude des coefficients d'Anderson par

rapport à ceux calculés avec Chebyshev, qui sont dans les faits toujours compris entre -1 et 3 , alors que ceux issus du problème de minimisation pour l'accélération d'Anderson peuvent avoir des amplitudes plus grandes. On observe ainsi parfois des coefficients avec deux ordres de grandeur en plus. Si on applique l'accélération d'Anderson simplement à la source, cela entraîne des incohérences dans le calcul du flux à l'itération externe suivante, aboutissant à un mauvais comportement de la méthode. Ce point est d'ailleurs constaté par QICHANG dans [SK22].

L'implémentation qui est faite de l'accélération d'Anderson dans le solveur SP_N de MINOS repose sur la résolution naïve du système constitué des équations (2.3.11), comme on l'a détaillé en section 2.3.4, et qu'on rappelle ici :

$$\forall i < m, \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j^{(n)} \Delta f_{ni} \cdot \Delta f_{nj} = f_n \cdot f_i, \quad (5.1.1)$$

avec $\forall i, j, \Delta f_{ij} := f_i - f_j$ et $f_i = f((S_p, \phi)^i) - (S_p, \phi)^i$. Il s'agit donc, à chaque itération neutronique n , de calculer :

1. les m différences Δf_{ni} pour $0 \leq i < m$;
2. les $m \times m$ produits scalaires $\Delta f_{ni} \cdot \Delta f_{nj}$;
3. d'inverser le système correspondant à (5.1.1) pour déterminer les $\alpha_j^{(n)}$ $0 \leq i < m$, et d'en déduire $\alpha_m^{(n)} = 1 - \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j^{(n)}$;
4. de calculer la nouvelle itérée accélérée donnée par :

$$(S_p, \phi)^{n+1} = \beta_n \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} f((S_p, \phi)^{n-m+i}) + (1 - \beta_n) \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} (S_p, \phi)^{n-m+i};$$

5. de mettre à jour la mémoire d'Anderson pour préparer l'itération suivante.

Dans la suite, on considère $\forall n, \beta_n = 1$, mais on a donné la possibilité d'introduire une relaxation dans l'implémentation proposée dans MINOS.

Finalement, notons qu'on considère ici une implémentation inspirée de celle mise en place pour l'accélération de Chebyshev : pour cette dernière, 10 itérations neutroniques libres sont effectuées avant que l'accélération ne soit déclenchée. On applique donc également cela pour Anderson. L'idée est bien ici de proposer une alternative à Chebyshev. L'accélération d'Anderson commence donc ici avec une mémoire complète, sauf si l'ordre choisi est supérieur à 10.

5.1.2 Validation de l'approche et mise en évidence de ses performances

La figure 5.1 compare la vitesse de convergence interne de MINOS en diffusion pour le mini-cœur et en SP_3 pour KAIST, pour 8 groupes d'énergie dans les deux cas. On y représente l'évolution de l'erreur sur la valeur propre, notée ERVP, et sur la source, ERS, au cours de la première itération multiphysique, ainsi la valeur du k_{eff} , pour chacun de ces deux cas d'étude, lorsque la méthode de la puissance itérée est accélérée respectivement avec Chebyshev ou avec Anderson. On teste également plusieurs ordres m pour l'accélération d'Anderson.

Lorsque l'accélération de Chebyshev est utilisée, on observe que c'est la convergence de la source de fission qui explique la convergence lente de MINOS alors que la valeur propre converge,

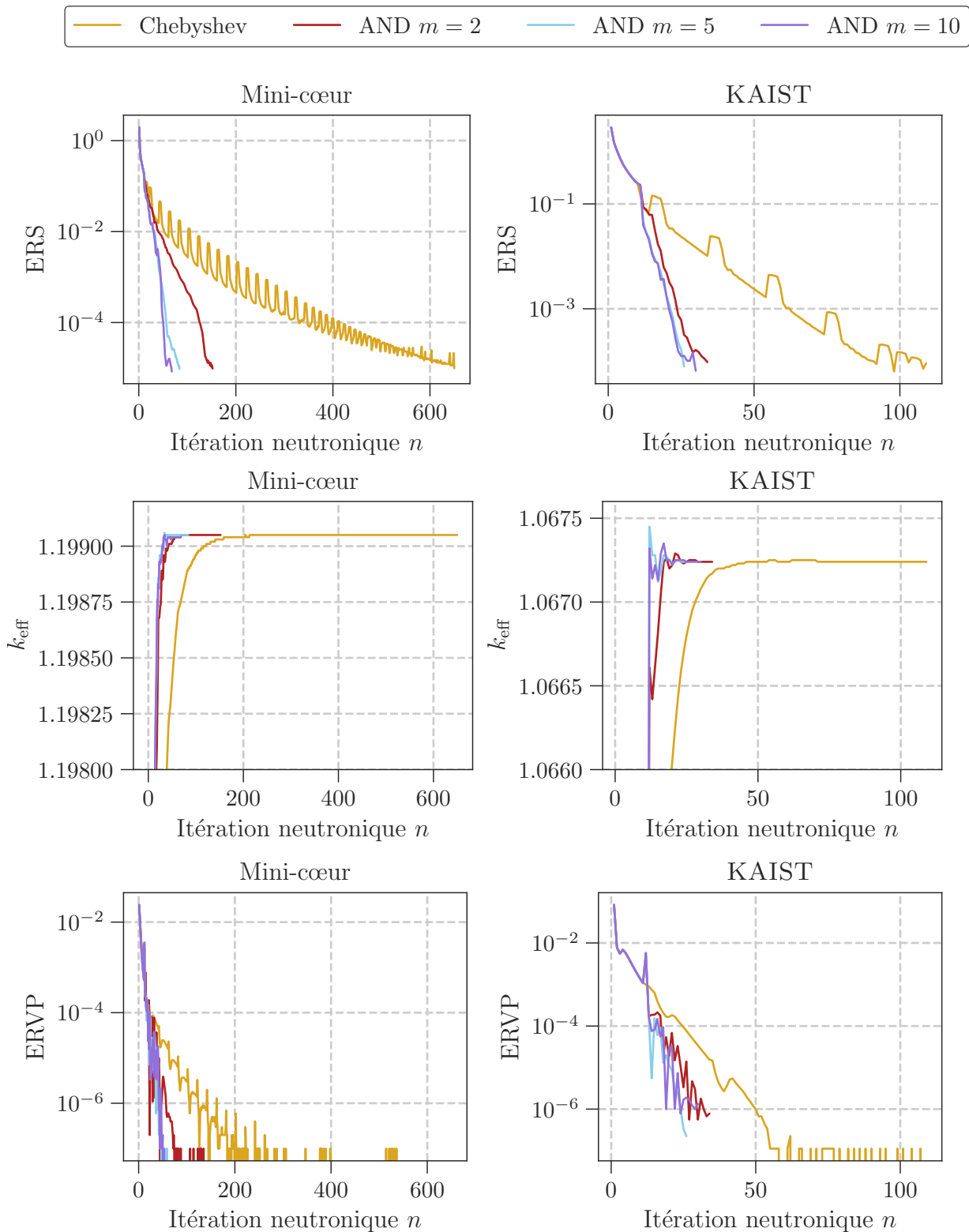


FIGURE 5.1 – Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, du k_{eff} et de l'erreur sur le k_{eff} , notée ERVP, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson à différents ordres comme méthode d'accélération pour la méthode de la puissance itérée, au cours de la première itération multiphysique.

Mini-cœur

Méthode d'accélération	Nombre d'itérations neutroniques	Temps total de calcul (en sec.)	Surcoût pour une itération de l'acc. d'Anderson (en sec.)
Chebyshev	650	1.0×10^3	-
Anderson $m = 2$	152	6.2×10^2	2.7
Anderson $m = 5$	84	5.8×10^2	6.1
Anderson $m = 10$	68	9.2×10^2	14

KAIST

Méthode d'accélération	Nombre d'itérations neutroniques	Temps total de calcul (en sec.)	Surcoût pour une itération de l'acc. d'Anderson (en sec.)
Chebyshev	109	1.1×10^3	-
Anderson $m = 2$	34	7.5×10^2	18
Anderson $m = 5$	26	1.1×10^3	47
Anderson $m = 10$	30	2.4×10^3	1.1×10^2

TABLEAU 5.1 – Évolution du temps de calcul pour faire converger MINOS en fonction de la méthode d'accélération utilisée dans le solveur SP_N , pour la première itération multiphysique

elle, au niveau de précision souhaitée en trois fois moins d'itérations neutroniques, en ordre de grandeur. L'aspect oscillant des erreurs pour Chebyshev est lié à l'implémentation de la méthode : une stratégie de *start and stop* est ainsi mise en place dans MINOS, permettant d'améliorer la vitesse de convergence globale. Même si pour le cas du mini-cœur, on a poussé le niveau de précision neutronique un ordre de grandeur plus bas que la précision par défaut de MINOS, on remarque que pour atteindre une erreur de 10^{-4} sur la source, on aurait malgré tout eu besoin de plus de 300 itérations neutroniques. À ce titre, l'apport de l'accélération d'Anderson est particulièrement intéressant : on observe une vitesse de convergence beaucoup plus rapide qu'avec l'accélération de Chebyshev, que ce soit pour l'erreur sur la valeur propre ou pour celle sur la source, et ce, pour les deux cas étudiés. Ainsi, dans le cas du mini-cœur, l'accélération d'Anderson avec $m = 2$ permet de faire converger le problème à valeur propre en 152 itérations, et en 84 pour $m = 5$ et 68 pour $m = 10$, contre 650 pour Chebyshev. Pour KAIST, on passe de 109 itérations avec Chebyshev à 34 itérations pour Anderson à l'ordre $m = 2$, 26 pour $m = 5$ et 30 pour $m = 10$. Comme observé dans la littérature, par exemple dans [CLM⁺21] ou [TKS⁺15], l'augmentation de l'ordre de la méthode d'Anderson permet d'améliorer la vitesse de convergence, mais l'amélioration de la vitesse est de moins en moins grande. Ainsi, on gagne plus en passant de $m = 2$ à $m = 5$ qu'en passant de $m = 5$ à $m = 10$. On n'a pas à implémenter de stratégie de *start and stop* avec l'accélération d'Anderson. On vérifie par ailleurs qu'on converge bien vers la même valeur de k_{eff} .

L'accélération d'Anderson présente en revanche un surcoût non négligeable par rapport à Chebyshev, du fait du grand nombre d'opérations à réaliser d'une part et de la taille des objets manipulés d'autre part. L'ensemble est résumé dans le tableau 5.1. Si pour le mini-cœur, pour lequel on rappelle qu'on utilise l'approximation SP_1 , l'accélération d'Anderson avec $m = 2$ ou $m = 5$ permet de gagner en temps de calcul, malgré le surcoût que cela représente par itération neutronique, pour KAIST, seul le cas $m = 2$ permet d'obtenir un gain de temps. On comprend que si on augmente encore l'ordre de la méthode SP_N ou bien le nombre de groupes d'énergie, le gain en termes de vitesse de convergence ne permettrait pas de compenser le surcoût que représente l'accélération d'Anderson, et ce même pour $m = 2$. Cela est essentiellement dû à la

taille des composantes des flux. On comprend l'intérêt de l'accélération de Chebyshev, qui n'a besoin que du terme source pour accélérer la convergence du problème neutronique. Il apparaît donc indispensable d'optimiser la manière dont on implémente l'accélération d'Anderson dans le solveur SP_N . La section suivante présente les optimisations que l'on a utilisées.

Bilan de la section : Dans cette section, on a mis en place l'accélération d'Anderson dans MINOS pour accélérer la convergence du problème à valeur propre issu de l'approximation SP_N . On a montré que cela permet en effet d'obtenir des vitesses de convergence beaucoup plus rapides, avec une réduction par plus de 5 dans le cas SP_1 et par 3 dans le cas SP_3 du nombre d'itérations neutroniques. Cependant, ce gain est contrebalancé par un surcoût en termes de temps de calcul par itération neutronique du fait de l'accélération d'Anderson. Ce surcoût se traduit par un temps de calcul dégradé si l'ordre d'Anderson est trop élevé pour nos deux cas d'étude, voire quel que soit l'ordre en fonction du nombre de groupes d'énergies et de l'ordre de la méthode SP_N . On doit donc dans la suite optimiser l'implémentation d'Anderson dans MINOS pour rendre son utilisation bénéfique en termes de temps de calcul.

5.2 Optimisation de l'implémentation de l'accélération d'Anderson

Dans cette section, on optimise l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans MINOS pour réduire le surcoût que représente le calcul d'une itérée accélérée. On cherche également à optimiser son utilisation : il s'agit de mettre en place une stratégie pour faire évoluer automatiquement l'ordre de l'accélération d'Anderson d'une part, et d'autre part, d'étudier l'influence de l'itération à partir de laquelle est déclenchée l'accélération. On cherche par là à gagner en vitesse de convergence et à limiter le surcoût en termes de temps de calcul.

5.2.1 Prise en compte de la linéarité entre la source et le flux dans l'accélération d'Anderson

On a expliqué en section 5.1.1 l'importance de maintenir la cohérence entre la source de fission et les différentes composantes du flux. Appliquer simplement l'accélération d'Anderson à la source, comme cela est fait pour l'accélération de Chebyshev, dégrade en effet la convergence de la méthode. Cela est illustré pour le cas du problème 1A de KAIST figure 5.2. On observe ainsi que dans ce cas, l'accélération d'Anderson n'apporte aucune accélération particulière et ralentit même la convergence de la neutronique.

Malgré tout, si on analyse l'évolution du temps passé dans chacune des étapes de l'accélération d'Anderson au cours de l'appel à MINOS, qu'on a détaillées en section 5.1.1, on se rend compte que la taille du vecteur constitué par la source et les composantes du flux joue un rôle prépondérant dans le surcoût associé à la mise en place de l'accélération d'Anderson. Ces temps sont donnés, pour la première itération multiphysique et pour le cas de KAIST, figure 5.3. Ainsi, l'étape 1, qui correspond simplement à des différences entre vecteurs, apporte pour $m = 5$ un surcoût de 10 secondes par exemple en moyenne, tandis que les étapes de calcul des produits scalaires $\Delta f_{ni} \cdot \Delta f_{nj}$ ainsi que la résolution du système durent 15 secondes chacune environ et qu'ensuite la mise à jour de la mémoire d'Anderson et le calcul de la nouvelle itérée accélérée comptent pour 5 secondes environ. Le coût d'une itération d'Anderson est donc au total de 45 secondes. Remarquons que,

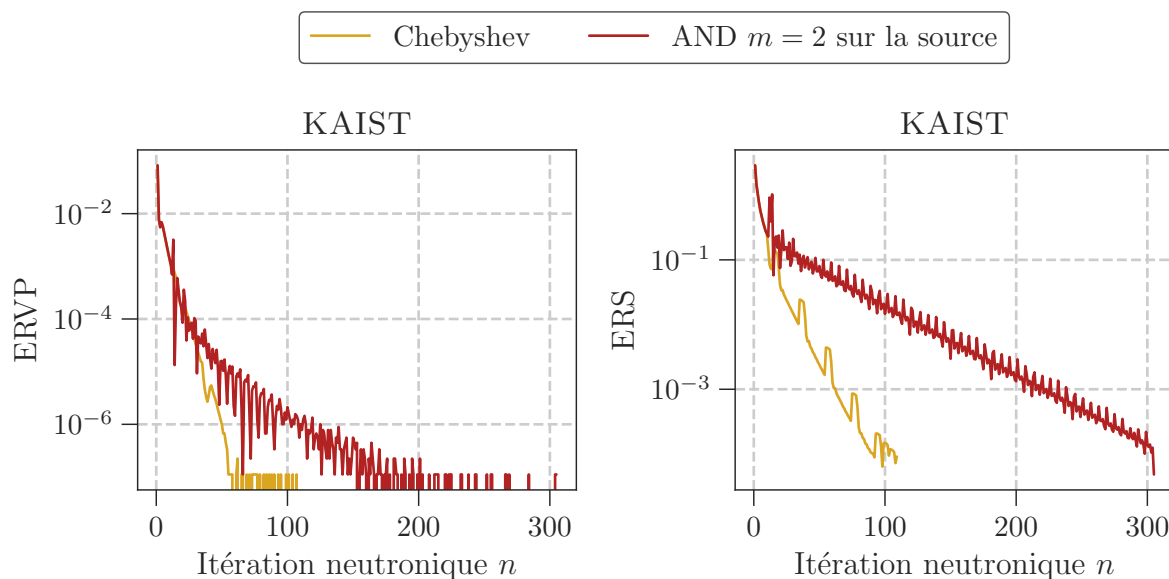


FIGURE 5.2 – Évolution de l'erreur sur le k_{eff} et de l'erreur sur la source au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson $m = 2$ appliquées au terme source de fission seulement.

toujours pour le cas $m = 5$, on avait annoncé un surcoût de 47 secondes en moyenne, dans le tableau 5.1 : c'est parce qu'il faut également prendre en compte le temps passé à initialiser la mémoire d'Anderson à l'appel du solveur, d'où cette différence en apparence. Notons également qu'il n'y a représenté ici que 15 itérations neutroniques pour le cas $m = 5$ de KAIST par exemple : c'est lié au fait que les 10 premières itérations sont libres, comme souligné en section 5.1.1, et que l'accélération est donc lancée à la 11-ième itération d'une part, et que d'autre part, la dernière itération n'entraîne pas d'appel à Anderson, puisqu'on a convergé. Ces remarques sont également vraies bien sûr pour $m = 2$ et $m = 10$.

Cette observation nous pousse à réduire la taille du vecteur (S_p, ϕ) que l'on accélère initialement. Pour cela, on tire parti du lien de linéarité qui existe entre la source de fission et le flux neutronique et du fait qu'Anderson aboutisse à une combinaison linéaire des m dernières itérations. De ce fait, ce lien de linéarité est conservé si on applique la même combinaison linéaire à la source de fission d'une part et au flux neutronique d'autre part. On peut donc maintenir la cohérence entre la source et le flux en appliquant l'accélération d'Anderson à la source seule dans un premier temps, ce qui nous permet d'obtenir une source de fission accélérée. Puis, dans un second temps, on peut appliquer la même combinaison linéaire aux différentes composantes du flux neutronique, ce qui nous permet d'avoir un nouveau flux correspondant à la source accélérée. Il s'agit donc de calculer :

$$S^{n+1} = \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} f(S^{n-m+i}),$$

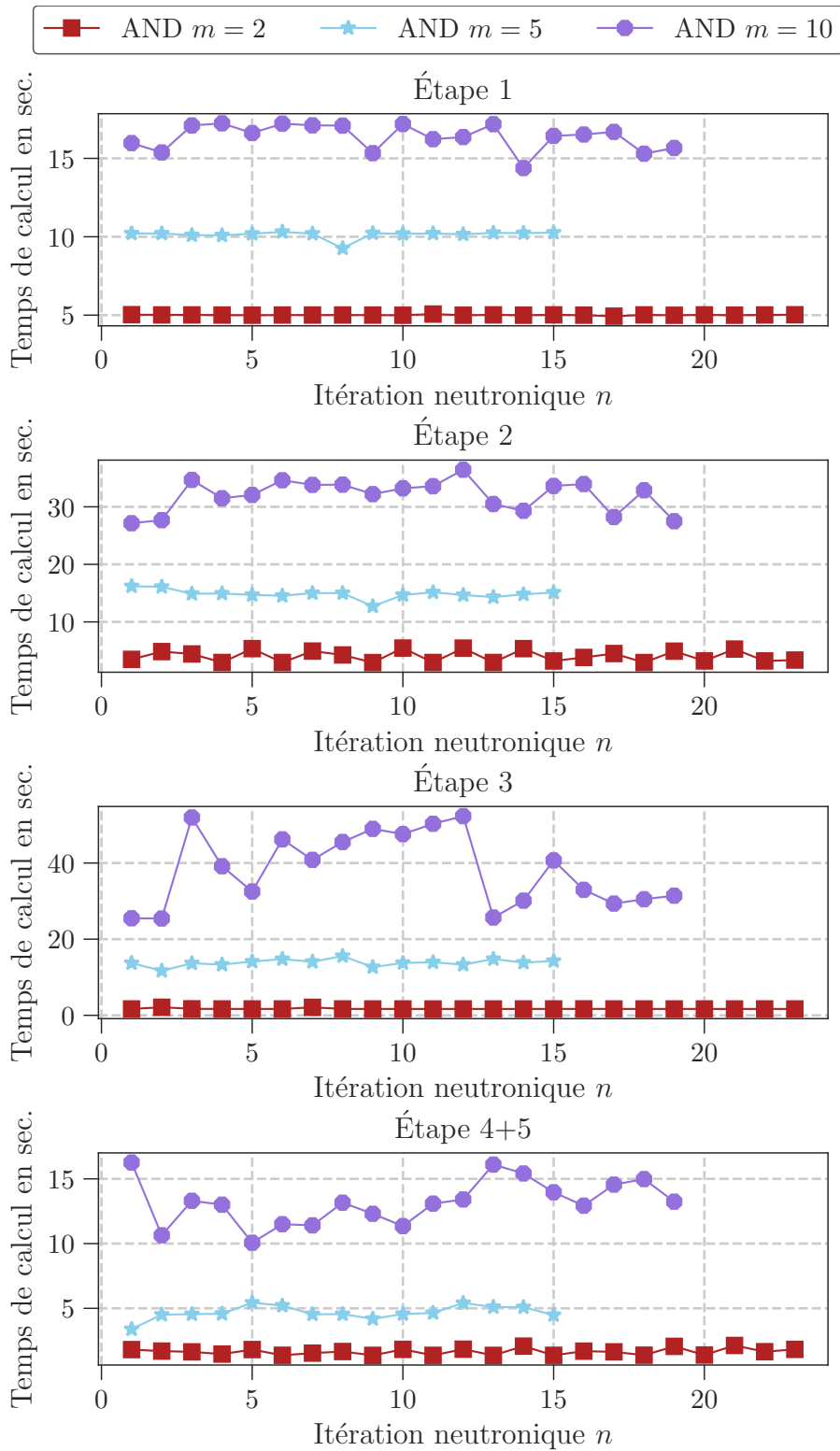


FIGURE 5.3 – Évolution du temps passé pour la première itération multiphysique du problème 1A de KAIST dans chacune des étapes d'Anderson dans MINOS - l'étape 1 correspond au calcul des Δf_{ni} , l'étape 2 au calcul des produits scalaires $\Delta f_{ni} \cdot \Delta f_{nj}$, l'étape 3 à la détermination des coefficients d'Anderson et l'étape 4+5 au calcul de l'itérée accélérée et à la mise à jour de la mémoire de l'algorithme.

avec les $(\alpha_i^{(n)})_{i=0,\dots,m}$ minimisant $\left\| \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} (f(S^{n-m+i}) - S^{n-m+i}) \right\|_2$ sous la contrainte $\sum_{i=0}^m \alpha_i = 1$, puis de calculer le flux neutronique correspondant :

$$\phi^{n+1} = \sum_{i=0}^m \alpha_i^{(n)} f(\phi^{n-m+i}).$$

Cela implique donc malgré tout de conserver en mémoire les composantes des m derniers flux. On ne gagne donc pas en termes de temps de calcul sur les étapes 4 et 5, mais on s'attend à un gain non négligeable sur les étapes 1, 2 et 3, qui sont les plus coûteuses. Cette stratégie a été implémentée dans MINOS. On parle dans la suite d'accélération d'Anderson appliquée au vecteur complet pour l'implémentation initiale, dont les caractéristiques en termes de temps de calcul et de vitesse de convergence viennent d'être discutées. Par opposition, on parle d'accélération d'Anderson appliquée à la source et répercutée sur le flux ou plus simplement d'accélération d'Anderson appliquée à la source, étant entendu qu'on a montré avec la figure 5.2 que si l'on économise l'étape permettant de déterminer un flux cohérent avec la source accélérée, cette approche n'est pas concluante.

On s'intéresse dans la suite aux performances de cette approche et à son optimisation.

5.2.2 Performance de l'accélération d'Anderson appliquée à la source et répercutée sur le flux

On donne figure 5.4 l'évolution des erreurs sur la source et sur le k_{eff} ainsi que l'évolution du k_{eff} pour la première itération multiphysique du mini-cœur et de KAIST et pour les deux implémentations d'Anderson, sur le vecteur complet et sur la source, ainsi que pour l'accélération de Chebyshev. Il s'agit en effet dans un premier temps de vérifier que l'accélération de la source suivie de la mise en cohérence du flux neutronique permet d'aboutir à la bonne solution.

Le problème d'optimisation étant modifié par le changement de vecteur accéléré, cela explique que les courbes correspondantes à un même ordre m ne sont pas superposées pour les différentes approches utilisées pour appliquer l'accélération d'Anderson. En revanche, on observe qu'on ne dégrade pas la vitesse de convergence en n'appliquant l'accélération qu'à la source de fission, pour ensuite la répercuter sur le flux. On vérifie également qu'on converge vers la même valeur de k_{eff} . En termes de temps de calcul et de surcoûts liés à cette implémentation d'Anderson, les résultats sont donnés tableau 5.2, pour l'accélération d'Anderson appliquée à la source puis répercutée sur le flux, qu'il convient donc de comparer au tableau 5.1. On observe ainsi que pour le mini-cœur et l'utilisation de l'approximation SP_1 , on a réduit d'un facteur 4 à 7 le surcoût associé à l'application de l'accélération d'Anderson en appliquant la stratégie décrite au paragraphe précédent. Pour KAIST et l'approximation SP_3 , cela permet de diviser le surcoût par 3 à 7. En termes de temps de calcul, cela rend désormais utilisable des valeurs de m plus élevées : ainsi, le cas $m = 10$ est désormais le cas présentant la vitesse de convergence maximale ainsi que le temps de calcul minimal. Par rapport au cas avec Chebyshev, on divise alors le temps de calcul par plus de 5.

Si on s'intéresse maintenant à la répartition du temps de calcul associé à l'accélération d'Anderson lorsqu'on l'applique sur la source, donnée figure 5.5 pour KAIST, on se rend compte qu'on a effectivement réussi à contrôler le temps correspondant aux trois premières étapes et à le rendre acceptable, avec un surcoût associé de l'ordre d'une à deux secondes selon l'ordre m

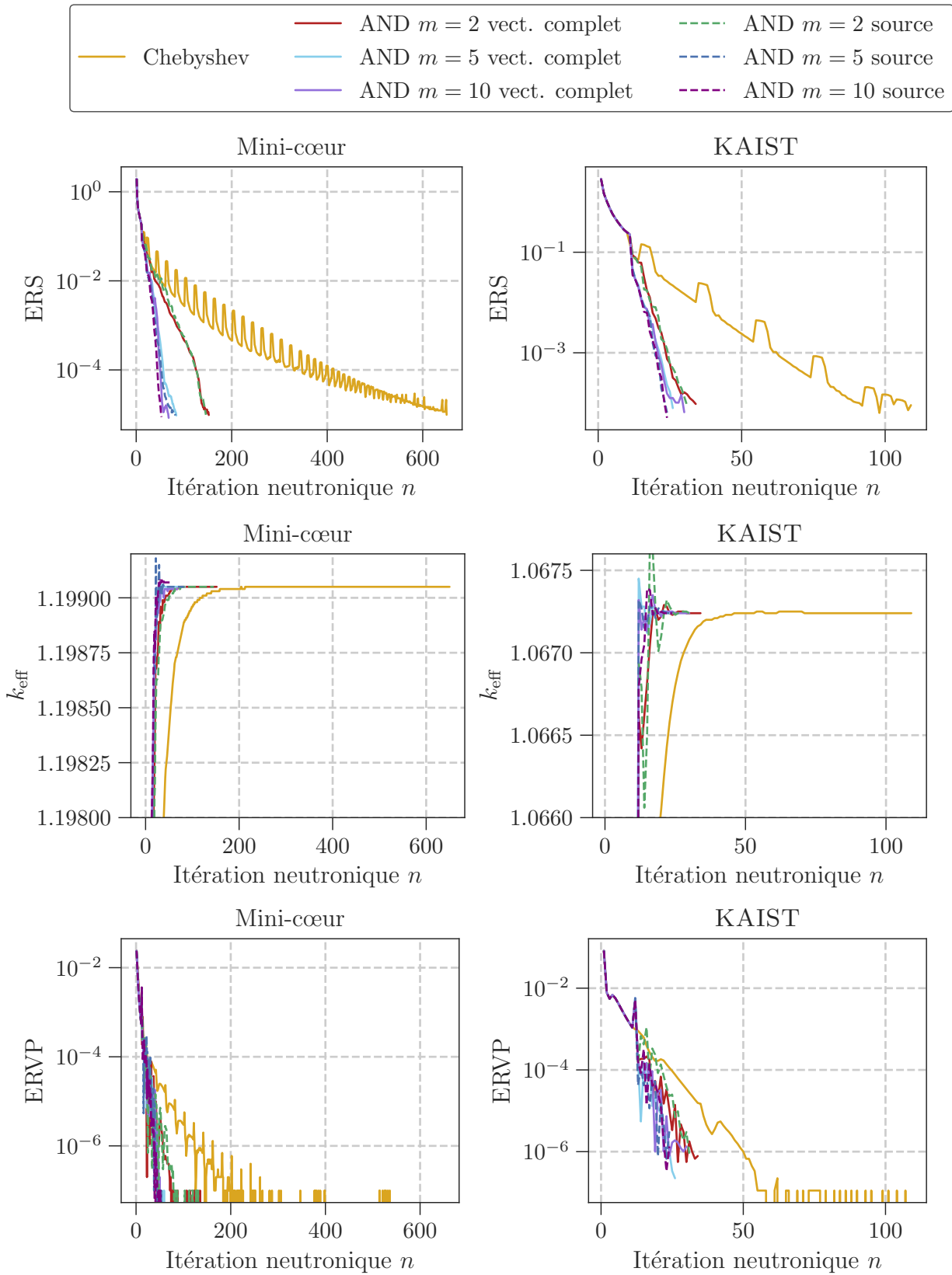


FIGURE 5.4 – Évolution de l’erreur sur la source, notée ERS, du k_{eff} et de l’erreur sur le k_{eff} , notée ERVP, au cours d’un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson, appliquée sur le vecteur complet ou sur la source, comme méthode d’accélération pour la méthode de la puissance itérée, au cours de la première itération multiphysique.

Mini-cœur

Anderson appliquée à la source puis répercuté au flux	Nombre d'itérations neutroniques	Temps total de calcul (en sec.)	Surcoût pour une itération de l'acc. d'Anderson (en sec.)
Anderson $m = 2$	146	3.2×10^2	0.64
Anderson $m = 5$	82	2.1×10^2	1.1
Anderson $m = 10$	53	1.8×10^2	2.1

KAIST

Anderson appliquée à la source puis répercuté au flux	Nombre d'itérations neutroniques	Temps total de calcul (en sec.)	Surcoût pour une itération de l'acc. d'Anderson (en sec.)
Anderson $m = 2$	31	5.5×10^2	6.5
Anderson $m = 5$	24	5.1×10^2	11
Anderson $m = 10$	24	5.7×10^2	16

TABLEAU 5.2 – Évolution du temps de calcul pour faire converger MINOS lorsque l'accélération d'Anderson est appliquée à la source puis répercutée sur le flux.

considéré. La majorité du coût en termes de temps de calcul est dorénavant portée par la mise à jour de la mémoire et le calcul de la nouvelle itérée accélérée d'une part, et par l'initialisation de la méthode, qui n'apparaît pas ici, mais qui représente par exemple 46 secondes pour le cas $m = 10$ pour KAIST, sur un temps de calcul total de 5.7×10^2 secondes, soit 8%.

5.2.3 Choix retenus dans l'implémentation d'Anderson

L'approche naïve de résolution, donnée en (2.3.11), a été implémentée ici. Si l'approche proposée par WALKER, utilisée par ailleurs pour les couplages en boîtes noires étudiés au chapitre 4 et détaillée dans [Wal11], est en général plus efficace, elle ne permettrait pas ici de gagner du temps sur les étapes les plus chronophages, identifiées au paragraphe précédent. Le gain potentiel d'un changement de méthode de résolution semble donc ici faible. On considère l'implémentation obtenue comme satisfaisante dans le cadre de cette thèse. Malgré tout, des possibilités d'amélioration existent : on peut par exemple imaginer que la mémoire associée à l'accélération d'Anderson devienne persistante, ce qui économiserait le temps d'allocation et d'initialisation de la mémoire à chaque appel qui semble ici non négligeable.

On cherche dans la suite à optimiser l'utilisation de l'accélération d'Anderson comme méthode d'accélération pour MINOS. On n'étudie plus que la version pour laquelle Anderson est appliquée dans un premier temps à la source, puis répercutée sur le flux, puisqu'on vient de montrer qu'elle permettait de réduire significativement le surcoût en termes de temps de calcul.

5.2.4 Optimisation de la stratégie de lancement

On a jusqu'ici implémenté l'accélération d'Anderson comme un substitut à l'accélération de Chebyshev telle qu'elle est présente dans MINOS : les 10 premières itérations neutroniques étaient alors libres et servaient à remplir la mémoire d'Anderson, qui était déclenchée à la 11-ième itération. Ici, on cherche à déterminer si un lancement plus précoce de l'accélération d'Anderson permet

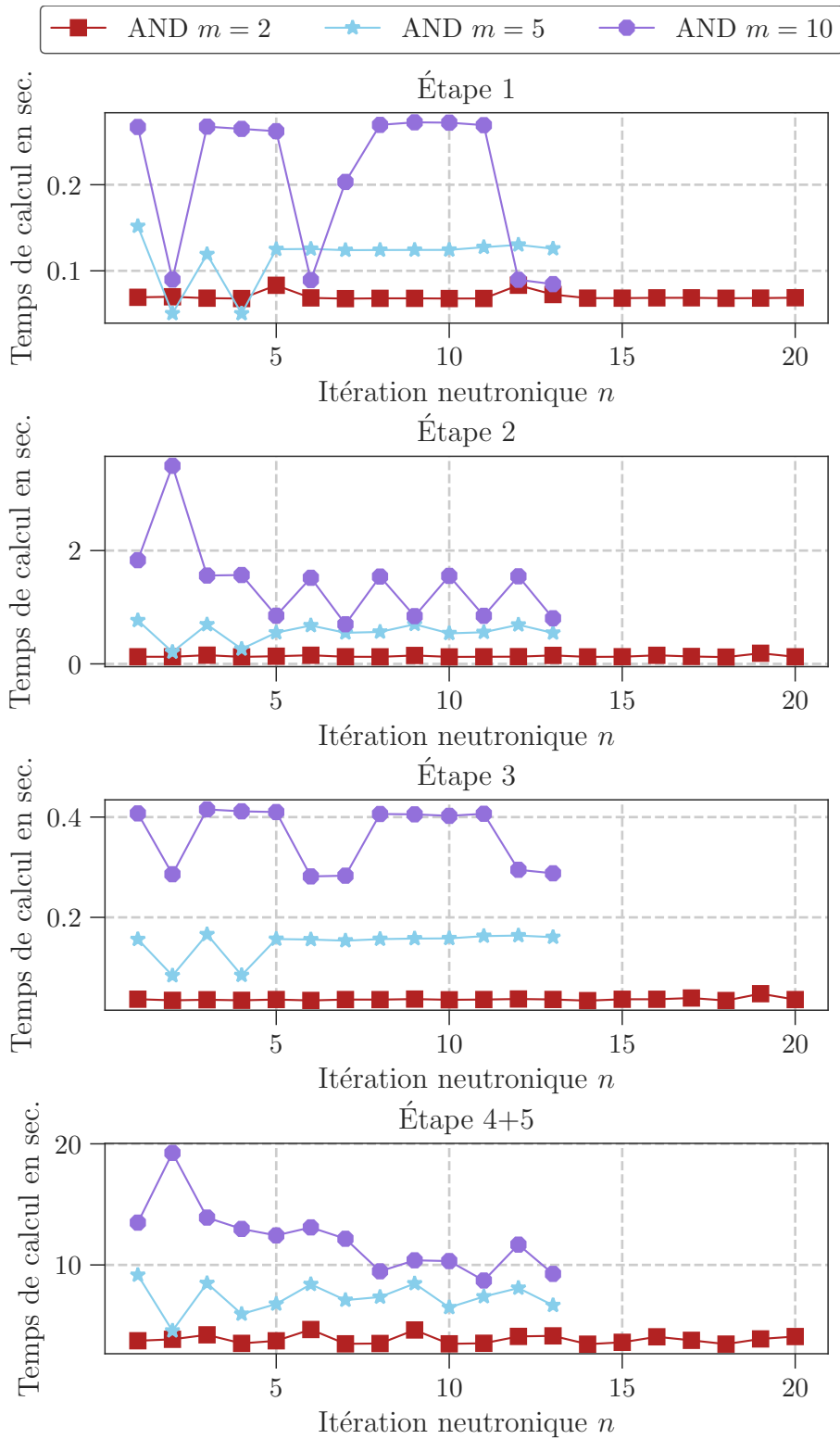


FIGURE 5.5 – Évolution du temps passé pour la première itération multiphysique du problème 1A de KAIST dans chacune des étapes d'Anderson appliquée à la source dans MINOS - l'étape 1 correspond au calcul des Δf_{ni} , l'étape 2 au calcul des produits scalaires $\Delta f_{ni} \cdot \Delta f_{nj}$, l'étape 3 à la détermination des coefficients d'Anderson et l'étape 4+5 au calcul de l'itérée accélérée et à la mise à jour de la mémoire de l'algorithme.

d'améliorer ses performances en termes de temps de calcul et de vitesse de convergence. On cherche également dans un second temps à mettre en place une stratégie permettant de faire évoluer automatiquement l'ordre de la méthode.

5.2.4.1 Intérêt du lancement rapide de l'accélération

L'objectif de ce paragraphe est de déterminer la stratégie de lancement la plus efficace pour l'accélération d'Anderson, en termes de temps de calcul et de vitesse de convergence. Pour cela, on calcule la première itérée accélérée directement à partir de la 2-ième ou de la 5-ième itération, avec une mémoire se remplissant donc potentiellement au fur et à mesure, et on compare les vitesses de convergence obtenues avec les résultats qu'on a eus jusqu'ici. On donne figure 5.6 l'évolution de l'erreur sur la source pour ces différentes stratégies : on a en effet vu que c'était cette erreur qui conditionne la vitesse de convergence du problème à valeur propre dans MINOS. On observe que déclencher plus tôt l'accélération d'Anderson n'accélère pas la vitesse de convergence du calcul, voire la dégrade pour KAIST avec $m = 2$ ou encore pour le mini-cœur à l'ordre 5. Le fait de faire converger pendant 10 itérations le solveur SP_N avant d'enclencher l'accélération d'Anderson, comme c'était le cas avec Chebyshev, semble donc une manière efficace d'implémenter cette accélération, permettant d'accélérer plus systématiquement la convergence : cela permet ainsi d'avoir une mémoire constituée de termes sources plus pertinents. De plus, en termes de temps de calcul, on économise le surcoût associé à cette dizaine d'itérations supplémentaires. Dans le cadre d'un unique appel à MINOS, il semble donc pertinent de conserver cette stratégie de lancement dans la suite.

5.2.4.2 Stratégie d'évolution automatique de l'ordre m de l'accélération d'Anderson

L'idée de ce paragraphe est d'implémenter une stratégie d'évolution de l'ordre m de l'accélération d'Anderson au cours de la résolution du problème à valeur propre dans MINOS qui s'inspire des remarques faites notamment par POLLOCK et REBHOLZ dans [PR21]. L'idée est que, loin de la solution, il peut être efficace de limiter la taille de la mémoire pour ne pas qu'une ancienne itérée, *a priori* très éloignée de la solution finale, ne soit prise en compte pendant un grand nombre d'itérations neutroniques. À l'inverse, proche de la solution, on peut se permettre d'augmenter la taille de la mémoire pour accélérer la vitesse de convergence, sans craindre de dégrader la qualité de la nouvelle itérée accélérée. POLLOCK et REBHOLZ proposent de maintenir un ordre faible pour des erreurs en $O(1)$, puis de l'augmenter lorsqu'on atteint des erreurs en $O(10^{-2})$ ou $O(10^{-3})$. Le terme *erreur*, pour une itération n , renvoie dans ce contexte à $\|f(S^n) - S^n\|_2$, c'est-à-dire à l'écart entre la nouvelle source de fission calculée suite à une itération neutronique n et celle ayant servi à l'initialisation de cette même itération. On choisit pour notre part de prendre $m = 5$ tant que $\|f(S^n) - S^n\|_2 > O(10^{-2})$ puis de retenir ensuite $m = 10$. Dans l'implémentation qui est proposée, on constitue dès le départ une mémoire de taille correspondante à $m = 10$. Lorsqu'on atteint $\|f(S^n) - S^n\|_2 < O(10^{-2})$, on est donc en mesure d'utiliser directement l'accélération à l'ordre $m = 10$, sans avoir à augmenter progressivement la taille de la mémoire de l'algorithme. Les résultats sont donnés figure 5.7. Pour information, on compare également l'influence de l'itération à partir de laquelle est déclenchée l'accélération d'Anderson.

On observe ici aussi qu'il s'avère plus intéressant en termes de vitesse de convergence de faire démarrer l'accélération d'Anderson avec une mémoire complète, après 10 itérations neutroniques. Par ailleurs, il semble que proposer une stratégie d'adaptation de l'ordre n'apporte ici pas de gain en termes de vitesse de convergence, en comparaison avec un ordre constant fixé à $m = 10$.

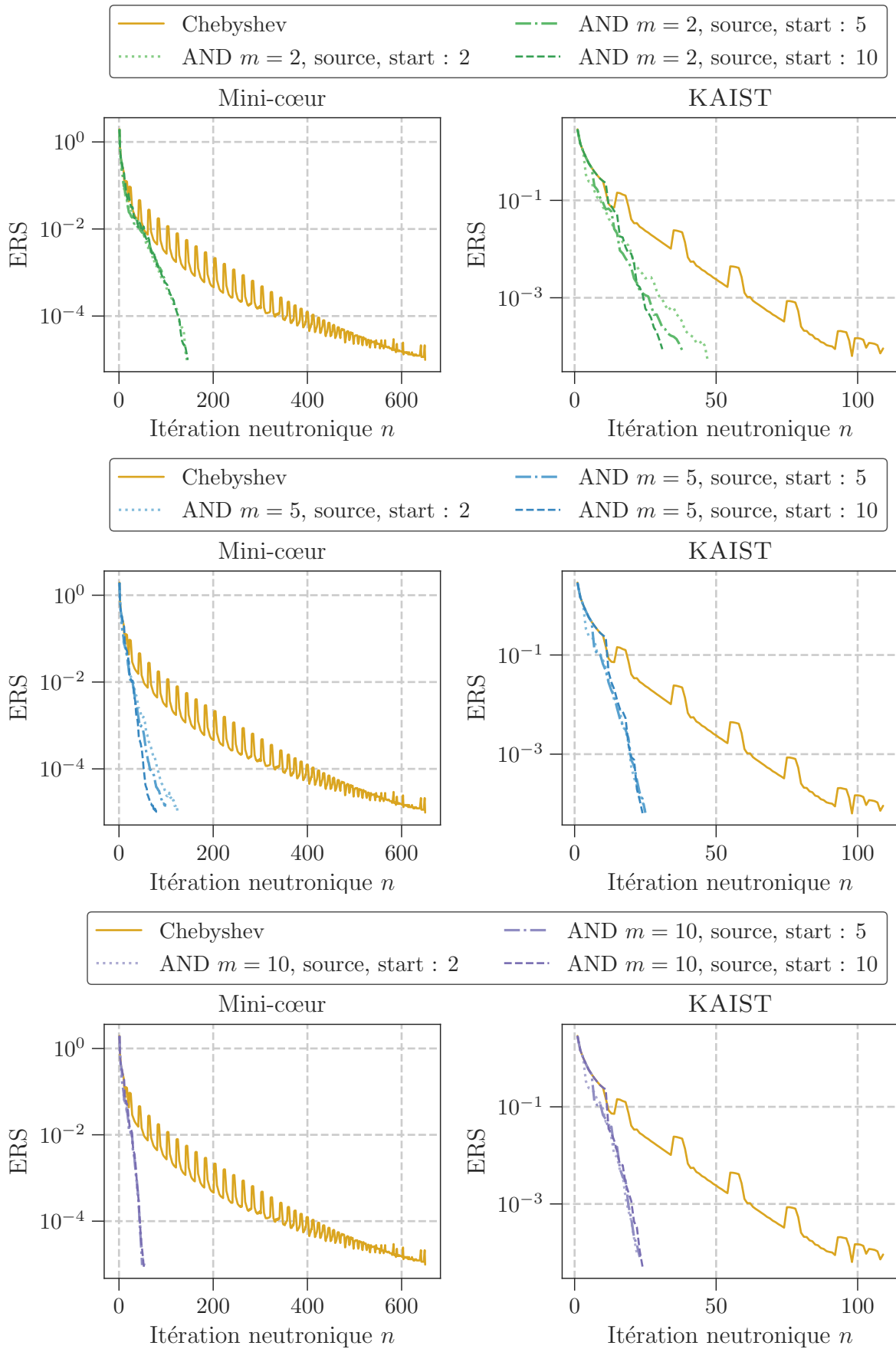


FIGURE 5.6 – Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson, appliquée à la source, à l'ordre 2, 5 et 10 et en fonction de l'itération à partir de laquelle Anderson est utilisée.

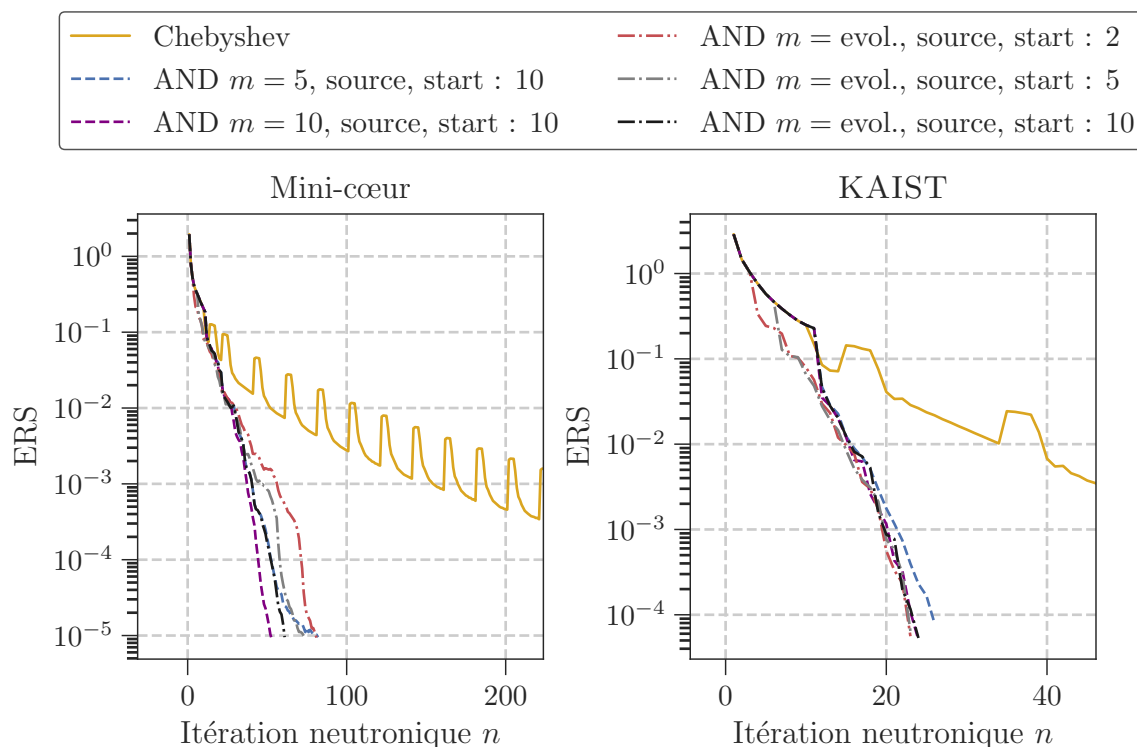


FIGURE 5.7 – Évolution de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours d'un appel à MINOS, avec Chebyshev ou Anderson, appliquée à la source et avec un ordre m évoluant, en fonction de l'itération à partir de laquelle Anderson est utilisée - on a zoomé sur les premières itérations neutroniques.

Cette stratégie peut malgré tout permettre de limiter le surcoût par itération neutronique associé à l'accélération d'Anderson durant les premières itérations, pour lesquelles l'ordre est maintenu à 5. À ce titre, on peut imaginer des stratégies d'évolution plus fine, pour lesquelles on aurait par exemple $m = 2$ pour $\|f(S^n) - S^n\|_2 > O(10^{-1})$, $m = 5$ ensuite tant que $\|f(S^n) - S^n\|_2 > O(10^{-3})$ et $m = 10$ enfin. Dans le cadre de cette thèse, on a par exemple traité une stratégie d'évolution de l'ordre avec $m = 2$ puis 5 puis 10 et des sauts fixes pour des erreurs à $O(1)$ et $O(10^{-2})$ qui n'a pas apportée d'avantages notables en termes de vitesse de convergence ni de temps de calcul, l'ordre passant *quasi* immédiatement à $m = 5$.

5.2.5 Impact mémoire de l'accélération d'Anderson

L'implémentation actuellement retenue a un coût en mémoire non négligeable. En effet, si on note N_c le nombre total de mailles correspondant à un cas d'étude donné, il s'agissait avec Chebyshev de stocker en mémoire les trois dernières itérées du terme source de fissions, soit un coût de $3 \times N_c$. Avec l'accélération d'Anderson, on doit être en mesure de calculer les $m + 1$ derniers résidus définis par $f(S^k) - S^k$ et de préparer l'itérée suivante. On se retrouve à stocker $2 \times (m + 2) \times N_c$ termes sources, ainsi que $2 \times (m + 2) \times N_c$ composantes du flux. Si on note G le nombre de groupes d'énergie et H l'ordre de la méthode SP_N , cela constitue $2 \times (m + 2) \times G \times H \times N_c$ composants chacun pour le flux pair et les termes de fuite ainsi que $6 \times (m + 2) \times G \times H \times N_c$ pour le flux impair, qui est vectoriel. En tout, on a donc à stocker $((10 \times G \times H + 2)(m + 2))N_c$ float, avec

l'implémentation qu'on a proposée dans le cadre de cette thèse, contre $3 \times N_c$ avec Chebyshev. On comprend que le surcoût en mémoire n'est pas négligeable, lorsqu'on traite comme ici un problème avec une description à l'échelle cellule, c'est-à-dire un problème dans lequel le maillage correspond à l'échelle crayon. L'optimisation de l'implémentation est donc incontournable si l'on souhaite intégrer cette méthode à MINOS à l'avenir.

Bilan de la section : Dans cette section, on a réussi à tirer parti de la linéarité entre la source de fission et les composantes du flux pour réduire le surcoût associé à l'accélération d'Anderson. L'idée est d'appliquer l'accélération d'Anderson sur le terme source uniquement, pour limiter le temps de calcul associé à la construction et à la résolution du problème d'optimisation, nécessaire à la détermination des coefficients d'Anderson. On répercute ensuite ces coefficients sur le flux neutronique, pour maintenir la cohérence entre source de fission et flux neutronique à la prochaine itération neutronique. Après avoir validé cette approche et mis en évidence le gain en termes de temps de calcul qu'elle permet, on a cherché à optimiser la stratégie de lancement de l'accélération ainsi que son ordre. On a montré l'intérêt de conserver l'approche développée pour l'accélération de Chebyshev, qui implique d'effectuer 10 itérations libres avant d'enclencher l'accélération d'Anderson. Concernant l'ordre de la méthode, la possibilité de faire évoluer m en fonction de l'erreur $f(S^m) - S^m$ au cours du calcul SP_N a été explorée. On en a conclu que le gain était limité en termes de temps de calcul, et que cela pouvait dégrader légèrement le temps de calcul. On a finalement souligné le coût mémoire de l'implémentation telle qu'actuellement proposée. Dans la section suivante, on étudie la manière dont utiliser l'accélération d'Anderson dans MINOS modifie les résultats qu'on a obtenus au chapitre 4, consacré au couplage en boîtes noires.

5.3 Impact d'une convergence accélérée de Minos sur les performances des couplages en boîtes noires

L'objectif de cette section est de mettre en évidence l'importance d'une convergence rapide des solveurs monophysiques dans le cadre des couplages. On cherche ainsi à étudier l'impact qu'a l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS sur les couplages en boîtes noires avec convergence fine des solveurs. En effet, on a vu au chapitre 4 que c'est le grand nombre d'itérations neutroniques à effectuer qui impose de mettre en place de la convergence partielle ou des méthodes comme celle du *Dynamic Residual Balance*, qui permettent de contrôler la sur-résolution entre les solveurs *via* le calcul de nouvelles précisions demandées au solveur au cours du couplage.

5.3.1 Performance des couplages avec convergence fine

On cherche ici à déterminer si l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans MINOS à la place de celle de Chebyshev permet de réaliser des couplages en boîtes noires avec un temps de calcul total compétitif par rapport aux méthodes mises en évidence au chapitre 4, c'est-à-dire la méthode de Gauss-Seidel avec niveau de convergence partielle et facteur de relaxation optimisés et les méthodes de l'*Adaptive Residual Balance* et du *Dynamic Residual Balance*. Notons que, dans le cas de couplage avec convergence fine, que ce soit avec la méthode de Gauss-Seidel, celle de la sécante ou l'application d'Anderson sur la nappe de puissance, l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS ne change rien d'un point de vue multiphysique, puisqu'on converge toujours à l'appel du solveur neutronique vers la même solution que dans le cas avec Chebyshev.

On sait donc d'ores et déjà que le facteur de relaxation optimal, pour la méthode de Gauss-Seidel, sera proche $\alpha = 0.5$ pour le mini-cœur et de $\alpha = 0.7$ pour KAIST. Ce n'est plus vrai lorsqu'on utilise de la convergence partielle bien sûr.

On donne tableau 5.3 les principaux résultats pour le mini-cœur, en termes de temps de calcul, nombre d'itérations neutroniques et nombre de pas de temps thermohydrauliques, en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne retenue pour MINOS. Le tableau 5.4 présente les mêmes résultats pour KAIST. On remarque pour les deux cas d'étude que l'utilisation d'une méthode d'accélération plus performante dans MINOS pour résoudre le problème neutronique permet de diviser par un facteur 2 à 3 le temps de calcul total par rapport au couplage équivalent, lorsque Chebyshev est utilisée pour MINOS. Lorsqu'on utilise en plus la méthode de la sécante ou l'accélération d'Anderson sur la nappe de puissance, pour accélérer le couplage multiphysique, on améliore encore légèrement le temps de calcul total. Comme précédemment, on remarque qu'augmenter l'ordre de la méthode d'Anderson interne à MINOS permet de gagner en nombre d'itérations neutroniques, mais qu'il faut trouver un compromis entre le surcoût associé à cette accélération interne et la vitesse de convergence du problème neutronique. Ainsi, pour le mini-cœur avec convergence fine et avec $m = 10$ pour l'accélération interne à MINOS et $m = 5$ pour l'accélération multiphysique, on arrive à atteindre le nombre total d'itérations neutroniques obtenu avec l'optimisation du niveau de convergence partielle pour Gauss-Seidel et l'utilisation de Chebyshev (donné tableau 4.1). Pour KAIST, on se rapproche du cas optimisé en termes de nombre d'itérations neutroniques total pour $m = 2$ et on le réduit pour $m = 5$ et $m = 10$, par rapport au meilleur cas déterminé 4 (également donné tableau 4.1).

On remarque également que le nombre de pas de temps effectués par THEDI varie en fonction de la méthode d'accélération interne choisie pour MINOS, lorsqu'on considère la même méthode de couplage multiphysique : c'est inattendu, puisqu'on a précisé à la section précédente qu'on convergeait vers la même solution neutronique, *a priori*. Dans les faits, le flux multigroupes final n'est pas exactement identique selon la méthode d'accélération qu'on retient pour MINOS. Cela se répercute donc sur la nappe de puissance calculée, et donc sur le solveur thermohydraulique.

Il convient donc de vérifier qu'on converge malgré tout bien vers la même nappe de puissance finale, d'un point de vue multiphysique. Pour s'assurer de cela, on considère le couplage avec la méthode de Gauss-Seidel, avec convergence fine des solveurs et facteur de relaxation α optimisé comme résultat de référence pour chaque cas d'étude. On calcule alors l'erreur relative entre une stratégie \mathcal{S} , caractérisée par le choix d'une méthode de couplage et d'une accélération interne à MINOS, et la référence, donnée par :

$$\mathcal{E}_{\mathcal{S}} := \frac{\|P_{\mathcal{S}}^{\text{finale}} - P_{\text{ref.}}^{\text{finale}}\|_2}{\|P_{\text{ref.}}^{\text{finale}}\|_2}.$$

On peut également s'intéresser à l'erreur relative locale qu'on définit pour un élément \mathcal{M} du maillage par :

$$\mathcal{E}_{\mathcal{S}}(\mathcal{M}) := \frac{|P_{\mathcal{S}}^{\text{finale}}(\mathcal{M}) - P_{\text{ref.}}^{\text{finale}}(\mathcal{M})|}{|P_{\text{ref.}}^{\text{finale}}(\mathcal{M})|}.$$

Il s'agit alors de déterminer l'erreur locale moyenne $\overline{\mathcal{E}_{\mathcal{S}}}$ ainsi que l'erreur relative locale maximale $\max(\mathcal{E}_{\mathcal{S}})$. Si l'on considère par exemple pour le mini-cœur par exemple :

Mini-cœur

MINOS accéléré avec Chebyshev				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.5$	3151	8982	10	5.5×10^3
Méthode de la sécante	3776	8550	8	6.0×10^3
Anderson $m = 5, \alpha = 1$	3768	7981	7	6.8×10^3

MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, $m = 2$, start : 10				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.5$	730	9008	10	2.6×10^3
Méthode de la sécante	848	8663	8	2.8×10^3
Anderson $m = 5, \alpha = 1$	780	7764	7	2.9×10^3

MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, $m = 5$, start : 10				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.5$	495	9005	10	2.2×10^3
Méthode de la sécante	457	8576	8	2.0×10^3
Anderson $m = 5, \alpha = 1$	429	7711	7	2.0×10^3

MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, $m = 10$, start : 10				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.5$	357	8998	10	2.1×10^3
Méthode de la sécante	334	8550	8	2.1×10^3
Anderson $m = 5, \alpha = 1$	307	7821	7	1.8×10^3

TABLEAU 5.3 – Nombre d'itérations neutroniques, de pas de temps thermohydrauliques et temps de calcul total pour le mini-cœur en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.

KAIST

MINOS accéléré avec Chebyshev				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.7$	549	386	9	6.0×10^3
Méthode de la sécante,	639	399	6	6.8×10^3
Anderson $m = 5$, $\alpha = 1$	652	311	21	7.5×10^3

MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, $m = 2$, start : 10				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.7$	162	408	9	3.4×10^3
Méthode de la sécante	179	339	8	3.4×10^3
Anderson $m = 5$, $\alpha = 1$	171	364	8	4.0×10^3

MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, $m = 5$, start : 10				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.7$	111	501	9	2.9×10^3
Méthode de la sécante	115	170	7	2.6×10^3
Anderson $m = 5$, $\alpha = 1$	112	311	7	2.9×10^3

MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, $m = 10$, start : 10				
Méthode de couplage multiphysique (conv. fine)	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermo-hydrauliques	Nombre d'itérations multi-physiques	Temps total de calcul (en sec.)
GS, $\alpha = 0.7$	106	490	9	2.7×10^3
Méthode de la sécante	106	196	7	2.4×10^3
Anderson $m = 5$, $\alpha = 1$	106	344	8	2.5×10^3

TABLEAU 5.4 – Nombre d'itérations neutroniques, de pas de temps thermohydrauliques et temps de calcul total pour le problème 1A de KAIST en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.

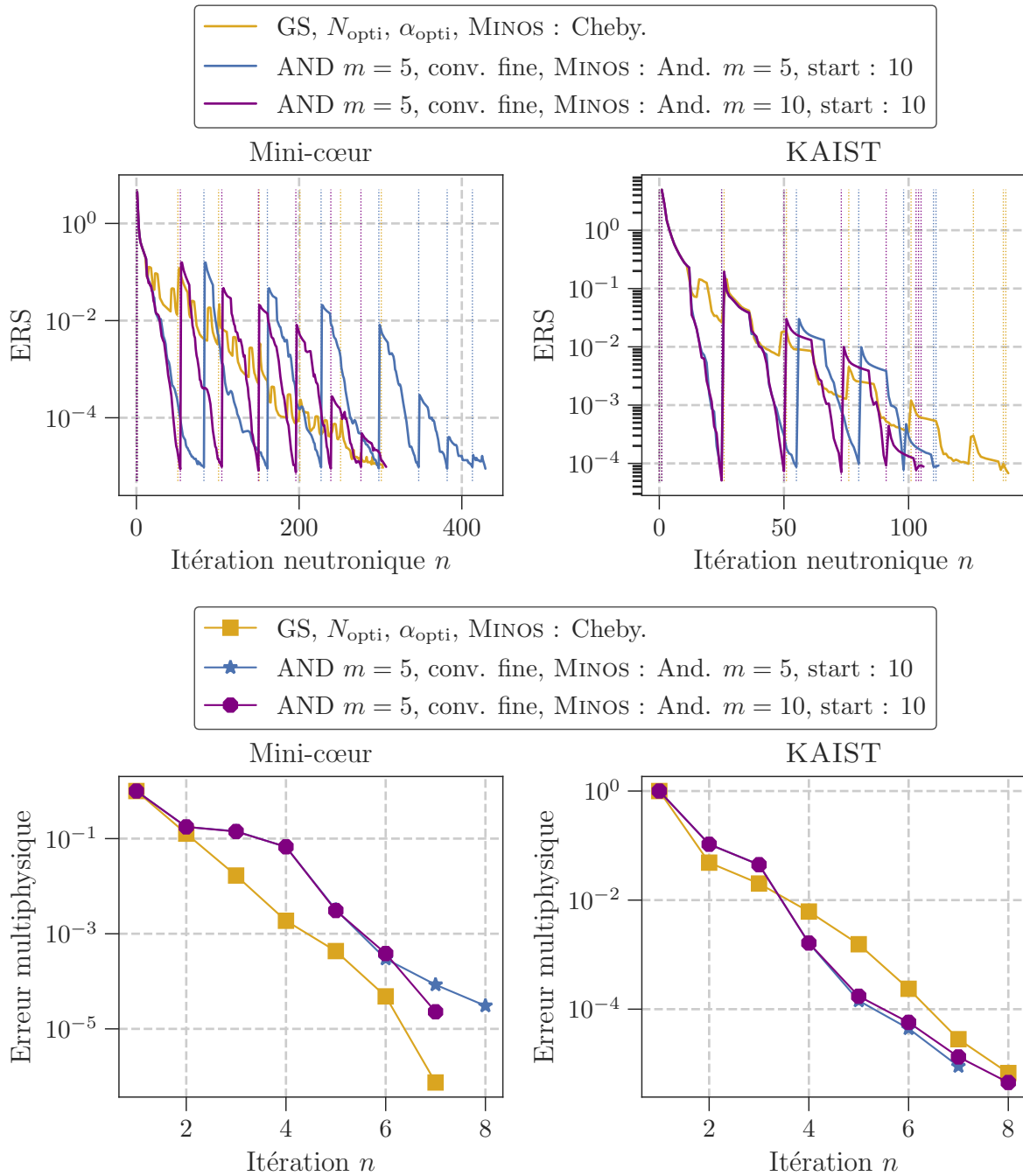


FIGURE 5.8 – Évolution de l’erreur sur la source et de l’erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique pour un couplage réalisé : avec la méthode de Gauss-Seidel (niveau de convergence partielle et valeur de la relaxation optimisés d’un point de vue multiphysique) et l’accélération de Chebyshev dans MINOS ou avec l’accélération d’Anderson à l’ordre 5 d’un point de vue multiphysique et également pour MINOS, à l’ordre $m = 5$ ou $m = 10$ - les traits pointillés verticaux correspondent à une nouvelle itération multiphysique : cela correspond donc à la mise à jour des sections efficaces, suivi d’un calcul thermohydraulique et thermique, puis d’un appel au solveur neutronique.

- $\mathcal{S}_0 := \mathbf{GS}, N_{\text{opti.}}, \alpha_{\text{opti.}}$ **Minos : Chebyshev**, on trouve une erreur relative de $\mathcal{E}_{\mathcal{S}_0} = 3.0 \times 10^{-10}$, une erreur relative locale moyenne de $\overline{\mathcal{E}_{\mathcal{S}_0}} = 1.0 \times 10^{-05}$, et une erreur relative maximale de $\max(\mathcal{E}_{\mathcal{S}_0}) = 8.7 \times 10^{-05}$;
- $\mathcal{S}_1 := \mathbf{AND m = 5, conv. fine, Minos : Chebyshev}$, on trouve une erreur relative de $\mathcal{E}_{\mathcal{S}_1} = 2.2 \times 10^{-05}$, une erreur locale moyenne de $\overline{\mathcal{E}_{\mathcal{S}_1}} = 6.5 \times 10^{-06}$ et une erreur relative maximale de $\max(\mathcal{E}_{\mathcal{S}_1}) = 1.1 \times 10^{-04}$;
- $\mathcal{S}_2 := \mathbf{AND m = 5, conv. fine, Minos : And. m = 2, start : 10}$, on trouve une erreur relative de $\mathcal{E}_{\mathcal{S}_2} = 4.6 \times 10^{-10}$, une erreur relative locale moyenne de $\overline{\mathcal{E}_{\mathcal{S}_2}} = 9.8 \times 10^{-06}$ et une erreur relative maximale de $\max(\mathcal{E}_{\mathcal{S}_2}) = 1.0 \times 10^{-04}$;
- $\mathcal{S}_3 := \mathbf{AND m = 5, conv. fine, Minos : And. m = 5, start : 10}$, on trouve une erreur relative de $\mathcal{E}_{\mathcal{S}_3} = 4.84 \times 10^{-08}$, une erreur relative locale moyenne de $\overline{\mathcal{E}_{\mathcal{S}_3}} = 1.0 \times 10^{-05}$ et une erreur relative maximale de $\max(\mathcal{E}_{\mathcal{S}_3}) = 2.5 \times 10^{-03}$;
- $\mathcal{S}_4 := \mathbf{AND m = 5, conv. fine, Minos : And. m = 10, start : 10}$, on trouve une erreur relative de $\mathcal{E}_{\mathcal{S}_4} = 1. \times 10^{-06}$ une erreur relative locale moyenne de $\overline{\mathcal{E}_{\mathcal{S}_4}} = 4.8 \times 10^{-04}$ et une erreur relative maximale de $\max(\mathcal{E}_{\mathcal{S}_4}) = 1.0 \times 10^{-03}$;

Les erreurs finales obtenues avec l'accélération d'Anderson dans MINOS sont donc cohérentes avec celles qu'on peut obtenir lorsque l'on compare la nappe de puissance issue du calcul dit de référence à celles qu'on calcule *via* les autres méthodes de couplage. Ces variations locales ont malgré tout des conséquences en termes de convergence multiphysique, comme on peut le voir sur la figure 5.8. Ainsi, cela se traduit par une itération multiphysique supplémentaire pour la stratégie \mathcal{S}_3 par rapport à la stratégie \mathcal{S}_4 par exemple dans le cas du mini-cœur, et donc à des surcoûts en temps de calcul.

Finalement, on peut conclure ce paragraphe en notant que l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans MINOS permet d'obtenir des vitesses de convergence pour le problème neutronique permettant de réaliser des calculs couplés dans lesquels on n'a pas à avoir recours à de la convergence partielle. Cela ne permet pas de d'améliorer en termes de temps de calcul le résultat obtenu avec la méthode de Gauss-Seidel et une optimisation du niveau de convergence partielle et du facteur de relaxation, du fait notamment du surcoût lié à l'implémentation actuelle de l'accélération d'Anderson dans MINOS. Malgré tout, ce résultat nous paraît important : en choisissant $m = 5$ pour l'accélération d'Anderson dans MINOS par exemple, qui permet un bon compromis entre vitesse de convergence du problème neutronique et contrôle du surcoût en temps de calcul associé à l'accélération, et une méthode d'accélération multiphysique comme celle de la sécante ou l'accélération d'Anderson sur la nappe de puissance, on est en mesure de faire converger efficacement et en un temps de calcul raisonnable un couplage entre MINOS et THEDI, sans problème de stabilité. Dans le paragraphe suivant, on s'intéresse à l'impact de cette implémentation sur les couplages avec convergence partielle.

5.3.2 Performance des couplages à convergence partielle

On s'intéresse dans ce paragraphe à l'apport de l'implémentation d'Anderson dans MINOS pour des couplages avec convergence partielle. Le contrôle de la sur-résolution *via* la convergence partielle au cours du calcul multiphysique se traduit figure 5.8 par une faible remontée de l'erreur sur la source au début de chaque calcul neutronique pour le cas avec convergence partielle, par rapport aux cas avec convergence fine. On s'attend à ce que l'accélération d'Anderson dans MINOS améliore la vitesse de convergence multiphysique, même si cela s'accompagne d'un plus fort niveau de sur-résolution puisqu'on converge plus rapidement le problème neutronique. Notons également

qu'en fixant $N = 50$, cela correspondait à de la convergence partielle lorsque Chebyshev était utilisé dans MINOS pour le problème 1A de KAIST. Ce n'est plus le cas lorsqu'on utilise Anderson. On étudie donc volontairement un niveau de convergence partielle bas, pour étudier la manière dont une convergence plus rapide du problème neutronique influence la convergence multiphysique dans ce cas. On retient $N = 15$ dans la suite, correspondant au niveau de convergence partielle le plus bas étudié au chapitre 4.

L'évolution de l'erreur sur le terme source de fission et celle multiphysique est donnée figure 5.9. On observe qu'avec Chebyshev dans MINOS et un niveau de convergence partielle fixé à $N = 15$, la décroissance de l'erreur neutronique est très lente : on a bien une sous-résolution du problème, comme on l'a vu au chapitre 4. Lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson dans MINOS, la performance dépend de l'ordre m de la méthode ainsi que du cas d'étude considéré.

- Pour KAIST, quel que soit l'ordre m retenu, on converge le problème multiphysique en ayant réalisé moins d'itérations neutroniques qu'avec la méthode de Gauss-Seidel avec optimisation de la convergence partielle et de la relaxation (courbe **jaune**).
- Pour le mini-cœur, utiliser l'accélération d'Anderson dans MINOS à l'ordre $m = 10$ (courbe **grise**) ralentit la convergence : cela semble lié à de fortes variations dans l'amplitude des contre-réactions thermohydrauliques, qui font remonter l'erreur neutronique à chaque mise à jour des sections efficaces. On n'a pas cette situation pour les cas $m = 2$ (courbe **rouge**) et $m = 5$ (courbe **noire**) : on remarque qu'en limitant le nombre d'itérations neutroniques par appel à $N = 15$, cela semble avantager les ordres m plus petit pour l'accélération d'Anderson dans MINOS. On peut comprendre cela en se rendant compte qu'on utilise alors pour le calcul de la 15-ième itération accélérée uniquement des itérées précédemment accélérées (sauf une pour $m = 5$), alors qu'on n'arrive jamais à cette qualité de mémoire pour $m = 10$.

Ce dernier point ne pose pas de problème pour KAIST car la neutronique converge assez facilement, en comparaison avec le mini-cœur. Dans ce dernier cas d'étude, la vitesse de convergence plus rapide de l'erreur neutronique obtenue en utilisant l'accélération d'Anderson dans MINOS (courbes **rouge**, **grise** et **noire**) ne se traduit pas en un gain en termes de nombre d'itérations multiphysiques par rapport au couplage avec Gauss-Seidel finement optimisé (courbe **jaune**). Malgré tout, cela permet de gagner un grand nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques par rapport au cas équivalent avec Chebyshev dans MINOS et niveau de convergence partielle équivalent (courbe **bleue**), et ce quel que soit le cas d'étude.

En termes de temps de calcul total, le tableau 5.5 résume les principaux résultats. Les mêmes remarques que pour les tableaux 5.3 et 5.4 peuvent être faites. On note également que l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS modifie le niveau de convergence partielle optimal et qu'on arrive, dans le cas de KAIST, à améliorer le temps de calcul total par rapport au couplage avec Gauss-Seidel, dans lequel on optimise le niveau de convergence partielle et le facteur de relaxation.

Bilan de la section : Dans cette section, on a mis en évidence l'intérêt, du point de vue des couplages multiphysiques, d'avoir implémenté l'accélération d'Anderson pour accélérer la convergence du solveur MINOS. Ainsi, on est maintenant en mesure de réaliser des calculs couplés avec convergence fine des solveurs. En utilisant des algorithmes de couplage comme la méthode de la sécante ou l'accélération d'Anderson, on garantit par ailleurs la stabilité du calcul. Par rapport au chapitre 4, on s'est donc libéré des contraintes posées par la

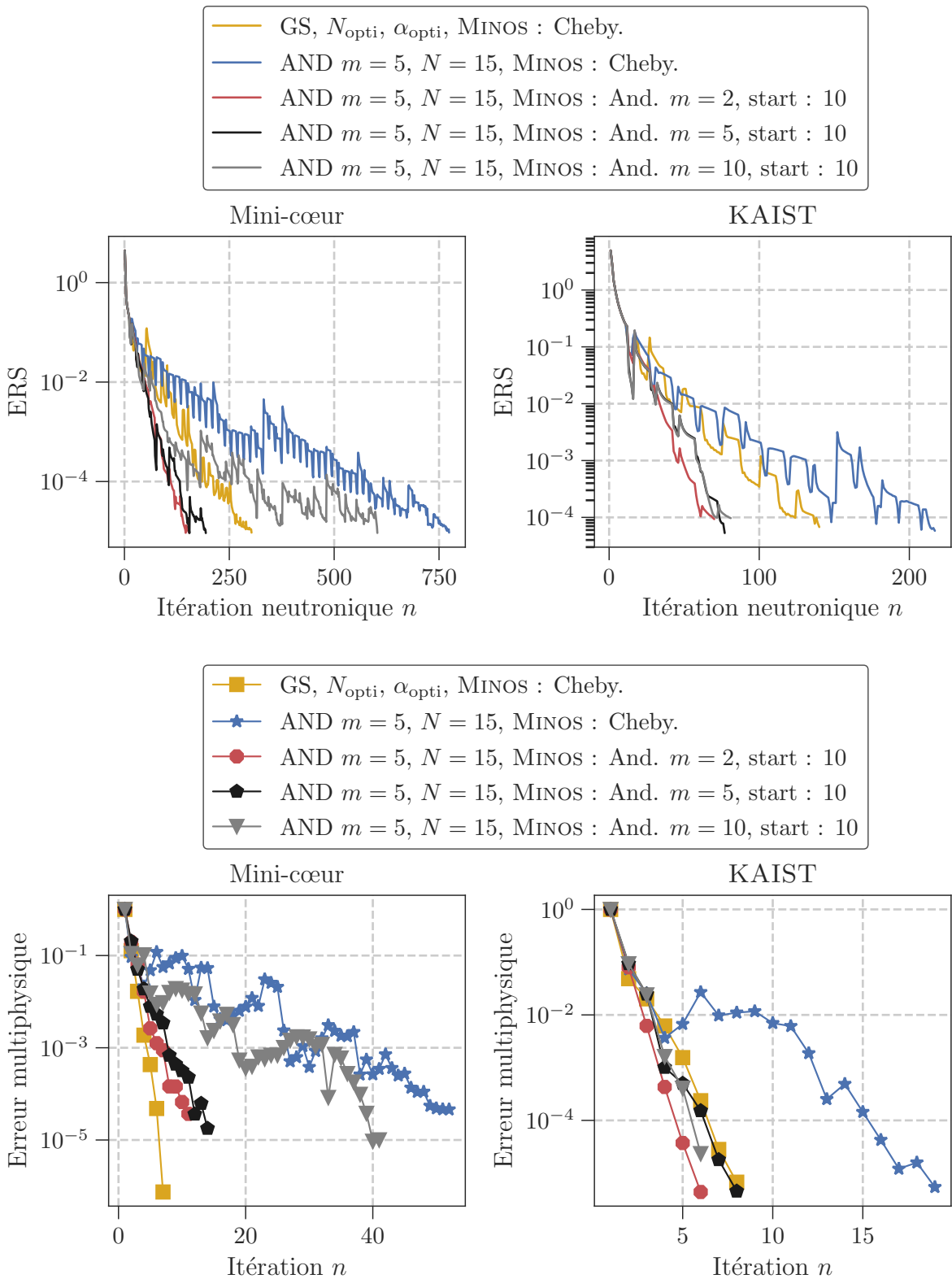


FIGURE 5.9 – Évolution de l'erreur sur la source et de l'erreur multiphysique au cours du calcul multiphysique pour un couplage réalisé avec : d'une part, soit la méthode de Gauss-Seidel (niveau de convergence partielle et valeur de la relaxation optimisés d'un point de vue multiphysique), soit l'accélération d'Anderson multiphysique avec $N = 15$ et $m = 5$, pour différentes méthodes d'accélération interne à MINOS.

Mini-cœur

MINOS accéléré avec Chebyshev			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydraulique	Temps total de calcul (en sec.)
GS $N = 50$ et $\alpha = 1$	302	6 946	1.1×10^3
Anderson $m = 5, N = 15$	774	+20 000	5.4×10^3
MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, avec 1) $m = 2$; 2) $m = 5$ ou 3) $m = 10$ et start : 10			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydraulique	Temps total de calcul (en sec.)
1) Anderson $m = 5, N = 15$	154	9 993	4.0×10^3
2) Anderson $m = 5, N = 15$	194	11 915	1.7×10^3
3) Anderson $m = 5, N = 15$	603	+20 000	4.7×10^3

KAIST

MINOS accéléré avec Chebyshev			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydraulique	Temps total de calcul (en sec.)
GS $N = 25$ et $\alpha = 0.9$	140	503	1.8×10^3
Anderson $m = 5, N = 15$	217	1 465	3.0×10^3
MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, avec 1) $m = 2$, 2) $m = 5$ ou 3) $m = 10$, start : 10			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre de pas de temps thermohydraulique	Temps total de calcul (en sec.)
1) Anderson $m = 5, N = 15$	70	435	1.7×10^3
2) Anderson $m = 5, N = 15$	77	463	2.3×10^3
3) Anderson $m = 5, N = 15$	81	571	1.9×10^3

TABLEAU 5.5 – Nombre d'itérations neutroniques, de pas de temps thermohydrauliques et temps de calcul total pour le problème 1A de KAIST en fonction de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS, dans le cas d'un niveau de convergence partielle fixé à $N = 15$.

méthode de Gauss-Seidel. En termes de temps de calcul, on obtient alors des résultats satisfaisants, sans toutefois réussir à améliorer le temps de calcul obtenu en optimisant finement le niveau de convergence partielle et la valeur du facteur de relaxation, qu'on a déterminé au chapitre 4. En combinant l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS et la convergence partielle, on est en revanche en mesure d'améliorer le temps de calcul global : on ne se satisfait cependant pas de ce résultat, qui passe encore une fois par une étape d'optimisation dépendante du cas d'étude. Il reste par ailleurs une marge d'optimisation quant à l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans MINOS.

5.4 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a donc implémenté avec succès l'accélération d'Anderson dans le solveur SP_N MINOS, à la place de l'accélération de Chebyshev. Cela permet d'accélérer la convergence du problème à valeur propre et la résolution des équations SP_N , autorisant une convergence fine de MINOS : selon l'ordre de la méthode d'Anderson et l'ordre N de l'approximation SP_N , on gagne ainsi un facteur 3 à 5 sur le nombre d'itérations neutroniques effectuées. Pour limiter le surcoût lié à l'accélération d'Anderson, on a proposé une approche originale, tirant parti de la linéarité entre la source de fission et le flux pour proposer une implémentation plus parcimonieuse de l'accélération d'Anderson. On applique dans un premier temps l'accélération d'Anderson au terme source de fission simplement, et pour maintenir la cohérence entre la source accélérée et le flux précédemment calculé, on répercute les coefficients d'Anderson sur le flux. Cela nécessite donc d'avoir malgré tout une mémoire constituée de la source de fission et des composantes du flux, mais cela permet d'économiser un facteur 3 à 7 en temps de calcul par rapport à l'accélération d'Anderson appliquée directement sur le vecteur complet, tout en maintenant une vitesse de convergence identique.

Différentes stratégies ont été explorées pour essayer d'optimiser l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS. On a conclu que conserver l'implémentation retenue pour Chebyshev, avec un lancement de l'accélération suite à 10 itérations libres, permettait d'accélérer la vitesse de convergence et d'économiser en temps de calcul, puisqu'on économise le surcoût associé à ces 10 itérations. De même, on a exploré des techniques d'évolution automatique de l'ordre m d'Anderson. L'idée est alors de limiter la taille de la mémoire jusqu'à avoir suffisamment convergé. On peut alors augmenter l'ordre, sans craindre de dégrader la vitesse de convergence. On a montré qu'une telle approche n'améliore que légèrement le temps de calcul et pouvait dégrader la vitesse de convergence.

On a ensuite étudié l'impact d'une convergence plus rapide du solveur neutronique sur la méthodologie de couplage en boîtes noires développée au chapitre 4. On a mis en évidence qu'on est dorénavant en mesure de réaliser des couplages entre MINOS et THEDI avec convergence fine en un temps de calcul et un nombre d'itérations neutroniques acceptables, proches des algorithmes de couplage finement optimisés mis en évidence en sections 4.1.1 et 4.1.2. On estime qu'il reste une marge de progression en optimisant l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans le solveur neutronique. Enfin, sans surprise, on a vu que les techniques de couplage avec convergence partielle sont plus performantes lorsque le solveur de neutronique est accéléré avec l'accélération d'Anderson que lorsqu'il ne l'est pas.

L'enjeu du chapitre suivant est de tirer parti de l'implémentation proposée à la section 5.2 pour mettre en place des couplages intrusifs. En effet, puisqu'on a implémenté l'accélération d'Anderson pour accélérer la convergence neutronique, il devient possible d'utiliser une implémentation similaire

pour accélérer de façon cohérente les dépendances au flux des solveurs de neutronique, mais aussi du problème multiphysique : ainsi, on a vu en section 4.3.3 que le couplage sur la nappe de puissance tel qu'étudié jusqu'ici pouvait également être compris comme un point fixe sur le flux final obtenu à chaque appel neutronique. Concrètement, il s'agit de s'intéresser à :

$$\left(\phi^{(n+1)}\right) = \mathbf{N}\left(\phi^{(n)}, \mathbf{TH}\left(\phi^{(n)}\right)\right),$$

et de comparer cette approche avec les couplages en boîtes noires étudiés jusqu'ici. On cherche par là à accélérer en une même étape la convergence du problème multiphysique et celle du problème neutronique, en garantissant une cohérence tout au long du calcul entre la nappe de puissance et le flux.

Chapitre 6

Méthodologie pour les couplages intrusifs

L'objectif de ce chapitre est d'essayer d'accélérer en même temps la grandeur échangée entre les solveurs, la nappe de puissance donc, et le flux neutronique utilisé par le solveur de neutronique. En effet, on a vu au chapitre 4 que les méthodes basées sur la convergence partielle étaient les plus efficaces. Elles travaillent sur un schéma de couplage qui peut s'écrire :

$$\left(\phi^{(n+1)}\right) = N\left(\phi^{(n)}, \text{TH}\left(\phi^{(n)}\right)\right),$$

Cela explique la dégradation des performances de l'accélération d'Anderson appliquée à la nappe de puissance seule, lorsque le niveau de convergence partielle atteint un certain seuil critique, qui dépend alors du cas d'étude.

Dans une première section, on met donc en place le couplage intrusif sur le flux neutronique dans APOLLO3®. Dans une seconde section, on met en évidence l'intérêt de cette approche dans le cadre des couplages avec convergence partielle : elle permet d'améliorer la vitesse de convergence du problème multiphysique et de réduire le nombre total d'itérations neutroniques à effectuer. Finalement, on s'intéresse aux couplages hybrides avec convergence fine : on montre alors que cette approche permet d'améliorer la vitesse de convergence multiphysique par rapport au couplage en boîtes noires.

Sommaire

6.1 Développement d'un schéma de couplage intrusif sur le flux neutronique convergé	146
6.1.1 Conservation de la cohérence entre le flux et la nappe de puissance	146
6.1.2 Développement d'un couplerSolverAPI	147
6.1.3 Changement de paradigme	149
6.2 Intérêt de l'approche hybride pour les couplages avec convergence partielle	149
6.2.1 Accélération des couplages hybrides avec Anderson	149
6.2.1.1 Comparaison avec les couplages en boîtes noires	150
6.2.1.2 Optimisation des couplages hybrides avec convergence partielle	155
6.2.2 Introduction des couplages bas niveau	156
6.3 Optimisation des couplages hybrides à convergence fine	158
6.4 Bilan du chapitre	166

6.1 Développement d'un schéma de couplage intrusif sur le flux neutronique

On cherche dans cette section à développer un couplage intrusif entre MINOS et THEDI. Cela nécessite de changer de paradigme : en effet, quel que soit le solveur utilisé dans APOLLO3®, le flux neutronique est alors le résultat d'un calcul (stationnaire, critique, cinétique...) et l'utilisateur ne peut pas le modifier. Ainsi, on ne peut pas en l'état initialiser MINOS avec un flux accéléré calculé par ailleurs, en dehors du solveur, par exemple avec l'accélération d'Anderson. On sort donc ici des couplages en boîtes noires et on s'autorise à modifier l'architecture du solveur MINOS. On présente dans la suite l'intérêt de la méthode ainsi que le développement effectué.

6.1.1 Conservation de la cohérence entre le flux et la nappe de puissance

Jusqu'ici, le couplage étudié était vu comme un point fixe sur la nappe de puissance. Une itération multiphysique n pouvait alors être résumée de cette manière :

1. on commence l'itération avec une nappe de puissance $P_{acc.}^{(n-1)}$ et un flux $\phi_{calc.}^{(n-1)}$;
2. on effectue un calcul thermohydraulique et thermique et on met à jour la température effective $T_{eff}^{(n)}$ et la densité du modérateur $\rho_{mod}^{(n)}$ à partir de la nappe de puissance précédemment calculée, $P_{acc.}^{(n-1)}$;
3. on met à jour les sections efficaces à partir de $T_{eff}^{(n)}$ et $\rho_{mod}^{(n)}$;
4. on fait appel au solveur neutronique : on l'initialise avec le flux solution précédent $\phi_{calc.}^{(n-1)}$ et on obtient un flux final $\phi_{calc.}^{(n)}$;
5. on calcule la nouvelle nappe de puissance $P_{calc.}^{(n)}$ et, éventuellement, on détermine une nappe de puissance accélérée (avec Anderson, la méthode de la sécante ou en appliquant simplement une relaxation) $P_{acc.}^{(n)}$, avec $P_{acc.}^{(n)} = P_{calc.}^{(n)}$ si aucune méthode d'accélération n'est appliquée.

Le flux $\phi_{calc.}^{(n-1)}$ qui est utilisé pour initialiser le solveur neutronique n'est pas cohérent avec la puissance $P_{acc.}^{(n-1)}$: le flux initial du solveur neutronique ne correspond donc pas aux nappes de température, densité et puissance au même instant du schéma de couplage.

On propose donc de déplacer l'étape d'accélération, pour qu'elle s'applique directement au flux. Une itération multiphysique peut alors être décrite de la manière suivante :

1. on commence avec une nappe de puissance $P_{calc.}^{(n-1)}$ et un flux $\phi_{acc.}^{(n-1)}$;
2. on effectue un calcul thermohydraulique et thermique et on met à jour la température effective $T_{eff}^{(n)}$ et la densité du modérateur $\rho_{mod}^{(n)}$ à partir de la nappe de puissance précédemment calculée, $P_{calc.}^{(n-1)}$;
3. on met à jour les sections efficaces à partir de $T_{eff}^{(n)}$ et $\rho_{mod}^{(n)}$;
4. on fait appel au solveur neutronique : on l'initialise avec le flux solution précédent $\phi_{acc.}^{(n-1)}$ et on obtient un flux final $\phi_{calc.}^{(n)}$;
5. éventuellement, on détermine un flux accéléré (avec Anderson, la méthode de la sécante ou en appliquant simplement une relaxation) $\phi_{acc.}^{(n)}$, avec $\phi_{acc.}^{(n)} = \phi_{calc.}^{(n)}$ si aucune méthode d'accélération n'est appliquée ;
6. on calcule la nouvelle nappe de puissance $P_{calc.}^{(n)}$ à partir de $\phi_{acc.}^{(n)}$.

Ici, lorsqu'on appelle le solveur neutronique, la température effective et la densité du modérateur ayant servi à mettre à jour les sections efficaces ont donc bien été calculées à partir de la nappe de puissance issue du flux neutronique accéléré, qui est également utilisé pour initialiser le solveur neutronique. On a donc bien une cohérence entre les différents champs physiques du couplage. On voit qu'il est nécessaire d'avoir accès en lecture et en écriture au flux neutronique pour mettre en place l'accélération décrite à l'étape 5. On parle dans la suite de couplage hybride concernant ce schéma de couplage. Le schéma 6.1 illustre les deux stratégies évoquées ici. Dans la suite, on implémente donc la stratégie de couplage hybride proposée pour un couplage entre MINOS et THEDI.

6.1.2 Développement d'un couplerSolverAPI

On présente ici dans les grandes lignes le développement effectué au cours de cette thèse pour mettre en place ces couplages intrusifs. L'enjeu est d'être en mesure d'appeler le solveur THEDI dans MINOS, ainsi que d'y mettre à jour les sections efficaces et la nappe de puissance. Cela se fait grâce au `thediCoreSolverAPI`, module développé dans le cadre du projet APOLLO3® pour faciliter l'utilisation de THEDI dans APOLLO3®. Par ailleurs, on a dorénavant deux niveaux mémoires à construire et mettre à jour :

- le premier correspond à une mémoire purement neutronique, constituée soit de sources de fission lorsqu'on utilise l'accélération de Chebyshev pour accélérer la méthode de la puissance itérée, soit de vecteurs regroupant les composantes du flux et des sources de fission, lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson. Tous les termes de cette mémoire sont calculés à partir des mêmes sections efficaces ;
- le second correspond comme on l'a dit à une mémoire multiphysique. De la même manière que précédemment, lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson, on l'applique alors au vecteur constitué des sources de fission, puis on la répercute ensuite sur les composantes du flux. Les différents termes de la mémoire ont ici été calculés à partir de sections efficaces différentes, issues des dernières nappes de température efficace et de densité du modérateur.

Les méthodes développées au chapitre 5 pour l'implémentation de l'accélération d'Anderson dans MINOS sont donc les mêmes que celles qu'on doit utiliser pour cette étape d'accélération multiphysique. On réutilise donc les développements précédents. Notons qu'on aurait pu, pour l'accélération multiphysique, appliquer directement l'accélération d'Anderson aux composantes du flux, sans se soucier des sources de fission : en effet, lors de l'initialisation du solveur MINOS, une nouvelle source de fission est calculée à partir du flux qui sert à initialiser le solveur et des sections efficaces mises à jour. Cependant, on a vu qu'il était moins coûteux en termes de temps de calcul d'appliquer l'accélération d'Anderson sur la source uniquement, pour en déduire un flux cohérent avec la source accélérée ensuite. On applique donc la même stratégie au niveau multiphysique que celle retenue pour le niveau neutronique, présentée au chapitre 5. On a vu que cela permettait de diviser par un facteur 3 à 7 le temps passé à construire le système d'optimisation associé à l'accélération d'Anderson, à sa résolution et au calcul de l'itérée accélérée. On économise moins ici en termes de temps de calcul puisqu'on n'a pas à calculer de source accélérée au niveau de l'accélération multiphysique comme on vient de l'expliquer, mais on s'attend à un gain malgré tout non négligeable. On perd en revanche en termes de mémoire, puisqu'on doit stocker les termes sources "multiphysiques", qui servent uniquement aux calculs des coefficients d'Anderson qu'on utilise ensuite pour déterminer un flux accéléré.

On peut d'ores et déjà souligner que les remarques faites au chapitre précédent sur l'optimisation de l'implémentation de l'accélération d'Anderson s'appliquent ici et sont en quelque sorte deux fois

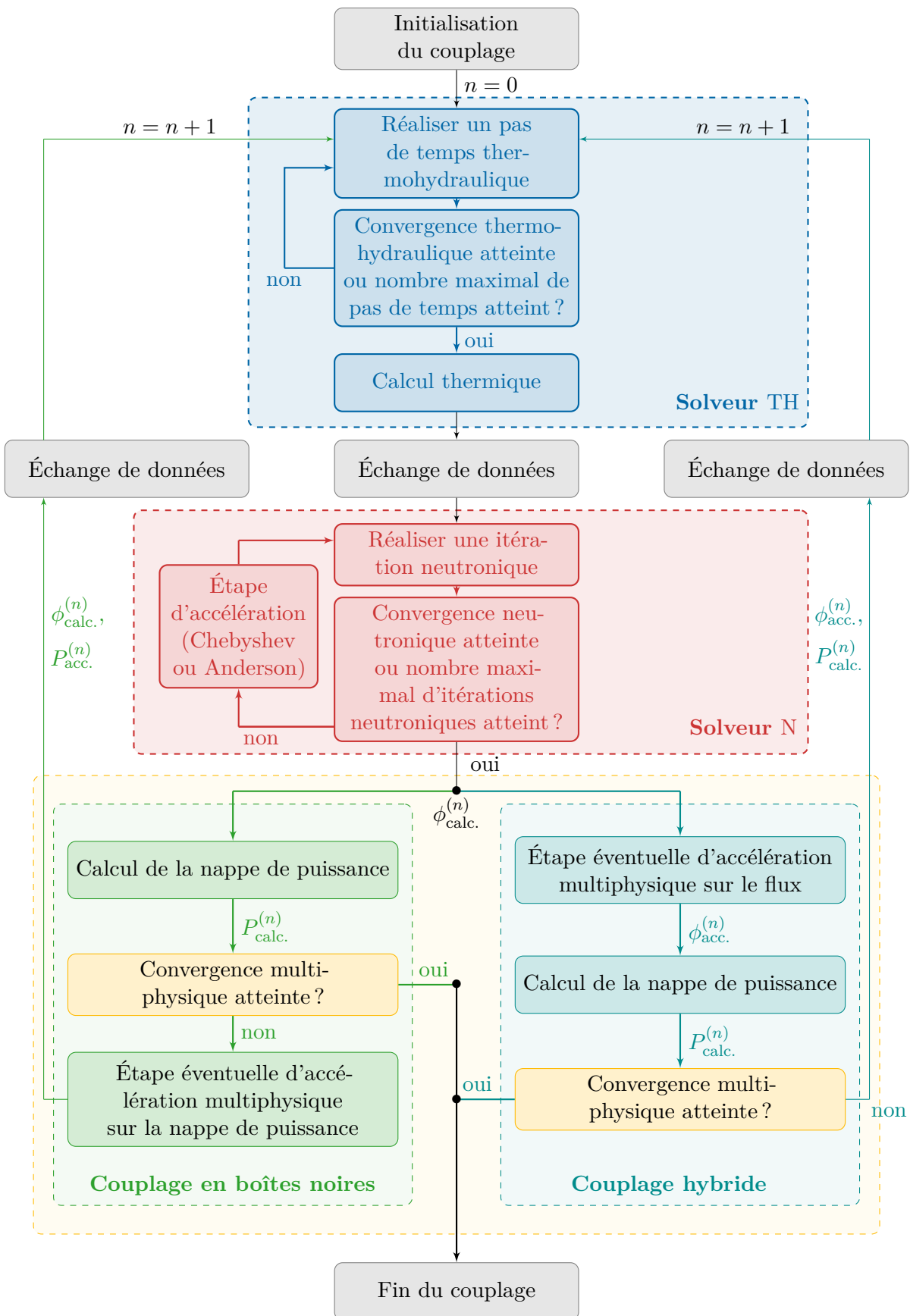


FIGURE 6.1 – Représentation schématique des stratégies de couplage en boîtes noires et hybride : l'étape d'accélération multiphysique peut correspondre à une itération de l'accélération d'Anderson par exemple.

plus importantes, puisque selon la stratégie de couplage retenu, on a deux accélérations d'Anderson imbriquées qui reposent sur cette implémentation! Dans la suite, on se propose d'étudier les performances de cette stratégie de couplage intrusif.

6.1.3 Changement de paradigme

Jusqu'ici, on a utilisé la librairie Python **C3PO** pour réaliser les couplages entre **APOLLO3®** et **THEDI**. La mise en place de ce couplage entraîne un changement de paradigme : on manipule dorénavant uniquement des objets issus d'**APOLLO3®**, et le couplage ne fait donc intervenir que des champs **APOLLO3®**. L'utilisation de **C3PO** n'est donc plus nécessaire. Cela n'a pas d'impact en termes de vitesse de convergence et nombre d'itérations mono et multiphysiques. En termes de temps de calcul total en revanche, cela modifie sa décomposition entre initialisation des solveurs ou des méthodes d'échange des champs, etc. On s'est intéressé depuis le départ au temps de calcul total, et s'il est nécessaire de souligner ces différences, on garde cette métrique pour comparer les approches entre couplage en boîtes noires et hybride.

Bilan de la section : Dans cette section, on a présenté les développements réalisés permettant de mettre en place des couplages intrusifs. Ces derniers garantissent la cohérence des champs physiques au cours du couplage multiphysique. De plus, ils garantissent, lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson, d'accélérer un point fixe correctement défini, et ce, même lorsqu'on a recours à la convergence partielle du solveur neutronique. L'accélération ainsi mise en place agit à la fois sur la vitesse de convergence du problème neutronique et sur celle multiphysique. Dans la suite, on compare donc les performances des couplages hybrides avec celles des couplages en boîtes noires, en termes de temps de calcul total, mais aussi en termes de vitesses de convergence et de nombres d'itérations mono et multiphysiques.

6.2 Intérêt de l'approche hybride pour les couplages avec convergence partielle

Dans cette section, on étudie les capacités de l'accélération d'Anderson à accélérer des couplages hybrides avec convergence partielle. En effet, cette approche permet d'accéder aux variables d'états neutroniques, qui interviennent dans la définition du point fixe qu'on cherche à accélérer lorsqu'on utilise la convergence partielle du solveur neutronique, définition qu'on peut par exemple retrouver à l'équation (4.3.1). On étudie donc l'impact de la convergence partielle sur les performances de l'accélération d'Anderson au niveau multiphysique, pour les couplages hybrides. On montre par ailleurs qu'on est désormais en mesure, avec cette stratégie de couplage, de mettre en place des couplages qu'on qualifiera de bas niveau, dans lesquels la thermohydraulique et la thermique sont mises à jour à chaque itération neutronique.

6.2.1 Accélération des couplages hybrides avec Anderson

On cherche ici à mettre en évidence la capacité de l'accélération d'Anderson à accélérer en termes de nombre d'itérations multiphysiques le schéma de couplage hybride avec convergence partielle. Pour cela, on compare pour différents niveaux de convergence partielle le couplage hybride au couplage en boîtes noires équivalent. On cherche également à optimiser le schéma de couplage hybride en termes de niveau de convergence partielle, d'ordre des méthodes d'accélération et de stratégie de lancement.

6.2.1.1 Comparaison avec les couplages en boîtes noires

On se restreint ici aux cas $N = 15$ et $N = 25$, ainsi qu'à la méthode de Gauss-Seidel et à l'accélération d'Anderson, du point de vue des algorithmes de couplage. On a ainsi vu au chapitre 4 que ces niveaux de convergence partielle dégradent les performances de l'accélération d'Anderson appliquée à la nappe de puissance. Pour l'application de l'accélération d'Anderson au problème multiphysique, on se restreint au cas avec $m = 2$, que le couplage considéré soit en boîtes noires ou hybride. On a en effet vu que du point de vue multiphysique, le faible nombre d'itérations à réaliser ne justifie pas d'augmenter l'ordre de l'accélération. De même, pour l'accélération du problème neutronique, on se limite aux cas $m = 5$, ayant montré au chapitre 5 qu'il s'agit d'un bon compromis entre vitesse de convergence, temps de calcul total et contrôle du surcoût associé à la méthode d'accélération. Les résultats sont donnés pour l'évolution de l'erreur sur la source et pour celle multiphysique figure 6.2 pour $N = 25$ et figure 6.3 pour $N = 15$.

La comparaison entre les couplages en boîtes noires a été faite au chapitre précédent, section 5.3 et on n'insiste donc pas sur ce point ici. Concernant les couplages hybrides (courbes rouge et grise), on peut remarquer qu'on obtient une vitesse de convergence multiphysique améliorée dans tous les cas étudiés ici, par rapport au couplage en boîtes noires équivalents, et ce, quelle que soit l'accélération utilisée du point de vue neutronique pour la méthode de la puissance itérée. On gagne par ailleurs en termes de nombres d'itérations multiphysiques à réaliser par rapport au meilleur cas de couplage en boîtes noires donné ici, à savoir un couplage accéléré d'un point de vue neutronique et multiphysique par l'accélération d'Anderson (courbe noire).

En particulier, si l'on compare les couplages équivalents en boîtes noires et hybride, pour lesquels l'accélération d'Anderson est utilisée d'un point de vue multiphysique, respectivement sur la nappe de puissance et le flux convergé, tandis que celle de Chebyshev l'est pour le problème neutronique (il s'agit de comparer les courbes bleu et rouge), la différence de comportement ne fait aucun doute : ainsi, si on a vu au chapitre 4 que l'accélération d'Anderson appliquée à la nappe de puissance ne permettait pas d'accélérer la convergence multiphysique des couplages lorsque N (le nombre d'itérations neutroniques autorisées à chaque appel) est trop faible, ce n'est plus le cas lorsqu'on met en place des couplages hybrides et qu'on accélère directement le flux neutronique. On peut expliquer cela simplement par le fait qu'on applique alors l'accélération d'Anderson à un point fixe correctement défini mathématiquement, alors que ce n'était pas le cas lorsque l'on combinait accélération d'Anderson multiphysique sur la nappe de puissance et convergence partielle neutronique, comme on l'a souligné en section 4.4. Pour $N = 25$ on divise ainsi respectivement par environ 3 pour le mini-cœur et environ 2 pour KAIST le nombre d'itérations multiphysiques. La situation est identique pour $N = 15$. En termes de réduction du nombre total d'itérations neutroniques effectuées, on retrouve en ordre de grandeur ces facteurs 3 et 2. Comparée au couplage en boîtes noires avec Gauss-Seidel (courbe jaune), l'approche hybride avec utilisation de l'accélération de Chebyshev dans MINOS permet également d'améliorer à la fois la vitesse de convergence multiphysique et celle neutronique.

Il apparaît avec ces comparaisons qu'en cas d'utilisation de la convergence partielle neutronique, il est plus efficace d'opter pour un couplage hybride, quelle que soit l'accélération interne à MINOS retenue, que de retenir un couplage en boîtes noires, que ce soit du point de vue de la vitesse de convergence neutronique que de celle multiphysique. Si l'on compare uniquement les cas de

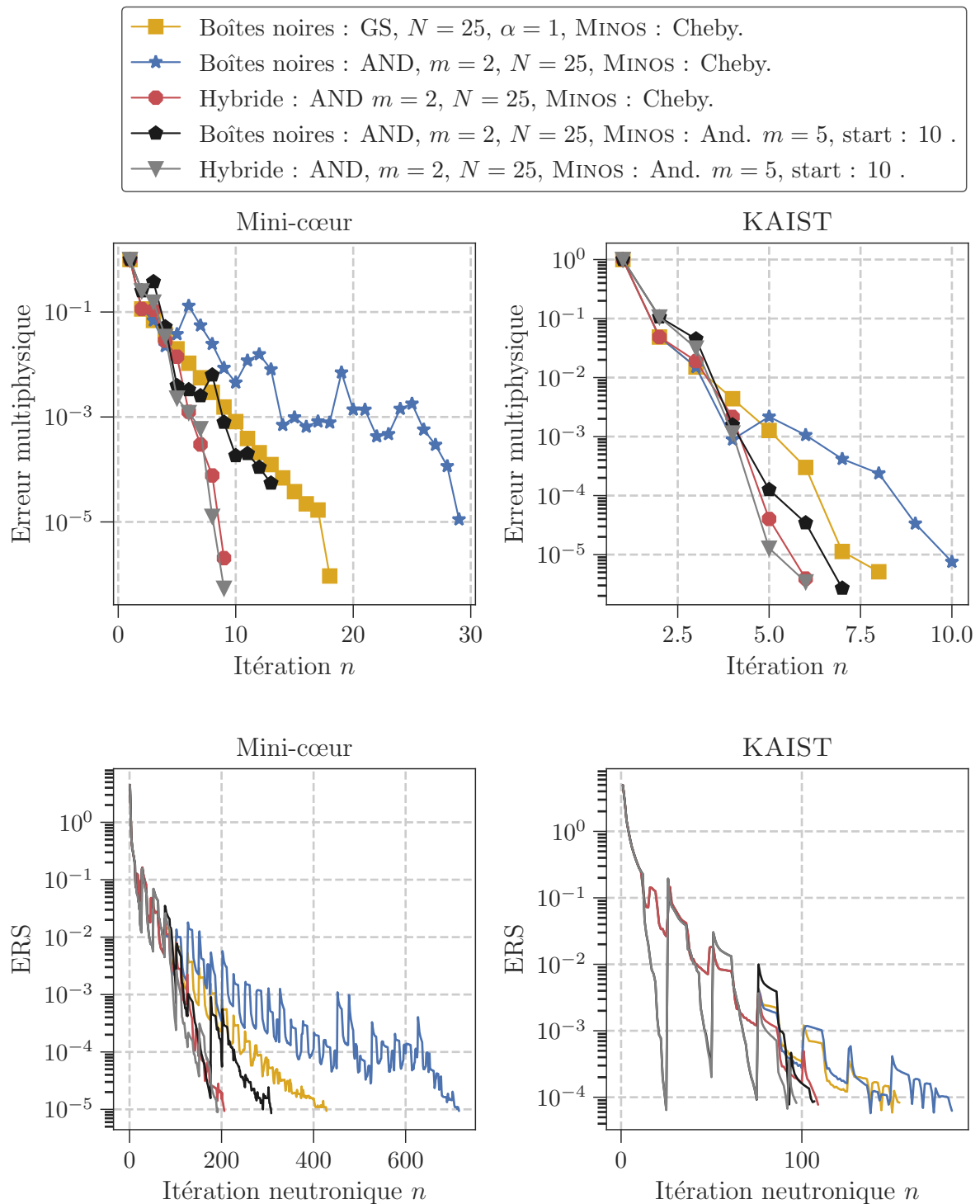


FIGURE 6.2 – Évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour différentes stratégies de couplage hybride et en boîtes noires, avec convergence partielle fixée à $N = 25$ - les traits pointillés verticaux correspondant à une nouvelle itération multiphysique ne sont pas représentés pour plus de visibilité.

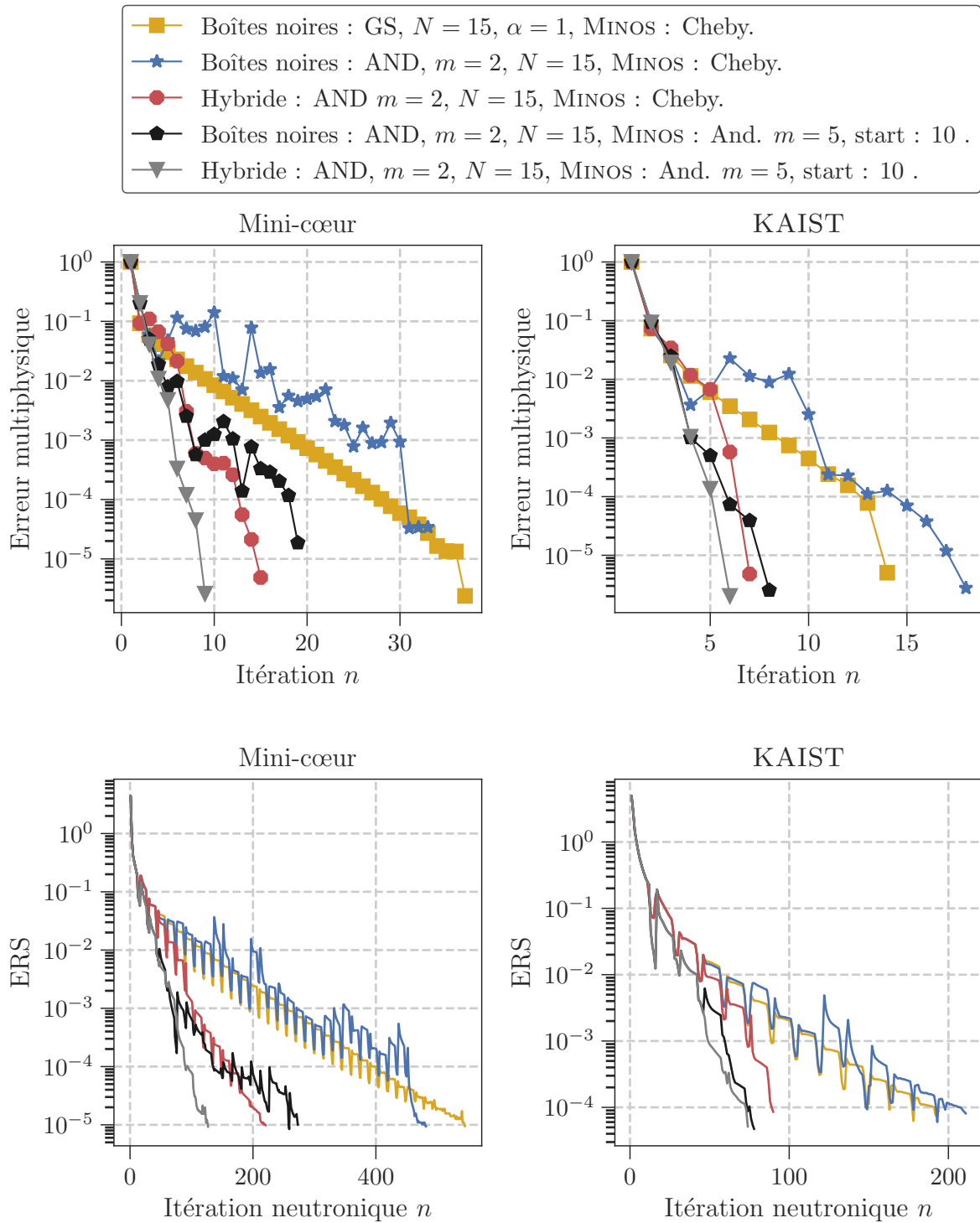


FIGURE 6.3 – Évolution de l’erreur multiphysique et de l’erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour différentes stratégies de couplage hybride et en boîtes noires, avec convergence partielle fixée à $N = 15$ - les traits pointillés verticaux correspondant à une nouvelle itération multiphysique ne sont pas représentés pour plus de visibilité.

Mini-cœur

MINOS accéléré avec Chebyshev			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : GS $N_{\text{opti.}} = 50$, $\alpha_{\text{opti.}} = 1$	302	7	1.1×10^3
Boîtes noires : GS $N = 25$ et $\alpha = 1$	428	18	2.0×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 25$	716	29	3.5×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 25$	206	9	1.2×10^3
Boîtes noires : GS $N = 15$ et $\alpha = 1$	545	37	3.5×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 15$	482	33	3.5×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 15$	221	15	1.6×10^3
MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, avec $m = 5$ et start : 10			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 25$	308	13	2.0×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 25$	192	9	1.4×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 15$	273	19	2.4×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 15$	123	9	1.2×10^3
Couplage hybride optimisé			
Hybride : Anderson $m = 5$, $N = 15$	139	10	1.0×10^3
MINOS : Anderson $m = 2$, start : 10			

TABLEAU 6.1 – Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur en fonction de l'approche et de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.

couplage hybride, il apparaît qu'utiliser l'accélération d'Anderson dans MINOS (courbe grise) permet également d'accélérer la convergence à ces deux niveaux, lorsqu'on autorise peu d'itérations neutroniques par appel (cas $N = 15$ ici), par rapport à l'accélération de Chebyshev (courbe rouge).

Les tableaux 6.1 et 6.2 résument ces résultats et donnent également le temps de calcul total associé à chaque stratégie de couplage. On observe ainsi que le couplage hybride est toujours meilleur en temps de calcul et en nombres d'itérations que le couplage en boîte noire équivalent. Les meilleurs temps sont généralement obtenus pour le couplage hybride combinée à l'accélération de Chebyshev : on économise ainsi le surcoût de l'accélération d'Anderson pour MINOS, mais on profite malgré tout de l'accélération d'Anderson au niveau multiphysique, qui permet d'accélérer également la neutronique. Seule exception, le cas du mini-cœur avec $N = 15$: le couplage hybride avec utilisation de l'accélération d'Anderson pour MINOS est ici meilleur que le couplage hybride combinée avec Chebyshev. Cela est probablement dû au fait que le surcoût d'Anderson est alors limité. De plus, la convergence neutronique est particulièrement lente avec Chebyshev pour ce cas.

KAIST

MINOS accéléré avec Chebyshev			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : GS $N_{\text{opti.}} = 25$, $\alpha_{\text{opti.}} = 0.9$	140	8	1.8×10^3
Boîtes noires : GS $N = 25$ et $\alpha = 1$	154	8	2.0×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 25$	183	10	2.3×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 25$	109	6	1.8×10^3
Boîtes noires : GS $N = 15$ et $\alpha = 1$	194	14	2.6×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 15$	211	18	2.9×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 15$	92	7	1.5×10^3
MINOS accéléré avec Anderson, appliquée à la source puis au flux, avec $m = 5$ et start : 10			
Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 25$	107	7	2.8×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 25$	97	6	2.4×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2$, $N = 15$	78	8	2.3×10^3
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 15$	74	6	2.0×10^3
Couplage hybride optimisé			
Hybride : Anderson $m = 2$, $N = 15$	52	5	1.4×10^3
MINOS : Anderson $m = 2$, start : 2			

TABLEAU 6.2 – Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le problème 1A de KAIST en fonction de l'approche et de la méthode de couplage multiphysique et de la méthode d'accélération interne choisie dans MINOS.

L'approche hybride avec Anderson comme accélération interne de MINOS semble donc la plus prometteuse, notamment si on arrive à l'avenir à optimiser son implémentation pour limiter son surcoût par itération neutronique, pour la résolution du problème à valeur propre, et par itération multiphysique. De plus, on note que si on utilise une approche hybride avec convergence partielle, le choix de l'accélération interne utilisée pour MINOS apparaît comme moins critique, par rapport aux couplages en boîtes noires.

Les temps de calcul obtenus dans le cas des couplages hybrides étant proches des temps de calcul optimaux déterminés au chapitre 4 suite à l'optimisation du facteur de relaxation et du niveau de convergence partielle pour les couplages en boîtes noires avec Gauss-Seidel, on cherche dans la suite à optimiser les schémas de couplage hybride pour illustrer l'intérêt de cette approche. Notons que pour KAIST, on a déjà amélioré le temps de calcul optimal qu'on a déterminé au chapitre 4, tableau 4.1 : l'approche hybride avec Chebyshev pour MINOS et un niveau de convergence partielle fixé à $N = 15$ converge ici en 1.5×10^3 secondes, contre 1.8×10^3 secondes précédemment.

6.2.1.2 Optimisation des couplages hybrides avec convergence partielle

On cherche ici à reproduire l'étude qu'on a menée en section 5.2.4. Pour ne pas alourdir l'exposé, on donne simplement les conclusions de ce travail d'optimisation. Il apparaît nécessaire de distinguer chaque cas d'étude.

Pour le mini-cœur, puisqu'on utilise l'approximation de la diffusion, on peut se permettre d'augmenter l'ordre des accélérations sans craindre un surcoût immédiatement trop important. Le meilleur temps de calcul est obtenu en choisissant $m = 2$ pour l'accélération neutronique dans MINOS, avec $N = 15$ et un lancement après 10 itérations libres (start : 10). Au niveau multiphysique, le couplage est alors réalisé pour l'approche hybride avec l'accélération d'Anderson à l'ordre $m = 5$. Cela aboutit à un temps de calcul total de 1.0×10^3 secondes, pour un total de 139 itérations neutroniques et 10 itérations multiphysiques. Le temps minimal trouvé dans le cas des couplages en boîtes noires, obtenu avec Gauss-Seidel, $N = 50$ et $\alpha = 1$, qu'on peut retrouver tableau 4.1, à savoir 1.1×10^3 est donc battu et le niveau de convergence partielle optimal est, pour l'approche hybride, $N = 15$. On a par ailleurs divisé par plus de 2 le nombre total d'itérations neutroniques réalisées. On retrouve ce résultat dans le tableau 6.1.

Pour KAIST, la bonne stratégie semble être de limiter l'ordre de l'accélération d'Anderson, que ce soit au niveau multiphysique ou neutronique. Le surcoût associé à son utilisation, du fait de la taille des vecteurs résultant de l'approximation SP_3 , est ainsi trop important et n'est pas compensé par les gains en termes de vitesse de convergence qu'on obtient en augmentant l'ordre m de chacune des accélérations d'Anderson. Le meilleur temps de calcul est obtenu en choisissant $m = 2$ pour les deux accélérations d'Anderson, un lancement immédiat pour le problème neutronique, dès la seconde itération neutronique donc, et un niveau de convergence partielle fixé à $N = 15$. Cela aboutit à un temps de calcul total de 14×10^2 secondes, pour en tout 52 itérations neutroniques et 5 itérations multiphysiques. Le niveau de convergence partielle optimal passe donc ici à $N = 15$. On peut noter qu'on n'a pas exploré de niveau de convergence partielle plus bas dans le cadre de ce travail. Ces résultats sont résumés dans le tableau 6.2.

Au-delà de simplement chercher à optimiser finement chaque paramètre pour améliorer la performance des couplages en termes de temps de calcul total (on retomberait alors dans les travers mis en évidence au chapitre 4!), on peut essayer de tirer de cette étape d'optimisation des conclusions générales sur la mise en place de couplage hybride avec convergence partielle. On a vu en section 5.2.4 que le lancement retardé, au bout de 10 itérations neutroniques libres, associé à un ordre élevé pour l'accélération d'Anderson dans MINOS était le plus efficace en termes de vitesse de convergence du problème neutronique. Cette conclusion est basée sur l'étude de la convergence neutronique pour la première itération multiphysique, pour laquelle l'état physique du cœur pour chacun des cas d'études est le plus éloigné *a priori* de sa solution finale.

L'étude du temps de calcul total pour les couplages hybrides montre qu'il semble au contraire plus intéressant de lancer immédiatement l'accélération d'Anderson au niveau neutronique : si on perd en termes de vitesse de convergence neutronique pour les premières itérations multiphysiques, lorsque l'on se rapproche de la solution finale, le lancement rapide de l'accélération semble à l'inverse plus efficace. Cela n'est pas surprenant : loin de la solution finale, on gagne à retarder le lancement de l'accélération pour constituer une mémoire de meilleure qualité, tandis que proche de la solution finale, on peut se permettre d'accélérer immédiatement les premières itérations neutroniques. On peut imaginer dans un futur travail une stratégie de pilotage du lancement de l'accélération basée sur ce type de critère. Du point de vue de l'ordre de la méthode, le choix

est évidemment lié à l'implémentation de l'accélération d'Anderson : du fait du surcoût pour les ordres élevés ($m = 5$ ou $m = 10$), il semble plus intéressant que ce soit au niveau multiphysique ou neutronique de choisir $m = 2$. On perd ainsi en vitesse de convergence, mais on limite le surcoût par itération neutronique et multiphysique.

Le fait que l'approche hybride avec l'utilisation d'Anderson sur le flux neutronique semble garantir une convergence efficace du schéma de couplage et ce même avec des niveaux de convergence faible ($N = 15$) nous pousse à explorer un schéma de couplage *limite*, pour lequel on fixe le niveau de convergence partielle à $N = 1$: on parle alors de couplage bas niveau, qu'on présente dans la suite.

6.2.2 Introduction des couplages bas niveau

L'intérêt de ce type de couplage est d'avoir constamment un état thermohydraulique et thermique correspondant à la nappe de puissance, et ce, à chaque itération neutronique. Par ailleurs, on peut souligner le fait qu'ici, il n'y a plus de distinction entre les accélérations interne à la neutronique et celle multiphysique : les deux ont fusionné et on n'a plus qu'une seule accélération d'Anderson. Cette approche permet de limiter de fait l'amplitude des contre-réactions entre neutronique, thermohydraulique et thermique, tout en garantissant une cohérence entre les champs physiques. Les résultats en termes d'évolution de l'erreur multiphysique et de celle sur la source neutronique sont donnés figure 6.4. On compare ces couplages bas niveau avec le couplage en boîtes noires équivalent, c'est-à-dire Anderson sur la nappe de puissance et $N = 1$, ainsi qu'avec le couplage avec Gauss-Seidel et optimisation du facteur de relaxation et du niveau de convergence partielle, meilleur cas en termes de temps de calcul déterminé au chapitre 4 pour les couplages en boîtes noires.

On a ici directement présenté les résultats pour une accélération déclenchée dès la seconde itération multiphysique.

Il apparaît immédiatement que l'utilisation de l'accélération d'Anderson sur la nappe de puissance pour des couplages en boîtes noires avec $N = 1$ ne permet aucunement d'accélérer le calcul multiphysique. Comme on a pu le noter au cours du chapitre 4, l'utilisation d'Anderson pour ce type de couplage n'est pas compatible avec un niveau trop bas de convergence partielle, c'est-à-dire un nombre d'itérations neutroniques autorisées petit par appel, qui induit la constitution d'une mémoire bruitée et de mauvaise qualité. Cela entraîne une vitesse de convergence multiphysique dégradée et une convergence très bruitée. Notons que pour cette stratégie, on a arrêté les calculs avant d'atteindre la convergence du problème, et qu'ils sont uniquement introduits ici comme illustration. Ces résultats pour chaque cas d'étude sont cohérents avec l'étude réalisée par CATTANEO ET AL. dans [CLM⁺21]. En revanche, l'approche bas niveau (couplage hybride avec $N = 1$) semble, elle, permettre de réduire efficacement le nombre d'itérations neutroniques effectuées : le tableau 6.3 détaille ainsi ces résultats en nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques ainsi qu'en temps de calcul.

Par rapport aux meilleurs cas hybrides pour chaque cœur, que l'on a déterminés à la section 6.2.1.2 et donnés tableaux 6.1 et 6.2, la mise en place de couplage bas niveau permet de réduire encore le nombre d'itérations neutroniques total à effectuer et avec $m = 10$ par exemple, on est capable de converger le problème multiphysique en à peine 50 itérations neutroniques pour le mini-cœur et 29 pour KAIST. Bien sûr, cela signifie en parallèle respectivement 50 et 29 itérations

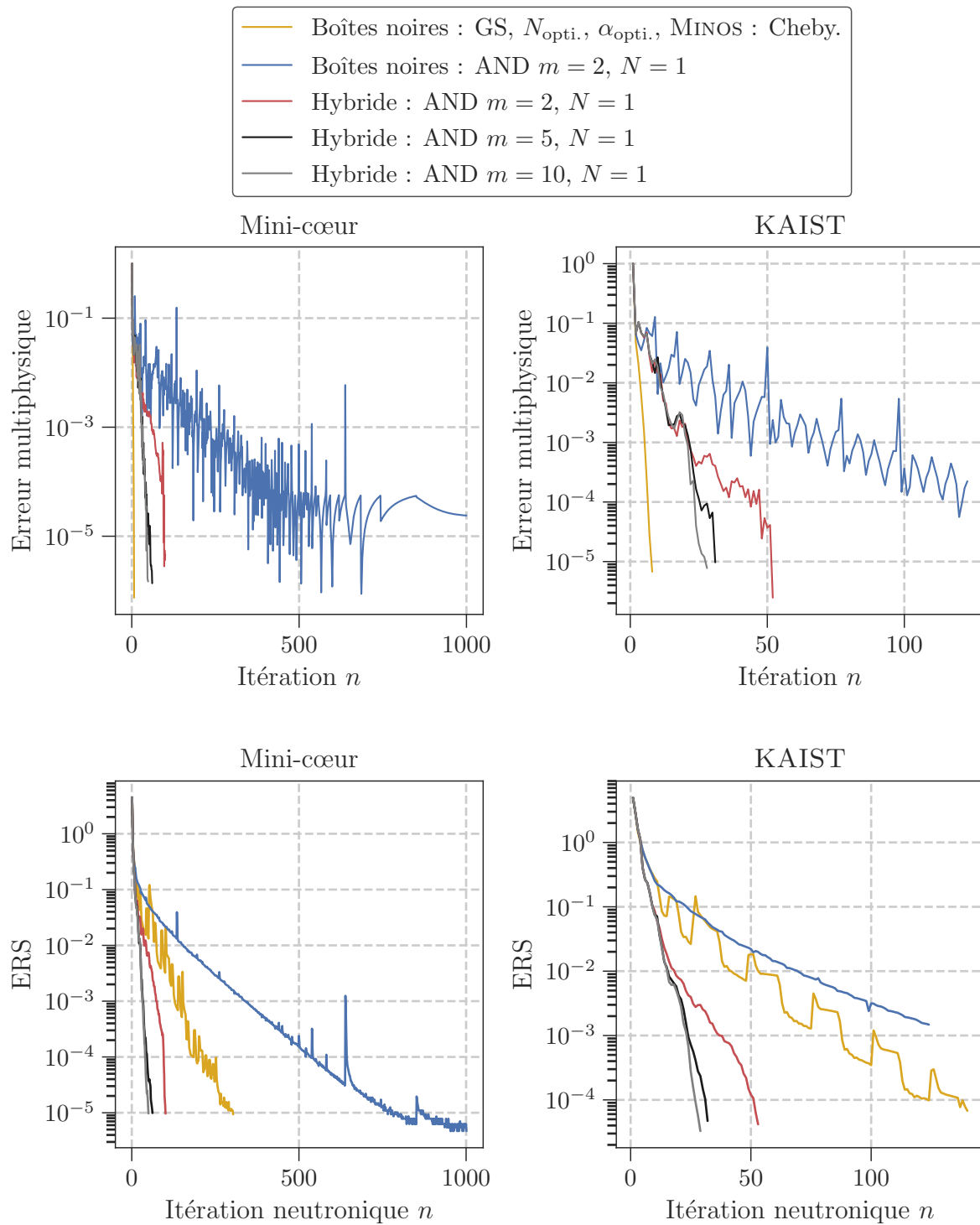


FIGURE 6.4 – Évolution de l’erreur multiphysique et de l’erreur sur la source, notée ERS, au cours du calcul multiphysique pour les couplages bas niveaux, comparaison avec le couplage en boîtes noires optimisé - *les traits pointillés verticaux correspondant à une nouvelle itération multiphysique ne sont pas représentés pour plus de visibilité.*

Remarque : on a arrêté le calcul pour le cas “Boîtes noires : AND $m = 2$, $N = 1$ ” pour les deux cas d’études avant d’atteindre la convergence du problème.

multiphysiques et donc autant d'appels à THEDI. Par ailleurs, on a vu en section 4.1.3 qu'en se plaçant à la solution thermohydraulique, résoudre le problème de neutronique seul pour le mini-cœur, sans contre-réaction donc, nécessitait de réaliser plus de 800 itérations neutroniques avec Chebyshev : on a donc ici divisé par plus de 16 le nombre d'itérations neutroniques à réaliser. Cela semble confirmer que, d'un point de vue neutronique, le couplage avec convergence partielle (ici le couplage bas niveau avec $N = 1$) agisse comme une méthode d'accélération.

Cela entraîne cependant des temps de calcul totaux dégradés dans le cas du mini-cœur. En revanche, dans le cas de KAIST, en choisissant $m = 5$, on est en mesure d'obtenir un temps de calcul total compétitif par rapport au meilleur couplage en boîtes noires initial, déterminé au chapitre 4. C'est dû à la différence de poids relatif entre les solveurs, pour chacun des cas d'étude. Ainsi, pour KAIST, le gain en termes de temps de calcul lié à la réduction du nombre d'itérations neutroniques permet de compenser celui perdu en multipliant les appels au solveur thermohydraulique et thermique, les échanges de données et les appels à l'accélération d'Anderson. En revanche, pour le mini-cœur, le coût d'une itération neutronique est plus faible et donc le gain associé en temps de calcul ne suffit pas à contrebalancer les nombreux appels à THEDI.

La vitesse de convergence multiphysique est évidemment dégradée, puisqu'une itération multiphysique est constituée d'une seule itération neutronique. Cette approche bas niveau a d'après nous deux intérêts : d'une part, elle confirme l'avantage d'appliquer directement les méthodes d'accélération sur le flux et les termes sources de fission, et non pas simplement sur la nappe de puissance. D'autre part, en fonction du coût relatif entre itération neutronique et pas de temps thermohydraulique, la bonne stratégie de couplage peut effectivement être de minimiser le nombre d'itérations neutroniques effectuées. Auquel cas, l'approche bas niveau semble être une méthode prometteuse.

Bilan de la section : Dans cette section, on a montré l'intérêt des couplages hybrides pour accélérer la convergence multiphysique et neutronique du couplage. Le fait de conserver la cohérence entre la nappe de puissance et le flux permet ainsi de gagner en termes de nombre d'itérations neutroniques. Cela se traduit par une diminution du temps de calcul minimal atteignable, ainsi que par des niveaux de convergence partielle optimaux inférieurs à ceux obtenus pour les couplages en boîtes noires équivalents. On a également mis en évidence que le couplage bas niveau, correspondant à un couplage hybride avec une seule itération neutronique autorisée, permettait de minimiser le nombre d'itérations neutroniques à effectuer pour converger le problème multiphysique. Ce type d'approche n'est pas envisageable pour des couplages en boîtes noires, puisqu'alors, l'utilisation de l'accélération d'Anderson sur la nappe de puissance dégrade la convergence du couplage. L'approche hybride semble donc être une approche prometteuse pour réaliser des couplages avec convergence partielle. Dans la suite, on s'intéresse dorénavant à des couplages à convergence fine.

6.3 Optimisation des couplages hybrides à convergence fine

L'objectif de cette section est de déterminer les capacités de l'approche hybride à accélérer les couplages avec convergence fine du solveur neutronique. En effet, on s'est jusqu'ici focalisé sur les

Mini-cœur

Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : GS $N = 50$ et $\alpha = 1$	302	7	1.1×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2, N = 1$	+1 000	+1 000	$+4.0 \times 10^4$
Hybride : Anderson $m = 2, N = 1$	101	101	8.4×10^3
Hybride : Anderson $m = 5, N = 1$	62	62	4.4×10^3
Hybride : Anderson $m = 10, N = 1$	50	50	4.2×10^3

KAIST

Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : GS $N = 25$ et $\alpha = 0.9$	140	8	1.8×10^3
Boîtes noires : Anderson $m = 2, N = 1$	+130	+130	$+7.0 \times 10^3$
Hybride : Anderson $m = 2, N = 1$	53	53	2.6×10^3
Hybride : Anderson $m = 5, N = 1$	32	32	1.8×10^3
Hybride : Anderson $m = 10, N = 1$	29	29	2.0×10^3

TABLEAU 6.3 – Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST pour les approches en boîtes noires et les couplages bas niveau.

couplages avec convergence partielle. Pour rappel, le schéma hybride s'intéresse au point fixe :

$$\left(\phi^{(n+1)}\right) = N\left(\phi^{(n)}, \text{TH}\left(\phi^{(n)}\right)\right).$$

Si, dans le cadre d'un schéma à convergence fine, le flux neutronique calculé par un appel à l'opérateur N ne dépend plus de l'initialisation du solveur, on peut espérer gagner en nombre d'itérations neutroniques en laissant la possibilité à l'accélération d'Anderson de modifier malgré tout la valeur du flux neutronique initial et donc d'améliorer l'initialisation du solveur. Au niveau multiphysique, on s'attend également à ce que l'accélération d'Anderson appliquée au flux neutronique et non à la nappe de puissance permette aussi d'accélérer la convergence du problème. On s'attend donc, en appliquant l'accélération d'Anderson au niveau multiphysique sur le flux final calculé après un appel à MINOS, à une double accélération, à la fois neutronique et multiphysique. On explore cette approche dans cette section.

L'évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur neutronique mesurée sur la source de fission est donnée figure 6.5. On compare ici uniquement des couplages réalisés avec l'accélération d'Anderson, appliquée à la fois pour le problème multiphysique et dans MINOS. On peut retenir qu'en termes de vitesse de convergence multiphysique, l'approche hybride avec convergence fine permet effectivement d'accélérer légèrement la résolution du problème couplé : on gagne ainsi une itération multiphysique, mais le décrochage en termes de vitesse multiphysique, notamment pour KAIST, semble indiquer que, si le problème multiphysique convergeait moins rapidement par exemple, le gain associé à l'utilisation de l'approche hybride avec convergence fine serait plus important. Elle permet également d'économiser quelques itérations neutroniques.

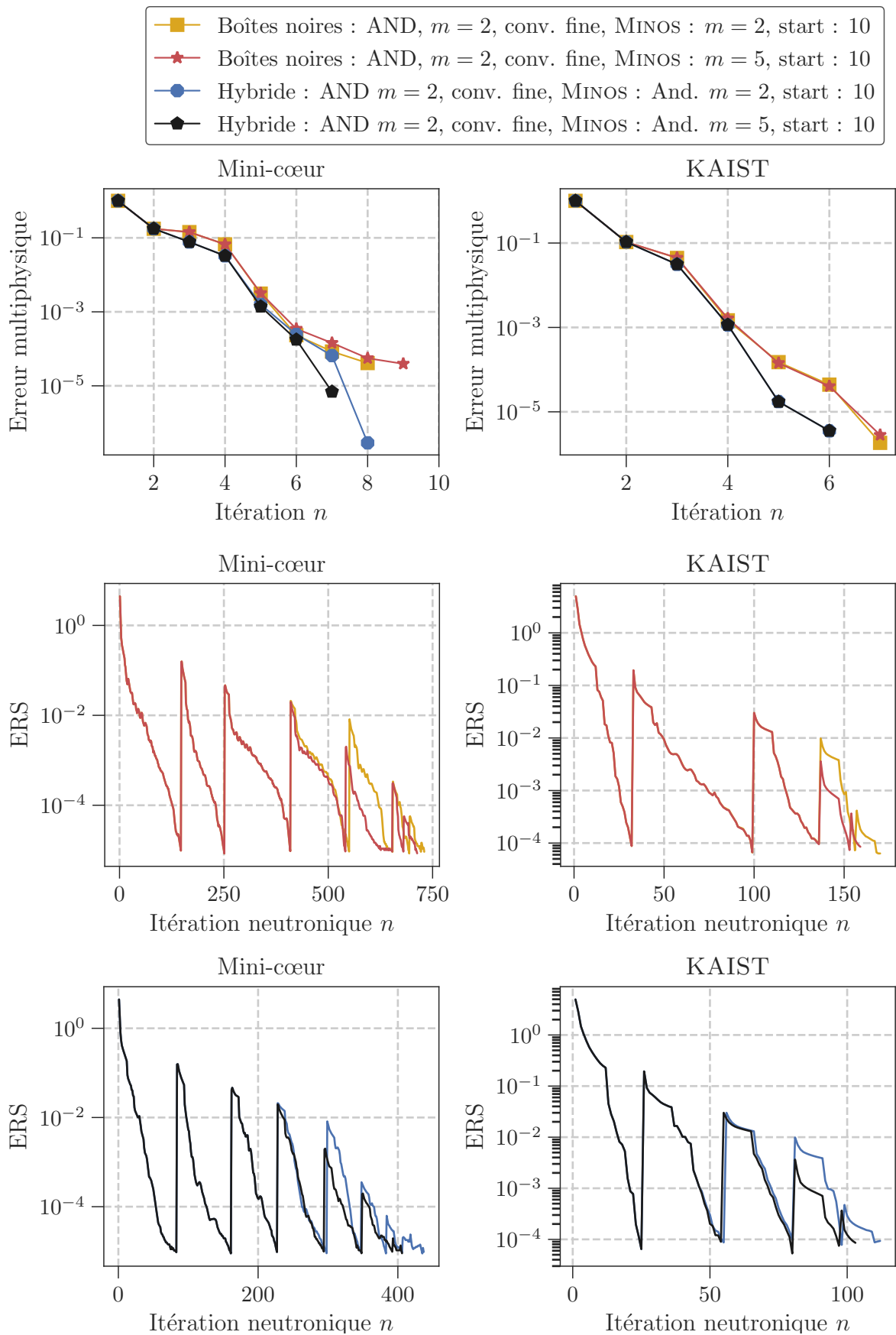


FIGURE 6.5 – Évolution de l'erreur multiphysique et de l'erreur sur la source au cours du calcul multiphysique pour les couplages hybrides et en boîtes noires avec convergence fine.

On donne tableau 6.4 les principaux résultats en termes de temps de calcul notamment. On observe ainsi que la réduction en termes d'itérations neutroniques et multiphysiques qu'on a décrite avec l'approche hybride avec convergence fine s'accompagne généralement d'un léger gain en termes de temps, par rapport aux couplages équivalent en boîtes noires. Il convient ici de rappeler que l'approche hybride est pénalisée par le surcoût associé à l'implémentation de l'accélération d'Anderson : on peut donc s'attendre à un gain futur plus significatif. On obtient dans tous les cas avec l'approche hybride des temps de calculs divisés par deux par rapport aux couplages réalisés avec la méthode de Gauss-Seidel relaxée et convergence fine, qu'on a étudiés au chapitre 4. L'optimisation de la stratégie de lancement de l'accélération d'Anderson multiphysique et de celle neutronique dans MINOS permet de réduire encore ces temps de calcul : pour le mini-cœur, la stratégie "Hybride : And $m = 5$, conv. fine, MINOS : And $m = 10$, start : 2" permet de faire converger le calcul en 15×10^2 secondes, pour 263 itérations neutroniques au total et 7 itérations multiphysiques. Pour KAIST également, cette stratégie permet d'atteindre un temps de calcul total de 23×10^2 secondes, pour 87 itérations neutroniques et 6 itérations multiphysiques. Comme pour les cas avec convergence partielle, il semble intéressant de lancer l'accélération d'Anderson interne à MINOS le plus rapidement possible. Augmenter l'ordre d'Anderson permet par ailleurs d'améliorer la vitesse de convergence, que ce soit au niveau multiphysique ou neutronique. La seule limite est alors le surcoût associé à la construction et mise à jour de la mémoire d'Anderson, comme on l'a déjà vu.

L'intérêt de maintenir la cohérence entre flux et nappe de puissance est illustré à la 5-ième itération multiphysique, correspondant à un peu plus de 500 itérations neutroniques pour le mini-cœur et environ 140 itérations neutroniques pour KAIST. En effet, on observe alors figure 6.5 une remontée limitée de l'erreur sur la source suite à la mise à jour de la thermohydraulique et des sections efficaces. Détaillons ce que cela signifie. On a déjà expliqué que, lors de l'appel de MINOS, les différentes composantes du flux sont initialisées avec les valeurs finales du flux obtenues au précédent appel du solveur. Une nouvelle source de fission est alors calculée à partir de ce flux initial et des nouvelles sections efficaces de fission : on rappelle que la source de fission à l'itération multiphysique n et l'itération neutronique k est donnée par $S_p^{(n,k)} := \sum_g \left(\Sigma_f^{(n),g} \phi_0^{(n,k),g} \right)$ où on a noté $\Sigma_f^{(n),g}$ la section efficace totale de fission du groupe g à l'itération multiphysique n et $\phi_0^{(n,k),g}$ la composante paire de l'harmonique 0 du flux neutronique à l'itération neutronique k de cette même itération multiphysique. Puis le calcul neutronique commence, et à chaque itération neutronique, la source de fission est mise à jour et l'erreur entre celle-ci et la précédente est calculée. Dans le cas d'une accélération d'Anderson multiphysique appliquée à la nappe de puissance, il apparaît donc que les premières erreurs sur la source de fission sont plus élevées que pour les couplages hybrides. Dans le cas d'un couplage en boîtes noires, le flux initial n'étant pas lié à la nappe de puissance ayant servi à mettre à jour les sections efficaces, il apparaît ainsi que les premières itérations neutroniques entraînent des variations plus importantes de sources de fission que lorsque les sections efficaces, la source de fission et le flux neutronique initiaux sont cohérents entre eux.

En termes de nappe de puissance, la différence est donnée figures 6.6 et 6.7 pour le cas du mini-cœur uniquement, la situation étant identique pour KAIST. On a ainsi donné l'évolution des écarts locaux relatifs en termes de nappe de puissance entre un couplage "Hybride : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10" et le couplage en boîtes noires équivalent "Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10". On se permet de noter que les échelles utilisées au sein des figures ne sont pas identiques, sans quoi la clarté des figures auraient été dégradée. On s'intéresse ici aux itérations accélérées, dont on a vu que la première

Mini-cœur

Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 2$, start : 10	730	8	2.3×10^3
Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 5$, start : 10	437	9	2.0×10^3
Hybride : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 2$, start : 10	713	8	2.6×10^3
Hybride : And $m = 5$, conv. fine MINOS : And $m = 5$, start : 10	406	7	1.9×10^3

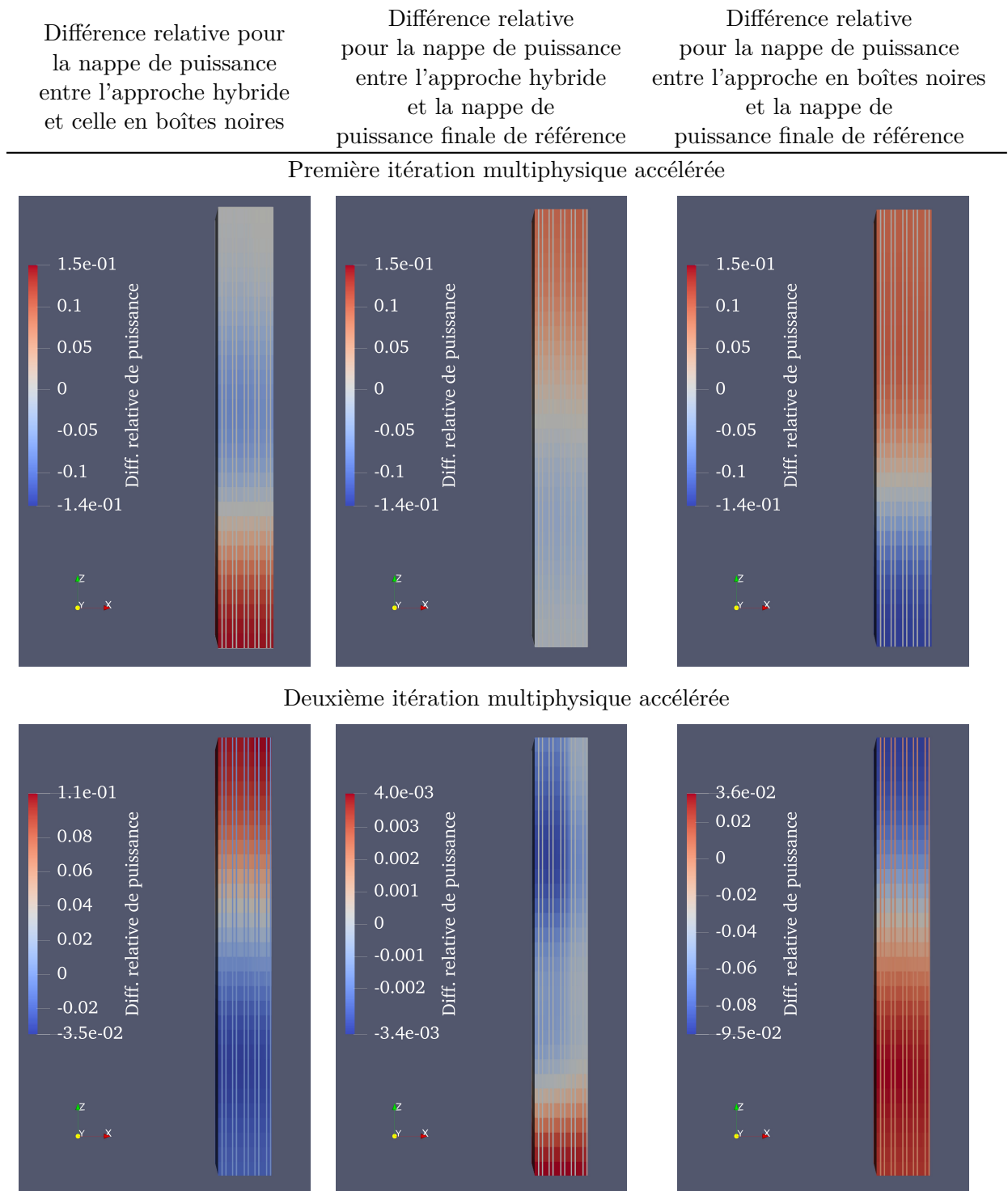
KAIST

Méthode de couplage multiphysique	Nombre d'itérations neutroniques	Nombre d'itérations multiphysiques	Temps total de calcul (en sec.)
Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 2$, start : 10	170	7	4.1×10^3
Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 5$, start : 10	112	7	2.9×10^3
Hybride : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 2$, start : 10	159	6	3.2×10^3
Hybride : And $m = 2$, conv. fine MINOS : And $m = 5$, start : 10	103	6	2.8×10^3

TABLEAU 6.4 – Nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques et temps de calcul total pour le mini-cœur et le problème 1A de KAIST pour les approches en boîtes noires et hybrides avec convergence fine.

correspondait à la 4-*ième* itération multiphysique. On observe ainsi que pour les deux premières itérations accélérées, lorsqu'on est encore relativement éloigné de la nappe de puissance solution multiphysique, la différence d'approche entre un couplage hybride et un couplage en boîtes noires se traduit par des écarts qui vont jusqu'à $\pm 15\%$ entre ces deux stratégies de couplage. Lorsque l'on compare directement avec la solution de référence, qu'on considère être la nappe de puissance obtenue avec un couplage réalisé avec la méthode de Gauss-Seidel relaxé et avec convergence fine, on note que c'est l'approche hybride qui permet d'obtenir des nappes de puissance les plus proches de la nappe finale recherchée. À la deuxième itération accélérée par exemple, il y a un ordre de grandeur en moins en termes d'écart relatif entre l'approche hybride et le calcul de référence qu'entre l'approche en boîtes noires et le calcul de référence. Pour les itérations suivantes, les nappes de puissances obtenues se rapprochent, à mesure que la température effective, la densité du modérateur et le flux neutronique convergent également vers leur solution respective. L'avantage de l'approche hybride, en termes d'accélération de la convergence multiphysique, est donc surtout visible sur les premières itérations accélérées.

La figure 6.8 donne la répartition des erreurs relatives pour la dernière itération multiphysique, et donc l'écart final avec la nappe de puissance multiphysique solution. On remarque que l'approche hybride aboutit à une surestimation de la puissance locale en haut du cœur pour le cas du mini-



La différence relative pour la nappe de puissance entre deux stratégies de couplage \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 est donnée localement par : $\frac{P(\mathcal{S}_1) - P(\mathcal{S}_2)}{P(\mathcal{S}_2)}$, où on a noté $P(\mathcal{S})$ la puissance pour une maille calculée avec la stratégie \mathcal{S} .

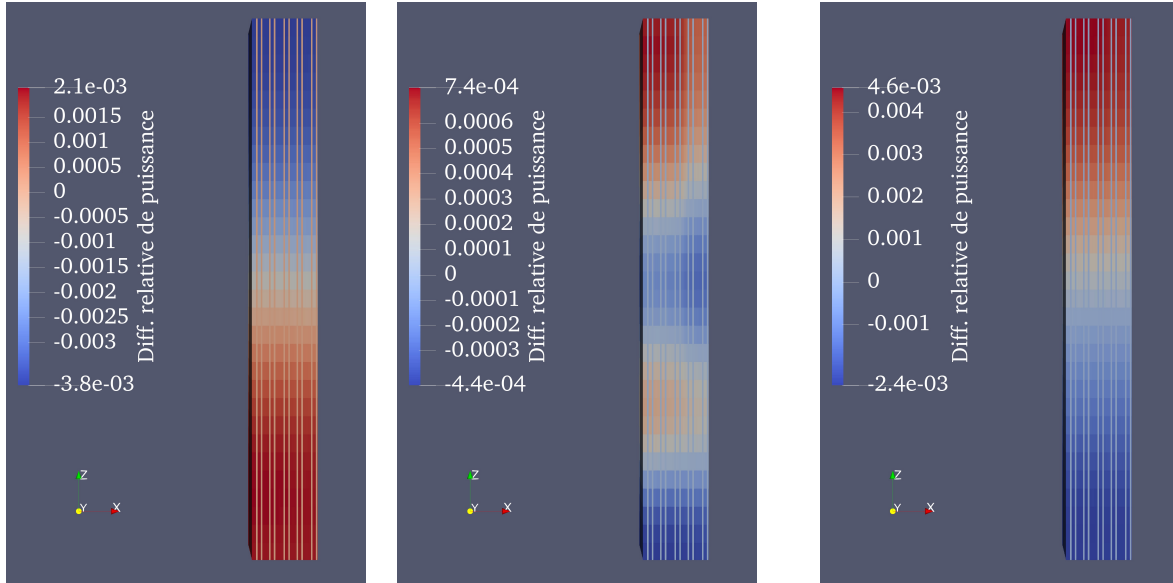
FIGURE 6.6 – Évolution pour le mini-cœur de l'écart relatif pour la nappe de puissance entre un couplage hybride (Hybride : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10) et un couplage en boîtes noires équivalent (Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10) et comparaison avec la nappe de puissance multiphysique solution de référence (Boîtes noires : Gauss-Seidel $\alpha = 0.5$, conv. fine, MINOS : Chebyshev) - première et deuxième itération multiphysique accélérée.

Différence relative pour
la nappe de puissance
entre l'approche hybride
et celle en boîtes noires

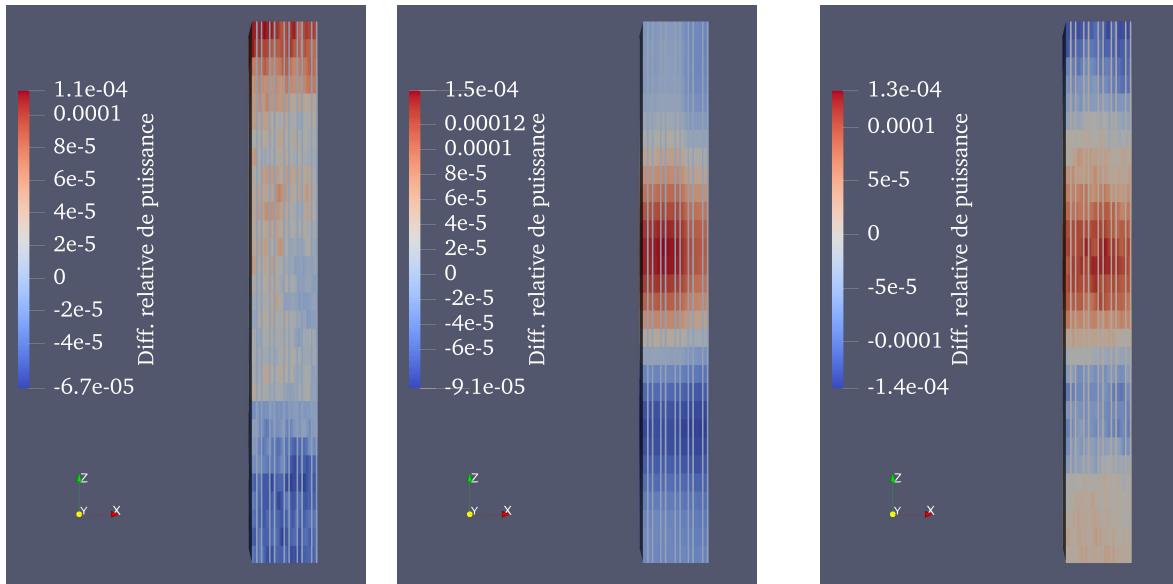
Différence relative
pour la nappe de puissance
entre l'approche hybride
et la nappe de
puissance finale de référence

Différence relative
pour la nappe de puissance
entre l'approche en boîtes noires
et la nappe de
puissance finale de référence

Troisième itération multiphysique accélérée



Quatrième itération multiphysique accélérée

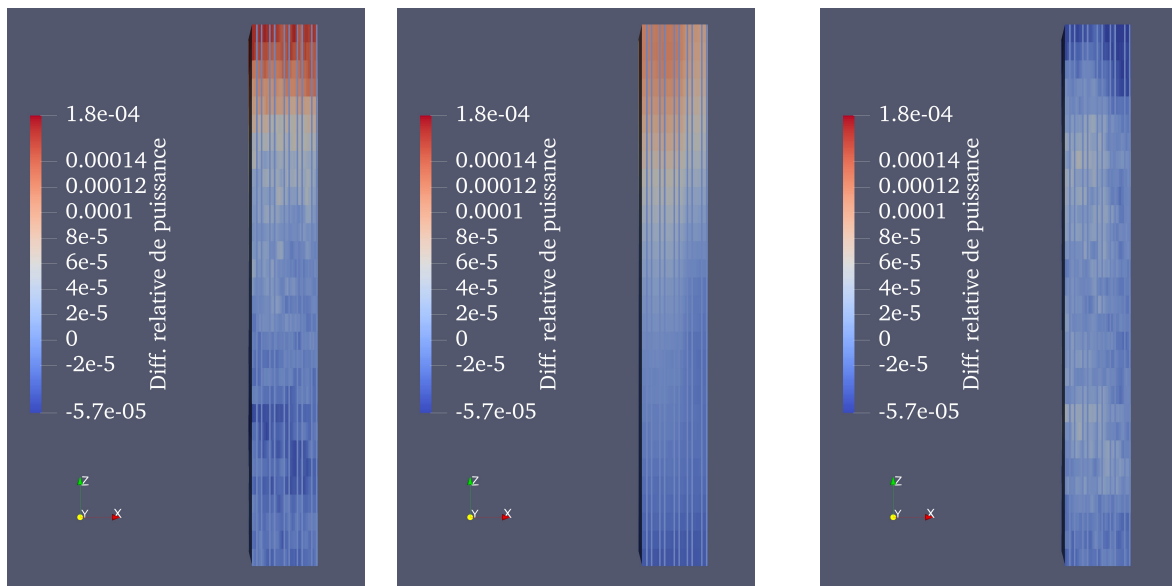


La différence relative pour la nappe de puissance entre deux stratégies de couplage \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 est donnée localement par $\frac{P(\mathcal{S}_1) - P(\mathcal{S}_2)}{P(\mathcal{S}_2)}$, où on a noté $P(\mathcal{S})$ la puissance pour une maille calculée avec la stratégie \mathcal{S} .

FIGURE 6.7 – Évolution pour le mini-cœur de l'écart relatif pour la nappe de puissance entre un couplage hybride (Hybride : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10) et un couplage en boîtes noires équivalent (Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10) et comparaison avec la nappe de puissance multiphysique solution de référence (Boîtes noires : Gauss-Seidel $\alpha = 0.5$, conv. fine, MINOS : Chebyshev) - troisième et quatrième itération multiphysique accélérée.

cœur : cela s'explique par le fait que, dans le cas d'un couplage hybride, la nappe de puissance finale est déterminée à partir d'un flux accéléré, calculé avec les derniers flux multiphysiques. Ce dernier flux accéléré n'est donc pas le résultat d'un calcul neutronique à proprement parler : notamment, il hérite de l'historique des flux précédemment calculés et accélérés, et donc des variations spatiales que ces flux ont connues au cours du calcul multiphysique, puisqu'il est calculé comme une combinaison linéaire des derniers flux calculés.

Différence relative pour la nappe de puissance entre l'approche hybride et celle en boîtes noires	Différence relative pour la nappe de puissance entre l'approche hybride et la nappe de puissance finale de référence	Différence relative pour la nappe de puissance entre l'approche en boîtes noires et la nappe de puissance finale de référence
Dernière itération multiphysique		



La différence relative pour la nappe de puissance entre deux stratégies de couplage \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 est donnée localement par $\frac{P(\mathcal{S}_1) - P(\mathcal{S}_2)}{P(\mathcal{S}_2)}$, où on a noté $P(\mathcal{S})$ la puissance pour une maille calculée avec la stratégie \mathcal{S} .

FIGURE 6.8 – Évolution pour le mini-cœur de l'écart relatif pour la nappe de puissance entre un couplage hybride (Hybride : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10) et un couplage en boîtes noires équivalent (Boîtes noires : And $m = 2$, conv. fine, MINOS : And $m = 2$, start : 10) et comparaison avec la nappe de puissance multiphysique solution de référence (Boîtes noires : Gauss-Seidel $\alpha = 0.5$, conv. fine, MINOS : Chebyshev) - dernière itération multiphysique.

À l'inverse, dans le cas d'un couplage en boîtes noires, on peut remarquer sur le schéma 6.1 que la nappe de puissance finale n'est pas accélérée. C'est le résultat d'un calcul neutronique, et elle n'hérite donc pas des distorsions spatiales de l'historique des derniers flux. Pour améliorer ce point, il est possible de modifier légèrement le schéma de couplage hybride : il s'agit alors, suite au calcul du flux $\phi_{\text{calc}}^{(n)}$ via le calcul neutronique, de déterminer une première nappe de puissance et de vérifier la convergence du problème multiphysique avant l'étape d'accélération sur le flux

multiphysique. Si jamais le problème n'est pas convergé, alors on calcule un flux accéléré $\phi_{acc}^{(n)}$ et une nouvelle nappe de puissance à partir de ce flux accéléré. Cela rajoute donc simplement un calcul de puissance, ce qui est négligeable en termes de temps de calcul par rapport aux autres étapes du schéma de couplage. Ce constat est également valable pour les couplages hybrides avec convergence partielle. Cela devra faire l'objet d'un travail futur, dans le cas où la convergence locale de la nappe de puissance serait souhaitée.

Bilan de la section : Dans cette section, on a validé l'intérêt des couplages hybrides avec convergence fine du solveur neutronique. Cette approche permet en effet d'améliorer la vitesse de convergence multiphysique, ce qui se traduit par une réduction du nombre total d'itérations multiphysiques. Si ce gain ne se traduit pas par une amélioration du temps de calcul par rapport au couplage avec convergence partielle, on réduit malgré tout le temps de calcul total par rapport à l'approche boîtes noires équivalente. Là encore, une optimisation de l'implémentation de l'accélération d'Anderson doit permettre de gagner encore en temps de calcul. Par ailleurs, on a déterminé une amélioration possible du schéma hybride, devant permettre d'obtenir une nappe finale à partir d'un flux neutronique calculé et non accéléré.

6.4 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a mis en place une méthodologie de couplage hybride : du point de vue multiphysique, la grandeur accélérée est alors le flux final issu d'un calcul neutronique et la nouvelle nappe de puissance est calculée à partir de ce flux accéléré avec l'accélération d'Anderson. Cette approche nécessite d'être en mesure de modifier le flux stocké par le solveur neutronique ainsi que d'avoir accès aux m derniers flux et sources de fission calculés et accélérés au cours des dernières itérations multiphysiques. Par rapport à la manière dont sont pensés les solveurs neutroniques, on change ainsi de paradigme, puisque le flux et la source de fission ne sont plus des variables internes au solveur.

L'approche hybride permet alors d'utiliser l'accélération d'Anderson au niveau multiphysique pour n'importe quel niveau de convergence partielle, ce qui n'est pas envisageable lorsqu'on l'applique à la nappe de puissance directement. Ainsi, on est en mesure d'améliorer les temps de calcul optimaux qui ont été déterminés au chapitre 4. Par ailleurs, les niveaux de convergence partielle optimaux sont également diminués : cela s'accompagne d'une réduction du nombre d'itérations neutroniques totales effectuées ainsi que du nombre d'itérations multiphysiques.

Un cas limite de couplage hybride a également été mis en place : il s'agit des couplages bas niveau, pour lesquels une unique itération neutronique est effectuée à chaque itération multiphysique. Cela permet d'avoir une thermohydraulique et une thermique convergées à chaque itération neutronique, réduisant ainsi l'amplitude des contre-réactions et stabilisant de ce fait le schéma de couplage. Cette stratégie de couplage permet de minimiser le nombre d'itérations neutroniques à effectuer. En revanche, cela s'accompagne d'un nombre important d'appels au solveur thermohydraulique. En fonction du poids relatif en termes de coûts de calcul entre une résolution thermohydraulique et thermique et le calcul d'une itération neutronique, cette approche bas niveau peut malgré tout permettre un gain en termes de temps de calcul, comme c'est le cas pour KAIST, en comparaison avec les couplages en boîtes noires par exemple.

Finalement, on a étudié les performances des couplages hybrides avec convergence fine. On a montré que cette approche permet là aussi un gain en termes de vitesse de convergence multiphysique. Du point de vue neutronique, on observe également une légère réduction du nombre d'itérations totales effectuée. En termes de temps de calcul, on n'arrive pas à améliorer les temps de calcul optimaux obtenus avec l'approche hybride et l'introduction d'une convergence partielle optimisée. Malgré tout, les temps obtenus avec convergence fine sont relativement proches des temps optimaux initialement déterminés pour les couplages en boîtes noires.

Il convient ici de prendre un peu de recul par rapport à ces résultats bruts liés aux cas d'étude considérés dans cette thèse. Ainsi, on a montré qu'en règle générale, que ce soit pour un couplage en boîtes noires ou hybride, le lancement immédiat de l'accélération d'Anderson dans MINOS permet de réduire le nombre total d'itérations neutroniques effectuées au cours du calcul multiphysique : si cela ralentit la vitesse de convergence de la neutronique pour les premières itérations multiphysiques, on accélère en contrepartie celle pour les itérations multiphysiques suivantes. Du fait de la convergence rapide du couplage, il convient également de lancer l'accélération multiphysique immédiatement. Le choix de l'ordre de l'accélération d'Anderson pour ces deux niveaux est avant tout lié au surcoût associé à l'utilisation de l'accélération d'Anderson. Que ce soit au niveau multiphysique ou neutronique, augmenter l'ordre m choisi permet d'accélérer la vitesse de convergence. Cela s'accompagne par un surcoût par itération, d'autant plus important que l'ordre est élevé. Lorsqu'on introduit de la convergence partielle à un niveau relativement contraignant ($N = 15$ ou $N = 25$ par exemple), choisir un ordre $m = 2$ pour l'accélération d'Anderson dans MINOS semble être le choix le plus intéressant, car le gain en termes de nombre d'itérations ne permet pas de compenser le surcoût qu'implique l'utilisation d'un ordre plus élevé. Pour des couplages avec convergence fine, la situation s'inverse : choisir $m = 5$ ou $m = 10$ permet d'économiser suffisamment d'itérations neutroniques pour compenser ce surcoût. C'est également vrai pour des couplages hybrides avec $N = 1$, qu'on a appelé couplage bas niveau. Bien sûr, ces considérations en termes de temps de calcul sont intrinsèquement liées à l'implémentation de l'accélération d'Anderson. Une fois celle-ci optimisée, on s'attend à ce que l'utilisation d'un ordre élevé ($m = 5$ par exemple) soit le plus efficace, avec ou sans convergence partielle.

Finalement, on a proposé une manière d'améliorer les couplages hybrides pour que la nappe de puissance finale calculée ne soit pas issue d'un flux accéléré mais bien d'un flux calculé par MINOS, garantissant ainsi une nappe de puissance déterminée à partir d'un flux issu d'un calcul neutronique.

Conclusion de la deuxième partie

Cette partie constitue le cœur de cette thèse et on essaie donc de prendre un peu de recul dès à présent, la suite du manuscrit étant dédiée à une étude plus théorique des algorithmes de couplage.

Le chapitre 4 a été consacré à l'étude des couplages en boîtes noires. En l'état actuel du solveur neutronique MINOS, le contrôle du nombre d'itérations neutroniques est incontournable pour mettre en place des couplages efficaces en termes de temps de calcul.

L'utilisation de la méthode Gauss-Seidel combinée à l'introduction d'une convergence partielle pour le solveur neutronique est particulièrement efficace, et permet de réduire le temps de calcul total tout en accélérant la vitesse de convergence multiphysique d'une part et en limitant le nombre d'itérations neutroniques d'autre part. L'optimisation du niveau de convergence partielle est alors nécessaire si l'on cherche à minimiser le temps de calcul.

Si on souhaite s'extraire d'une convergence partielle fixée à un niveau arbitraire, les algorithmes de type *Residual Balance* d'une manière générale semblent être la voie à suivre. La méthode du *Dynamic Residual Balance*, variante proposée dans cette thèse à la méthode de l'*Adaptive Residual Balance*, permet d'atteindre des temps de calcul proches, en faisant évoluer la précision demandée à chacun des solveurs au cours du couplage. Son principal avantage est de n'avoir aucun paramètre libre à optimiser : il s'agit donc *a priori* d'une méthode simple d'utilisation. Malgré tout, elle nécessite d'avoir accès aux premières erreurs commises par chacun des solveurs à chaque appel, ce qui peut représenter une difficulté.

Les algorithmes d'accélération, comme l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante, appliqués dans le cadre classique des couplages en boîte noire et utilisés avec une convergence partielle des solveurs couplés, sont peu efficaces par rapport à la méthode de Gauss-Seidel avec convergence partielle : c'est dû au fait que la convergence partielle du solveur neutronique modifie la définition du point fixe que l'on accélère. Les itérées accélérées calculées ne sont donc pas pertinentes. La mise en place de méthodes d'accélération permet malgré tout de stabiliser le couplage avec convergence fine des solveurs et de garantir la convergence du calcul couplé, ce qui est en soit un point crucial.

Dans le chapitre 5, on s'est intéressé au solveur neutronique : l'accélération d'Anderson a été implémentée dans MINOS, pour accélérer la convergence du problème à valeur propre neutronique. En s'appuyant sur la relation linéaire entre source de fission et flux, on a été en mesure de diviser par un facteur 3 à 6 le nombre d'itérations neutroniques à effectuer pour faire converger un appel à MINOS tout en limitant le surcoût par itération neutronique associé à l'utilisation d'Anderson dans le solveur neutronique. Grâce à cette nouvelle accélération, les calculs couplés avec convergence fine deviennent compétitifs. Combinée à des méthodes de couplage garantissant la stabilité du schéma de calcul, comme l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante, appliquée au niveau multiphysique sur la nappe de puissance, on est dès lors en mesure de réaliser des simulations

couplées en un temps de calcul raisonnable. De plus, on n'a alors pas à optimiser de paramètre particulier pour permettre la convergence du couplage.

Comme souligné précédemment, la convergence partielle implique un changement de point de vue concernant l'utilisation des méthodes d'accélération : pour assurer leur performance, pour ce qui est d'Anderson ou la méthode de la sécante, il est alors nécessaire de les appliquer au flux neutronique final obtenu après un appel à MINOS, plutôt qu'à la nappe de puissance qui en découle, comme c'est le cas pour les couplages en boîtes noires. Cela nous a poussé à mettre en place au chapitre 6 des couplages intrusifs, qui permettent par ailleurs de maintenir la cohérence entre les champs des grandeurs neutroniques, thermohydrauliques et thermiques, tout au long du couplage.

L'approche hybride nous a permis de réduire efficacement le temps de calcul et d'améliorer les vitesses de convergence neutronique et multiphysique pour des couplages avec convergence partielle. L'utilisation de l'accélération d'Anderson appliquée au flux au niveau multiphysique permet alors bien d'accélérer le couplage par rapport aux couplages en boîtes noires réalisés avec Gauss-Seidel. Cette approche permet de se libérer du risque de sous-résolution qu'on a évoqué dans le cadre des couplages en boîtes noires : ainsi, les couplages bas niveau, correspondant à des couplages hybrides pour lesquels la thermohydraulique et la thermique sont mises à jour à chaque itération neutronique, permettent, eux aussi, de faire converger efficacement le couplage, en minimisant le nombre d'itérations neutroniques effectuées. Les couplages bas niveau s'accompagnent alors d'un grand nombre d'appels au code de thermohydraulique : en fonction du poids relatif entre les solveurs, cette stratégie de couplage peut malgré tout être intéressante en termes de temps de calcul.

Associée à une convergence fine des solveurs, l'approche hybride permet également d'améliorer les vitesses de convergence neutronique et multiphysique du couplage, notamment parce qu'elle permet d'améliorer l'initialisation du solveur de neutronique à chaque appel. Dans tous les cas, ses performances en termes de temps de calcul sont affectés par le double surcoût associé à l'utilisation de l'accélération d'Anderson au niveau neutronique et multiphysique. On s'attend à une amélioration notable en cas d'optimisation de son implémentation.

Finalement, on est effectivement en mesure de proposer une méthodologie de couplage générique entre neutronique, thermohydraulique et thermique. On distingue trois approches qui sont d'après nous prometteuses :

- la première consiste à réaliser des couplages avec convergence fine des solveurs. Dans ce cas, l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS est incontournable : le choix d'un ordre compris entre $m = 2$ et $m = 5$, associé à un lancement rapide de l'accélération, permet d'obtenir des vitesses de convergence neutronique satisfaisantes. Du point de vue multiphysique, il est nécessaire de retenir un algorithme de couplage générique garantissant la stabilité du calcul. L'accélération d'Anderson à un ordre compris entre $m = 2$ et $m = 5$ ou la méthode de la sécante sont toutes indiquées. D'après nous, l'approche hybride est à privilégier : elle permet ainsi une meilleure vitesse de convergence multiphysique. Notons malgré tout que le couplage en boîtes noires avec l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante appliquée à la nappe puissance donnent également des résultats satisfaisants.
- La seconde consiste à réaliser des couplages avec convergence partielle. Alors, l'approche hybride, là encore avec une double utilisation de l'accélération d'Anderson au niveau neutronique et multiphysique, permet, quel que soit le niveau de convergence partielle retenu, de garantir la convergence du problème multiphysique en limitant le nombre d'itérations neutroniques effectuées. Des choix similaires en termes de stratégie de lancement de l'accélération d'Anderson par rapport aux cas avec convergence fine aboutissent à des résultats

satisfaisants. Plus le coût en temps de calcul d'une itération neutronique est important par rapport à un appel du solveur thermohydraulique et thermique, plus le choix d'un niveau de convergence partielle bas semble par ailleurs indiqué, avec pour cas limite le couplage bas niveau.

- La dernière consiste à contrôler la convergence partielle des solveurs en contrôlant simplement la décroissance de la précision qui leur est demandée au cours du calcul multiphysique. Les méthodes de type *Residual Balance* et notamment la variante *Dynamic* développée dans le cadre de cette thèse indiquent une voie à suivre. Celle-ci semble à la fois être celle nécessitant le moins de développement futur, puisqu'on reste alors strictement dans le cadre des couplages en boîtes noires et être celle dont les résultats sont les moins généralisables à l'heure actuelle : il convient en effet, d'après nous, de valider cette approche sur de plus nombreux cas, pour s'assurer d'une vitesse de décroissance satisfaisante des précisions calculées.

Une amélioration au schéma de couplage hybride a également été proposée, pour garantir que la nappe finale de puissance obtenue soit déterminée à partir d'un flux calculé par MINOS et non pas issu d'une étape d'accélération. Cette modification ne change pas la méthodologie présentée ici.

Dans la dernière partie, on se propose d'introduire un problème théorique d'une plaque infinie pour étudier un couplage simplifié entre neutronique et thermohydraulique. À partir de ce cas d'étude, on cherche à justifier des différences de performance entre les différentes approches de couplage étudiées au cours de cette partie.

Troisième partie

Analyse théorique des différentes stratégies de couplage

Table des matières de la partie III

Introduction de la troisième partie	177
7 Preuve du lien entre convergence partielle et relaxation multiphysique pour un couplage en boîtes noires entre neutronique et thermohydraulique	179
7.1 Schéma de calcul couplé pour le problème de la plaque infinie	180
7.1.1 Établissement du problème couplé avec contre-réaction entre neutronique et thermohydraulique	180
7.1.2 Étude des conditions de convergence pour le couplage bas niveau	185
7.2 Lien entre convergence partielle et relaxation dans le cas mono-énergétique	198
7.2.1 Le problème multiphysique de la plaque infinie mono-énergétique avec convergence partielle	198
7.2.2 Établissement du système linéarisé associé au couplage en boîtes noires	199
7.2.3 Influence du niveau de convergence partielle et de la relaxation multiphysique sur la convergence du couplage en boîtes noires	205
7.3 Bilan du chapitre	215
8 Étude des performances des couplages hybrides entre neutronique et thermohydraulique pour une plaque infinie	217
8.1 Établissement du schéma de couplage hybride sur le flux convergé	218
8.2 Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage hybride	219
8.2.1 Linéarisation du schéma de couplage hybride et décomposition des erreurs en série de Fourier	219
8.2.2 Mise en évidence du système reliant les coefficients des séries de Fourier associées aux erreurs pour le couplage hybride	221
8.3 Étude de la convergence du problème multiphysique	222
8.3.1 Lien entre convergence partielle du solveur neutronique et relaxation hybride	222
8.3.2 Résolution du problème multiphysique avec un couplage hybride	223
8.4 Bilan du chapitre	227
9 Étude de l'influence de l'accélération d'Anderson sur les couplages en boîtes noires et hybride pour la plaque mono-énergétique infinie	229
9.1 Impact de l'accélération d'Anderson sur un couplage en boîtes noires	230
9.1.1 Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage en boîtes noires	230

9.1.2	Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage en boîtes noires	231
9.2	Impact de l'accélération d'Anderson sur un couplage hybride	234
9.2.1	Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage hybride	234
9.2.2	Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage hybride	235
9.3	Bilan du chapitre	238
Conclusion de la troisième partie		239

Introduction de la troisième partie

Dans cette partie, on cherche à développer une analyse théorique des différentes stratégies de couplage explorées précédemment entre un solveur neutronique d'une part et un solveur thermohydraulique d'autre part. L'objectif est de proposer quelques explications aux différentes observations faites dans la partie précédente, à propos du lien entre relaxation multiphysique et convergence partielle des solveurs, mais aussi concernant les performances de l'accélération d'Anderson. Ce cadre doit permettre de comparer les couplages haut niveau aux couplages hybrides. Pour les premiers, la grandeur échangée entre les deux solveurs est la nappe de puissance. Dans les seconds, on échange toujours la nappe de puissance entre les solveurs, mais les éventuelles méthodes d'accélération au niveau multiphysique sont appliquées sur le flux neutronique, une fois convergé à chaque itération multiphysique : la nappe de puissance est alors calculée à partir de ces grandeurs neutroniques accélérées, puis transmise à la thermohydraulique. On a en effet observé sur les différents cas d'étude proposés dans la partie précédente que les couplages hybrides semblaient présenter un meilleur comportement, et on a émis l'hypothèse que cela pouvait être dû au fait que la cohérence entre la nappe de puissance et le flux utilisé pour initialiser le problème neutronique était conservée tout au long du calcul multiphysique. On cherche donc notamment à comprendre ce point.

Pour cela, un problème simplifié de couplage est introduit dans un le chapitre 7. Il s'agit d'un problème de transport mono-énergétique pour une plaque infinie. On se donne un modèle de contre-réaction thermohydraulique en introduisant un opérateur thermohydraulique et en définissant une dépendance des sections efficaces à la température du milieu. Cela permet ainsi de rendre compte d'un couplage multiphysique. On détaille ensuite le schéma numérique itératif qu'on utilise pour résoudre ce problème couplé. La démarche permettant de relier les erreurs neutroniques aux erreurs multiphysiques, sur la nappe de puissance donc, est également introduite. Celle-ci est ensuite utilisée pour étudier dans un second temps un problème plus complet dans lequel la notion de convergence partielle est introduite. Le lien avec la relaxation multiphysique est alors explicité : on montre que la convergence partielle agit effectivement comme une relaxation, mais de manière plus complète, en agissant sur l'ensemble des différents termes d'erreurs régissant le problème couplé.

Dans le chapitre 8, la même démarche est appliquée pour analyser les couplages hybrides. On introduit donc cette stratégie de couplage dans un premier temps, et on explicite le système d'équations le caractérisant. On compare ses performances à celles du couplage haut niveau introduit au chapitre 7. Celles-ci ne rejoignant pas les observations faites dans la partie précédente, on discute des apports de cette analyse dans la compréhension des couplages hybrides et on propose quelques explications pour justifier ces différences de comportement. Ainsi, on est malgré tout en mesure de comparer la structure du système d'équations obtenu entre les couplages haut niveau et hybride et on montre qu'introduire une relaxation sur le flux convergé permet d'agir sur l'ensemble des termes d'erreurs, comme c'est le cas avec la convergence partielle.

Enfin, dans le chapitre 9, on introduit l'accélération d'Anderson pour les couplages haut niveau et hybride. En appliquant la même démarche, on arrive à comparer la manière dont évoluent les erreurs au cours du calcul multiphysique entre les deux approches de couplage. On montre que, dans la structure du système obtenu, l'accélération d'Anderson se répercute sur l'ensemble des termes d'erreurs pour un couplage hybride, avec notamment une double accélération visible à chaque itération multiphysique. En comparaison, pour un couplage haut niveau accéléré avec la méthode d'Anderson, seule l'erreur multiphysique est impactée par l'accélération. Cela justifie d'après nous l'intérêt des couplages hybrides.

Chapitre 7

Preuve du lien entre convergence partielle et relaxation multiphysique pour un couplage en boîtes noires entre neutronique et thermohydraulique

L'objectif de ce chapitre est de développer des éléments de preuve théorique du lien entre convergence partielle du problème neutronique et introduction d'une relaxation multiphysique sur la puissance échangée dans un couplage en boîtes noires entre neutronique et thermohydraulique. On étudie pour cela un problème simplifié multiphysique de plaque infinie. L'enjeu est ainsi de développer un cadre analytique permettant de justifier des différentes remarques et constats qui ont été faits dans la partie II consacrées à l'étude des deux couplages numériques entre neutronique et thermohydraulique introduits au chapitre 3. Dans le cadre des couplages en boîtes noires, le lien entre convergence partielle d'un solveur de neutronique et introduction d'une relaxation multiphysique n'a en effet jamais été explicité à notre connaissance. On cherche donc à comprendre comment l'introduction d'une convergence partielle agit sur la convergence du problème multiphysique global et sur sa vitesse de convergence.

On met donc en place section 7.1 un schéma de calcul multiphysique simplifié, dans lequel on définit un couplage sur la puissance neutronique pour une plaque infinie et pour une description neutronique mono-énergétique. Ensuite, dans la section 7.2, le lien entre la convergence partielle de l'opérateur neutronique et le facteur de relaxation multiphysique introduit sur la nappe de puissance pour ce problème couplé est mis en évidence. Les différentes remarques et conclusions proposées dans le cadre du problème mono-énergétique peuvent se généraliser à un problème bi-énergétique : le lecteur intéressé pourra se rapporter à l'annexe D, qui introduit une généralisation de cette étude dans le cas d'un problème neutronique à deux groupes d'énergie, qu'on justifie être représentatif des couplages faisant intervenir une neutronique à G groupes d'énergie.

Sommaire

7.1	Schéma de calcul couplé pour le problème de la plaque infinie	180
7.1.1	Établissement du problème couplé avec contre-réaction entre neutronique et thermohydraulique	180

7.1.1.1	Le problème de transport mono-énergétique pour la plaque infinie	181
7.1.1.2	Définition des contre-réactions entre neutronique et thermohydraulique	182
7.1.1.3	Mise en équation du problème multiphysique avec couplage bas niveau	184
7.1.2	Étude des conditions de convergence pour le couplage bas niveau	185
7.1.2.1	Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage bas niveau	185
7.1.2.2	Conditions générales de convergence du schéma linéarisé	192
7.1.2.3	Apport de la relaxation multiphysique sur la convergence du problème couplé	193
7.2	Lien entre convergence partielle et relaxation dans le cas mono-énergétique	198
7.2.1	Le problème multiphysique de la plaque infinie mono-énergétique avec convergence partielle	198
7.2.2	Établissement du système linéarisé associé au couplage en boîtes noires	199
7.2.2.1	Linéarisation du schéma de couplage en boîtes noires	199
7.2.2.2	Mise en évidence du système régissant les erreurs décomposées en série de Fourier	201
7.2.3	Influence du niveau de convergence partielle et de la relaxation multiphysique sur la convergence du couplage en boîtes noires	205
7.2.3.1	Lien entre convergence partielle et relaxation pour le couplage en boîtes noires	205
7.2.3.2	Réduction du nombre d'itérations multiphysiques <i>via</i> la convergence partielle de l'opérateur neutronique	212
7.3	Bilan du chapitre	215

7.1 Mise en place d'un schéma de calcul couplé pour une plaque infinie et une neutronique mono-énergétique

Dans cette section, on cherche à établir un problème multiphysique simplifié pour une plaque infinie, faisant intervenir une neutronique mono-énergétique et un couplage neutronique/thermohydraulique sur la puissance générée. En effet, c'est sur la nappe de puissance que les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique sont généralement réalisés. On cherche donc à reproduire ce cadre pour un couplage bas niveau, tel que défini au chapitre 4. Ce schéma de calcul doit permettre par la suite d'étudier les différentes stratégies de couplage en boîtes noires dont on a étudié les performances dans la partie II. Pour cela, l'idée a été dans un premier temps de développer un problème couplé pour une plaque infinie rendant compte des contre-réactions entre neutronique, thermohydraulique et thermique *via* le calcul de la puissance générée à l'intérieur de la plaque. On a pour cela modifié le schéma de calcul introduit dans [WA21] suite aux travaux de [KFL17]. Ensuite, la stabilité du couplage bas niveau en fonction du facteur de relaxation introduit sur la nappe de puissance a été étudiée. Pour cela, on a notamment déterminé le système linéarisé régissant l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique au cours du calcul couplé.

7.1.1 Établissement du problème couplé avec contre-réaction entre neutronique et thermohydraulique

On cherche dans ce paragraphe à adapter le schéma de calcul proposé dans [KFL17], et enrichi dans [SCK21], [SK21] et [WA21]. On reprend donc le cas d'étude qui y a été développé et on l'enrichit d'un couplage avec un opérateur thermohydraulique *via* le calcul de la puissance neutronique. Ensuite, on met en évidence les conditions de convergence pour un tel problème couplé.

7.1.1.1 Le problème de transport mono-énergétique pour la plaque infinie

L'équation de transport stationnaire générale a été introduite dans le paragraphe 1.1.1 au chapitre 1. Il s'agit de résoudre, pour un domaine \mathfrak{D} quelconque, en utilisant les notations usuelles, introduites en section 1.1 par exemple, et en supposant qu'on n'a aucune source externe de neutron :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E, T) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= \int_0^\infty \int_0^{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, E' \rightarrow E, T) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' \\ &+ \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi k_{\text{eff}}} \int_0^\infty \int_0^{4\pi} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', T) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE'. \end{aligned}$$

Ce problème étant d'ores et déjà trop complexe, on se restreint au cas particulier de l'équation de transport mono-dimensionnelle, où le flux ne dépend que d'une seule variable d'espace, disons x . On considère également qu'on a un problème mono-énergétique avec une diffusion isotrope ainsi que des conditions de réflexion aux bords de notre domaine, bords qu'on se donne en 0 et X . Le problème étudié est donc celui de la plaque infinie d'épaisseur X . Concernant sa mise en équation, on peut par exemple se référer à [ABG19], pages 11-12 et à l'équation de Boltzmann pour la plaque infinie. On reprend ici quelques grandes lignes, sans expliciter toutes les étapes pour ne pas alourdir la démonstration.

Avec les hypothèses précédentes, en omettant la dépendance en énergie E du fait du caractère mono-énergétique du problème, en se rappelant qu'on considère une diffusion isotrope et en posant $\lambda := \frac{1}{k_{\text{eff}}}$, le problème de transport stationnaire à résoudre se réécrit :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla_x \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{x}, T) \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \left(\Sigma_s(\vec{x}, T) + \lambda \nu \Sigma_f(\vec{x}, T) \right) \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}', E) d\vec{\Omega}'.$$

On peut alors choisir l'axe \vec{x} comme étant l'axe polaire, comme indiqué sur la figure 7.1. Auquel cas, le vecteur unitaire $\vec{\Omega}$ en coordonnées sphériques est donné par :

$$\vec{\Omega} = (\cos(\theta), \sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi)) \text{ avec } 0 \leq \theta \leq \pi \text{ et } 0 \leq \varphi < 2\pi.$$

En effectuant le changement de variable $\mu := \cos(\theta)$ et avec les notations introduites, le problème de la plaque infinie s'écrit finalement :

$$\mu \frac{\psi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x, T) \psi(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s(x, T) + \lambda \nu \Sigma_f(x, T) \right) \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu',$$

avec :

- $\psi(0, \mu) = \psi(0, -\mu)$ pour $0 < \mu \leq 1$,
- $\psi(X, \mu) = \psi(X, -\mu)$ pour $-1 \leq \mu < 0$,
- $\frac{1}{X} \int_0^X \int_{-1}^1 \psi(x, \mu) d\mu dx := \Phi_0$,

où on a normalisé par une constante arbitraire Φ_0 . Comme on l'a vu en section 1.1.1, l'unique solution du problème est alors donnée par le couple $(k_{\text{eff}}, \psi_{\text{solution}}(x) := \frac{\Phi_0}{2})$, et la solution du problème est donc ici homogène.

Pour résoudre le problème neutronique de la plaque infinie ainsi défini, on peut par exemple appliquer la méthode de la puissance itérée qu'on a détaillée au paragraphe 1.1.3.3. Si on suppose

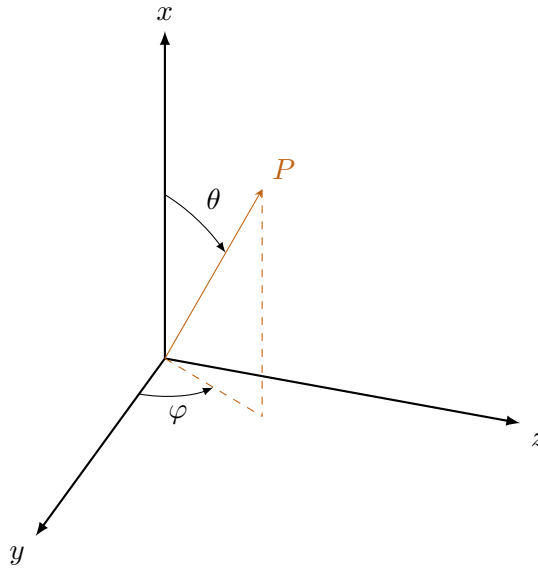


FIGURE 7.1 – Repère sphérique et définition des angles retenus

les sections efficaces constantes, on peut écrire :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \Sigma_i(x) := \Sigma_{i0},$$

pour toutes les réactions considérées. La solution exacte de ce problème est alors donnée, pour tout x dans \mathfrak{D} , par :

- Un flux angulaire homogène sur le domaine : $\psi(x, \mu) := \frac{\Phi_0}{2}$.
- Un flux scalaire homogène sur le domaine : $\phi(x) = \int_{-1}^1 \psi(x, \mu) d\mu = \Phi_0$.
- Des sections efficaces homogènes données par $\Sigma_i(x) = \Sigma_{i0}$.
- Et enfin $\lambda_0 := \frac{1}{k_{\text{eff}}} = \frac{\Sigma_{a0}}{\nu\Sigma_{f0}}$.

On rappelle par ailleurs que $\Sigma_{t0} = \Sigma_{a0} + \Sigma_{s0}$.

Dans ce paragraphe, on a donc défini un problème neutronique *pur* en supposant les sections efficaces constantes : on cherche dans la suite à introduire un opérateur thermohydraulique afin de rendre compte d'un couplage multiphysique.

7.1.1.2 Définition des contre-réactions entre neutronique et thermohydraulique

L'aspect multiphysique passe par l'introduction d'une dépendance des sections efficaces macroscopiques à différents paramètres physiques comme on l'a vu en section 1.1.1. Dans la littérature, on trouve notamment une dépendance des sections efficaces au flux scalaire, qu'on présente dans un premier temps. On introduit ensuite une dépendance des sections efficaces à la température, qui traduit dans les faits la manière dont sont menés les couplages entre thermohydraulique et neutronique.

Dépendance des sections efficaces macroscopiques au flux scalaire Dans [KFL17], le couplage avec la thermohydraulique est explicité comme une dépendance linéaire des sections

efficaces avec le flux scalaire. Cela permet de ne plus avoir de dépendance en température tout en restant général. On a par exemple pour la section efficace macroscopique de diffusion :

$$\Sigma_s(x) := \Sigma_{s0} + \Sigma_{s1}(\phi(x) - \Phi_0).$$

Pour résoudre ce problème multiphysique, on peut utiliser la méthode de la puissance itérée. Il s'agit alors d'itérer jusqu'à ce qu'on atteigne une précision voulue sur le flux scalaire ou angulaire. Si on met à jour à chaque itération la valeur des sections efficaces, on retrouve la définition d'un couplage bas niveau tel que défini au chapitre 6. On peut par ailleurs introduire un facteur de relaxation qu'on note α entre deux itérations de la méthode de la puissance itérée : c'est ce qui est proposé dans [WA21] par exemple. Cette approche ne permet cependant pas d'introduire un opérateur thermohydraulique pour rendre directement compte d'un couplage multiphysique.

Dépendance des sections efficaces macroscopiques à la température Dans le paragraphe précédent, on a présenté un schéma numérique dans lequel on itère jusqu'à ce que le flux scalaire et la valeur propre soient suffisamment proches de la solution, c'est-à-dire dans les faits jusqu'à ce que l'erreur entre deux itérations neutroniques successives soit suffisamment petite. Dans les couplages entre neutronique et thermohydraulique, la grandeur échangée est généralement la nappe puissance neutronique et c'est sur cette grandeur qu'on cherche à converger et à laquelle on applique une éventuelle relaxation. On cherche donc à se rapprocher des études industrielles et des cas numériques qu'on a étudiés au chapitre 4 en introduisant une notion de couplage multiphysique sur la puissance associée au flux scalaire neutronique.

Dans un premier temps, il convient donc de détailler le lien entre la puissance générée par les réactions de fission et le flux scalaire. Le calcul de la puissance $p(x)$ générée en un point x d'un milieu \mathfrak{D} quelconque, caractérisé par une section macroscopique de fission $\Sigma_f(x)$ et dans lequel existe un flux scalaire neutronique $\phi(x)$ est donné par :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, p(x) := R \Sigma_f(x) \phi(x).$$

On a noté R le coefficient de proportionnalité rendant compte de la chaleur moyenne dégagée par une réaction de fission. Typiquement, dans un REP, la quantité d'énergie libérée par une réaction de fission est de l'ordre de 200MeV [KMS04].

On a vu en section 1.1.1 que les sections efficaces macroscopiques d'un milieu dépendaient entre autre de sa température, du *burn-up* si le milieu considéré est du combustible, ou encore de la concentration en poison neutronique, comme le bore. Pour aboutir à un problème multiphysique comparable au couplage étudié au chapitre 4, il convient donc de rendre compte de la dépendance des sections efficaces *a minima* à la température T du milieu \mathfrak{D} correspondant ici au problème de la plaque infinie : cela permet d'introduire un couplage avec la thermohydraulique. On se donne donc dans un premier temps un opérateur thermohydraulique \mathbf{TH} reliant la puissance à la température en tout point de l'espace :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T(x) := \mathbf{TH}(p(x)).$$

Physiquement, pour une nappe de température donnée, on aura également des sections efficaces fixées et donc un flux scalaire imposé. Une nappe de température correspond ainsi également à une nappe de puissance. On peut par conséquent légitimement écrire : $\forall x \in \mathfrak{D}, p(x) = \mathbf{TH}^{-1}(T(x))$.

On note par ailleurs T_0 et \mathbf{P}_0 , respectivement la température et la puissance solution associées au flux scalaire Φ_0 solution du problème ainsi re-défini : pour un flux et des sections efficaces homogènes, on aura alors une nappe de puissance \mathbf{P}_0 homogène et donc une nappe de température T_0 qui le sera également. Finalement, on introduit une dépendance linéaire des sections efficaces macroscopiques du milieu à sa température, donnée par :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \Sigma_i(x) := \Sigma_{i0} + \Sigma_{i1} \left(T(x) - T_0 \right),$$

où $T(x)$ est la température du milieu considéré en x , avec i pouvant valoir t pour la section efficace totale, s pour celle de diffusion, f pour celle de fission et a pour celle d'absorption. Les sections efficaces solutions du problème sont donc bien constantes en espace et données par les Σ_{i0} . On retient ce modèle de contre-réaction dans la suite.

7.1.1.3 Mise en équation du problème multiphysique avec couplage bas niveau

Ce dernier modèle nous permet de décrire la méthode itérative de résolution du problème pour la plaque infinie dans le cas d'un couplage bas niveau avec un opérateur thermohydraulique \mathbf{TH} quelconque. Plaçons-nous à la fin de l'itération multiphysique n par exemple. Celle-ci se décompose de la manière suivante :

1. On commence l'itération $n + 1$ avec, en tout point x de notre domaine \mathfrak{D} , un flux scalaire connu, $\phi^{(n)}$, ainsi qu'une puissance $p^{(n)}$, éventuellement une puissance relaxée $\mathbf{P}^{(n)}$ (on a $p^{(n)} = \mathbf{P}^{(n)}$ en l'absence de relaxation) et une valeur propre $\lambda^{(n)}$
2. On calcule la nouvelle température en fonction de la nouvelle puissance relaxée :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH} \left(\mathbf{P}^{(n)}(x) \right).$$

3. On met à jour les sections efficaces macroscopiques :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \Sigma_i^{(n+1)}(x) = \Sigma_{i0} + \Sigma_{i1} \left(T^{(n+1)}(x) - T_0 \right).$$

4. On fait une itération de transport :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\psi^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(n+1)}(x) \psi^{(n+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s^{(n+1)}(x) + \lambda^{(n)} \nu \Sigma_f^{(n+1)}(x) \right) \phi^{(n)}(x),$$

avec comme conditions aux bords $\psi^{(n+1)}(0, \mu) = \psi^{(n+1)}(0, -\mu)$ pour $0 < \mu \leq 1$ d'une part et d'autre part $\psi^{(n+1)}(X, \mu) = \psi^{(n+1)}(X, -\mu)$ pour $-1 \leq \mu < 0$,

5. On met à jour le flux scalaire et la valeur propre :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \phi^{(n+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(n+1)}(x, \mu') d\mu' \frac{\Phi_0}{\frac{1}{X} \int_0^X \int_{-1}^1 \psi^{(n+1)}(x', \mu) d\mu dx'} \quad (7.1.1)$$

$$\lambda^{(n+1)} = \frac{1 \int_0^X \Sigma_a^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1)}(x) dx}{\nu \int_0^X \Sigma_f^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1)}(x) dx}.$$

6. On calcule la nouvelle puissance ainsi que la puissance relaxée, avec $\alpha \in [0, 1]$ le facteur de relaxation multiphysique choisi :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \begin{cases} p^{(n+1)}(x) &= R\Sigma_f^{(n+1)}(x)\phi^{(n+1)}(x) \\ \mathbf{P}^{(n+1)}(x) &= \alpha p^{(n+1)}(x) + (1 - \alpha)\mathbf{P}^{(n)}(x) \end{cases} .$$

Dans le schéma de résolution tel que décrit ici, on réalise à chaque itération multiphysique n une unique itération de méthode de la puissance itérée pour résoudre le problème de neutronique et le problème à valeur propre associé : il s'agit donc d'un couplage bas niveau, tel que défini au chapitre 6. On introduira dans la suite le schéma numérique rendant compte de la réalisation de K itérations neutroniques à chaque itération multiphysique n puisque comme on l'a vu, dans les couplages entre neutroniques et thermohydrauliques actuels, les sections efficaces sont généralement mises à jour au moment de l'appel du solveur de neutronique puis gardées constantes au cours du calcul neutronique pour lequel on effectue une dizaine d'itérations, pour des raisons de temps de calcul. On se restreint dans un premier temps à ce schéma simplifié pour présenter la démarche générale qu'on mènera ensuite à plusieurs reprises et pour pouvoir étudier quelques cas simples.

Puisqu'on a une méthode de résolution itérative, on va chercher à se ramener à un problème du type $E^{(n+1)} = ME^{(n)}$, où E est un vecteur contenant les erreurs faites sur le flux scalaire et sur la puissance et M une matrice rendant compte de notre schéma numérique. Pour un tel schéma, c'est en effet le rayon spectral ρ de M qui renseigne à la fois sur la convergence du schéma (on doit avoir $\rho < 1$) et sur sa vitesse de convergence. Ainsi, on pourra étudier par exemple l'évolution du rayon spectral de M en fonction du facteur de relaxation α introduit à l'instant.

7.1.2 Étude des conditions de convergence pour le couplage bas niveau

Le problème multiphysique étant dorénavant défini, on cherche à mettre en évidence le rôle joué par l'introduction d'un facteur de relaxation multiphysique sur la stabilité et la vitesse de convergence du schéma de résolution défini au paragraphe 7.1.1.3 : on sait en effet depuis la section 2.1 qu'il existe *a priori* un facteur de relaxation garantissant une vitesse de convergence maximale. Pour cela, on va dans un premier temps déterminer le système linéaire décrivant l'évolution de l'erreur neutronique et ainsi que l'erreur commise sur la puissance, qu'on nommera erreur multiphysique dans la suite, au cours du calcul multiphysique. Une fois les conditions de convergence dudit système explicitées, on vérifie comment l'introduction d'un facteur de relaxation multiphysique permet de stabiliser et d'accélérer la convergence du problème couplé. On se donne donc un opérateur thermohydraulique et on analyse quelques cas limites.

7.1.2.1 Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage bas niveau

La démarche qu'on applique ici va être reproduite à plusieurs reprises dans la suite de la partie III. Elle est donc présentée en détails dans les paragraphes suivants. L'idée est la suivante : on établit, à partir du système introduit au paragraphe 7.1.1.3, un système linéarisé régissant les différentes erreurs du problème. On les décompose ensuite en série de Fourier, ce qui nous permet de traduire le système linéarisé en un système reliant les coefficients amplificateurs de Fourier, associés aux différentes erreurs, entre eux. Cela permet finalement de déterminer pour chaque mode de Fourier les conditions de convergence pour le problème initial. La première étape est donc de linéariser le schéma numérique détaillé au paragraphe 7.1.1.3.

Linéarisation Dans un premier temps, on se place proche de la solution multiphysique homogène. On peut donc introduire les développements limités, pour chaque grandeur, à chaque itération multiphysique n et pour tout point x du domaine \mathfrak{D} :

$$\begin{aligned}\psi^{(n)}(x, \mu) &= \frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon \psi_1^{(n)}(x, \mu) + O(\varepsilon^2), \\ \phi^{(n)}(x) &= \Phi_0 + \varepsilon \phi_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2), \\ p^{(n)}(x) &= \mathbf{P}_0 + \varepsilon p_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2), \\ \mathbf{P}^{(n)}(x) &= \mathbf{P}_0 + \varepsilon \mathbf{P}_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2), \\ T^{(n)}(x) &= T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2), \\ \lambda^{(n)} &= \lambda_0 + \varepsilon \lambda_1^{(n)} + O(\varepsilon^2),\end{aligned}$$

avec $\varepsilon \ll 1$. Les termes d'indices 1 représentent donc les erreurs des itérées courantes par rapport à la solution finale. Comme dans [WA21], on fait l'hypothèse que :

$$\forall n, \lambda_1^{(n)} = 0.$$

Celle-ci n'est pas justifiée dans [WA21]. On a cependant vu que la valeur propre converge beaucoup plus rapidement que la source de fission et le flux au chapitre 5. Cela semble donc justifier le choix d'une erreur nul sur la valeur propre ici. On va expliciter pour chaque grandeur comment l'erreur associée est reliée aux autres erreurs commises.

Erreur sur la nappe de puissance Intéressons-nous dans un premier temps à la nappe de puissance. Au cours de l'itération multiphysique $n + 1$, l'erreur sur la puissance est liée à l'erreur actuelle sur la température et l'erreur existante sur le flux scalaire à la fin de l'itération neutronique. En cas de relaxation, l'erreur précédente réalisée sur la puissance entre également en jeu. Elle est donnée par :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = \alpha \left(R\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R\Sigma_{f0}\phi_1^{(n+1)}(x) \right) + (1 - \alpha)\mathbf{P}_1^{(n)}(x). \quad (7.1.2)$$

Preuve. On a par définition de la puissance p et en substituant les différentes expressions linéarisées dans celle-ci, pour une itération multiphysique n :

$$\begin{aligned}\forall x \in \mathfrak{D}, p^{(n)}(x) &= R\Sigma_f^{(n)}(x)\phi^{(n)}(x) \\ &= \mathbf{P}_0 + \varepsilon p_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2) \\ &= R \left(\Sigma_{f0} + \Sigma_{f1}\varepsilon T_1^{(n)}(x) \right) \left(\Phi_0 + \varepsilon \phi_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2) \\ &= R\Sigma_{f0}\Phi_0 + \varepsilon R \left(\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n)}(x) + \Sigma_{f0}\phi_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

Dont on déduit :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, p_1^{(n)}(x) = R\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n)}(x) + R\Sigma_{f0}\phi_1^{(n)}(x).$$

Et donc :

$$\begin{aligned}\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}^{(n+1)}(x) &= \alpha p^{(n+1)}(x) + (1 - \alpha)\mathbf{P}^{(n)}(x) \\ &= \mathbf{P}_0 + \varepsilon \left(\alpha p_1^{(n+1)}(x) + (1 - \alpha)\mathbf{P}_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

Finalement :

$$\begin{aligned}\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}^{(n+1)}(x) &= \mathbf{P}_0 + \varepsilon \mathbf{P}_1^{(n+1)} + O(\varepsilon^2) \\ &= \mathbf{P}_0 + \varepsilon \left(\alpha (R\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R\Sigma_{f0}\phi_1^{(n+1)}(x)) \right. \\ &\quad \left. + (1 - \alpha)\mathbf{P}_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

Et on obtient donc :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = \alpha \left(R\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R\Sigma_{f0}\phi_1^{(n+1)}(x) \right) + (1 - \alpha)\mathbf{P}_1^{(n)}(x).$$

Erreur sur la température Toujours au cours de l'itération $n + 1$, le calcul de l'erreur sur la température fait uniquement intervenir l'erreur courante sur la nappe de puissance. Elle est donnée par :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T_1^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}_1 \left(\mathbf{P}_1^{(n)}(x) \right). \quad (7.1.3)$$

Preuve. On doit faire certaines hypothèses sur l'opérateur \mathbf{TH}^{-1} que l'on a introduit au paragraphe 7.1.1.2. On peut écrire cet opérateur comme la somme d'un opérateur linéaire et d'un opérateur non-linéaire (au sens algébrique) :

$$\mathbf{TH}^{-1} \equiv \mathbf{TH}_{\text{lin}}^{-1} + \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}.$$

On fait l'hypothèse que $\mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}$ admet un développement limité autour de T_0 , c'est-à-dire, si on se place à une itération multiphysique n et à un point x de \mathfrak{D} :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1} \left(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x) \right) = \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}(T_0) + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}}{\partial T}(T_0) \times T_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2).$$

On a alors :

$$\begin{aligned}\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{TH}^{-1} \left(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x) \right) &= (\mathbf{TH}_{\text{lin}}^{-1} + \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1})(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x)) \\ &= \mathbf{TH}_{\text{lin}}^{-1}(T_0) + \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}(T_0) + \varepsilon \left(\mathbf{TH}_{\text{lin}}^{-1}(T_1^{(n)}(x)) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}}{\partial T}(T_0) \times T_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

On déduit, pour chaque itération multiphysique n :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}_1^{(n)}(x) = \mathbf{TH}_{\text{lin}}^{-1}(T_1^{(n+1)}(x)) + \frac{\partial \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}}{\partial T}(T_0) \times T_1^{(n+1)}(x).$$

En notant

$$\mathbf{TH}_1^{-1}(\cdot) \equiv \mathbf{TH}_{\text{lin}}^{-1}(\cdot) + \frac{\partial \mathbf{TH}_{\text{non}}^{-1}}{\partial T}(T_0) \times \cdot, \quad (7.1.4)$$

on a donc :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}_1^{(n)}(x) = \mathbf{TH}_1^{-1}\left(T_1^{(n+1)}(x)\right). \quad (7.1.5)$$

Ou encore :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T_1^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}_1\left(\mathbf{P}_1^{(n)}(x)\right).$$

Erreur sur les flux neutroniques Finalement, intéressons-nous au problème neutronique. On procède de même que pour la puissance et la température. L'erreur sur chacun des flux fait intervenir l'erreur en cours sur le flux scalaire ainsi que l'erreur sur la température qu'on a calculé au début de l'itération multiphysique. Elle est donnée pour le flux angulaire par :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\psi_1^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0} \psi_1^{(n+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_{t0} \left(\phi_1^{(n)}(x) - \gamma T_1^{(n+1)}(x) \right). \quad (7.1.6)$$

Dont on déduit, à partir de (7.1.1), l'erreur sur le flux angulaire.

Preuve. On injecte les différentes expressions linéarisées dans le problème de transport à l'itération multiphysique n . On a donc :

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\left(\frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon \psi_1^{(n+1)}(x, \mu)\right)}{\partial x} + \left(\Sigma_{t0} + \varepsilon \Sigma_{t1} T_1^{(n+1)}(x)\right) \left(\frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon \psi_1^{(n+1)}(x, \mu)\right) = \\ \frac{1}{2} \left(\Sigma_{s0} + \varepsilon \Sigma_{s1} T_1^{(n+1)}(x) + \lambda_0 \nu \left(\Sigma_{f0} + \varepsilon \Sigma_{f1} T_1^{(n+1)}(x) \right) \right) \left(\Phi_0 + \varepsilon \phi_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2), \end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathfrak{D}, \varepsilon \mu \frac{\psi_1^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0} \frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon \Sigma_{t0} \psi_1^{(n+1)}(x, \mu) + \varepsilon \frac{\Phi_0}{2} \Sigma_{t1} T_1^{(n+1)}(x) = \\ \frac{1}{2} \left(\Sigma_{s0} + \lambda_0 \nu \Sigma_{f0} + \varepsilon \left(\Sigma_{s1} T_1^{(n+1)}(x) + \lambda_0 \nu \Sigma_{f1} T_1^{(n+1)}(x) \right) \right) \left(\Phi_0 + \varepsilon \phi_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Par ailleurs, comme k_{eff} et Φ_0 sont solutions, on a $\Sigma_{s0} + \lambda_0 \nu \Sigma_{f0} = \Sigma_{s0} + \Sigma_{a0} = \Sigma_{t0}$, les termes en $\Sigma_{t0} \frac{\Phi_0}{2}$ se simplifient. Finalement, on identifie les termes en ε et en notant que $\Sigma_{s1} - \Sigma_{t1} = -\Sigma_{a1}$, et que $\lambda_0 \nu = \frac{\Sigma_{a0}}{\Sigma_{f0}}$, on obtient :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\psi_1^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0} \psi_1^{(n+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_{t0} \phi_1^{(n)}(x) + \left(-\Sigma_{a1} + \frac{\Sigma_{a0} \Sigma_{f1}}{\Sigma_{f0}} \right) \Phi_0 T_1^{(n)}(x) \right).$$

En posant, comme dans [KFL17], $\gamma = \frac{1}{\Sigma_{t0}} \left(\Sigma_{a1} - \frac{\Sigma_{a0}\Sigma_{f1}}{\Sigma_{f0}} \right) \Phi_0$, on a finalement :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\psi_1^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0}\psi_1^{(n+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2}\Sigma_{t0} \left(\phi_1^{(n)}(x) - \gamma T_1^{(n+1)}(x) \right).$$

On retrouve la formule proposée dans [KFL17] avec $T_1^{(n+1)}$ à la place de $\Phi_1^{(n)}$ ce qui est cohérent puisqu'on a déplacé les dépendances des sections efficaces macroscopiques du flux vers la température.

Le système rendant compte de l'évolution des erreurs multiphysique, thermohydraulique et neutronique est donc donné par les équations (7.1.2), (7.1.3) et (7.1.6). À chaque itération multiphysique n , on aura ainsi :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \begin{cases} T_1^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}_1(\mathbf{P}_1^{(n)}(x)) \\ \mu \frac{\psi_1^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0}\psi_1^{(n+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2}\Sigma_{t0} \left(\phi_1^{(n)}(x) - \gamma T_1^{(n+1)}(x) \right) \\ \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = \alpha \left(R\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R\Sigma_{f0}\phi_1^{(n+1)}(x) \right) + (1 - \alpha)\mathbf{P}_1^{(n)}(x) \end{cases} \quad (7.1.7)$$

On a bien défini ici l'évolution entre deux itérations multiphysiques n et $n + 1$ des erreurs sur la température, le flux scalaire et angulaire ainsi que sur la puissance au cours de la résolution du problème couplé *via* la méthode de la puissance itérée pour résoudre le problème de neutronique d'une part, et d'autre part, la mise à jour des sections efficaces à chaque itération neutronique. Cette mise à jour est effectuée à la suite de celle de la température du milieu.

On cherche maintenant à étudier les conditions de convergence de ce système. On a affaire à un système linéaire à coefficient constant en espace, avec des conditions de réflexions au bord. On peut donc décomposer les différentes erreurs en série de Fourier et déterminer des conditions suffisantes et nécessaires sur chacun des modes de Fourier associé pour que les erreurs sur la température, la puissance et les flux neutroniques données par le système (7.1.7) décroissent vers 0. Cette analyse est détaillée dans le paragraphe suivant.

Décomposition des erreurs en série de Fourier En se plaçant proche de la solution lors de l'étape de linéarisation, on a obtenu des équations linéaires à coefficients constants en espace : on peut donc introduire les séries de Fourier associées aux différentes grandeurs étudiées. Pour cela, on rappelle qu'on a choisi des conditions aux limites de réflexion, c'est-à-dire $\psi(0, \mu) = \psi(0, -\mu)$ pour $0 < \mu \leq 1$ et $\psi(X, \mu) = \psi(X, -\mu)$ pour $-1 \leq \mu < 0$. On en déduit la condition équivalente pour $\psi_1^{(n)}$, c'est-à-dire $\psi_1^{(n)}(0, \mu) = \psi_1^{(n)}(0, -\mu)$ pour $0 < \mu \leq 1$ et $\psi_1^{(n)}(X, \mu) = \psi_1^{(n)}(X, -\mu)$ pour $-1 \leq \mu < 0$, et ce, à chaque itération multiphysique n . On peut alors introduire les séries de

Fourier associées aux différentes erreurs, en un point x quelconque de \mathfrak{D} :

$$\begin{aligned}\phi_1^{(n)}(x) &:= \sum_{j=0}^{\infty} a^{(n)}(\omega_j, \alpha) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t_0}), \\ \psi_1^{(n)}(x, \mu) &:= \sum_{j=0}^{\infty} b^{(n)}(\omega_j, \alpha, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t_0}), \\ T_1^{(n)}(x) &:= \sum_{j=0}^{\infty} c^{(n)}(\omega_j, \alpha) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t_0}), \\ \mathbf{P}_1^{(n)}(x) &:= \sum_{j=0}^{\infty} d^{(n)}(\omega_j, \alpha) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t_0}),\end{aligned}$$

où les $a^{(n)}(\omega_j, \alpha)$, $b^{(n)}(\omega_j, \alpha, \mu)$, $c^{(n)}(\omega_j, \alpha)$ et $d^{(n)}(\omega_j, \alpha)$ sont les coefficients associés à la fréquence de Fourier ω . Avec les conditions aux limites, on sait que seuls certains modes sont autorisés, à savoir les $\omega_j = j \frac{\pi}{\Sigma_{t_0} X}$, $j = 1, 2, \dots$. Pour des conditions aux limites de symétrie, les fréquences de Fourier autorisées seraient simplement $\omega_j^{\text{sym}} = 2 \times \omega_j$. Comme on l'a expliqué précédemment, on cherche à déterminer le rayon spectral associé au système (7.1.7). En injectant ces expressions dans (7.1.7), on obtient un système sur les coefficients de Fourier. Si on se place à une fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$ et à un point $x \in \mathfrak{D}$ donnés, en simplifiant par $\exp(i\omega x \Sigma_{t_0})$ et en omettant momentanément les dépendances des coefficients de Fourier en ω et α pour alléger les notations, on a :

$$\begin{cases} \mathbf{TH}_1^{-1}(\exp(i\omega x \Sigma_{t_0})) c^{(n+1)} = d^{(n)} \exp(i\omega x \Sigma_{t_0}) \\ \Sigma_{t_0}(1 + i\mu\omega) b^{(n+1)}(\mu) = \frac{1}{2} \Sigma_{t_0} (a^{(n)} - \gamma c^{(n+1)}) \\ d^{(n+1)} = \alpha (R\Sigma_{f_1} \Phi_0 c^{(n+1)} + R\Sigma_{f_0} a^{(n+1)}) + (1 - \alpha) d^{(n)} \end{cases} \quad (7.1.8)$$

On fait ici une hypothèse supplémentaire sur l'opérateur \mathbf{TH}_1^{-1} . On va en effet supposer que :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall \omega \in (\omega_j)_j, \frac{\mathbf{TH}_1^{-1}(\exp(i\omega x \Sigma_{t_0}))}{\exp(i\omega x \Sigma_{t_0})} \text{ est indépendant de } x$$

Cette hypothèse est raisonnable puisque \mathbf{TH}_1^{-1} est linéaire et que l'on a obtenu en linéarisant autour d'un état homogène. On peut ainsi introduire :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall \omega_j, \mathbf{th}_1^{-1}(\omega_j) := \frac{\mathbf{TH}_1^{-1}(\exp(i\omega_j x \Sigma_{t_0}))}{\exp(i\omega_j x \Sigma_{t_0})}.$$

Finalement, on peut réécrire (7.1.8) en :

$$\forall \omega_j, \begin{cases} c^{(n+1)}(\omega_j) = \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega_j)} d^{(n)}(\omega_j) \\ b^{(n+1)}(\omega_j, \mu) = \frac{1}{2(1+i\mu\omega_j)} \left(a^{(n)}(\omega_j) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega_j)} d^{(n)}(\omega_j) \right) \\ d^{(n+1)}(\omega_j) = \left(\alpha \frac{R\Sigma_{f_1} \Phi_0}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega_j)} + 1 - \alpha \right) d^{(n)}(\omega_j) + \alpha R\Sigma_{f_0} a^{(n+1)}(\omega_j) \end{cases} \quad (7.1.9)$$

Mise en évidence du système régissant les erreurs neutronique et multiphysique On peut alors en déduire le système matriciel régissant les erreurs sur le flux scalaire et la puissance neutronique :

$$\forall \omega_j, U^{(n+1)} = A(\omega_j, \alpha)U^{(n)}, \quad (7.1.10)$$

avec d'une part $\forall \omega \in (\omega_j)_j, U^{(n)} := \begin{pmatrix} a^{(n)}(\omega, \alpha) \\ d^{(n)}(\omega, \alpha) \end{pmatrix}$ et d'autre part :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, A(\omega, \alpha) := \begin{pmatrix} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & -\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \\ \alpha R \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & \alpha R \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0 - \gamma \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} + 1 - \alpha \end{pmatrix}.$$

Preuve. Par définition des flux scalaire et angulaire :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, a^{(n)}(\omega) = \int_{-1}^1 b^{(n)}(\omega, \mu) d\mu.$$

Donc on en déduit, en intégrant sur μ l'équation reliant $b^{(n+1)}(\omega, \mu)$ à $a^{(n)}(\omega)$ et $c^{(n)}(\omega)$ dans (7.1.9) :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \int_{-1}^1 b^{(n)}(\omega, \mu) \mu = a^{(n+1)}(\omega) = \left(a^{(n)}(\omega) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \right) \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \frac{1}{1 + i\mu\omega} d\mu.$$

Et finalement :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, a^{(n+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \left(a^{(n)}(\omega) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \right).$$

On peut alors remplacer l'expression de $a^{(n+1)}$ dans la définition de $d^{(n+1)}$ pour obtenir finalement, pour tout ω dans $(\omega_j)_j$:

$$\begin{cases} a^{(n+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \left(a^{(n)}(\omega) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \right) \\ d^{(n+1)}(\omega) = \left(\alpha R \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0 - \gamma \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} + 1 - \alpha \right) d^{(n)}(\omega) + \alpha R \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} a^{(n)}(\omega) \end{cases}.$$

On retrouve comme voulu un algorithme itératif : de (7.1.10), on déduit que la convergence des erreurs sur le flux scalaire, $a^{(n)}(\omega, \alpha)$, et sur la puissance, $d^{(n)}(\omega, \alpha)$, dépend du rayon spectral de $A(\omega, \alpha)$. On aura ainsi convergence de la suite $(U^{(n)})_n$ et décroissance des erreurs vers 0 si le rayon spectral de $A(\omega, \alpha)$ est strictement inférieur à 1.

Par ailleurs, on a vu dans la section 2.1 que l'introduction d'une relaxation dans la résolution d'un problème de type point fixe entraînait une modification du rayon spectral de la jacobienne associée à ce problème, et qu'il existait une valeur optimale de ce facteur de relaxation garantissant une vitesse de convergence maximale, c'est-à-dire un rayon spectral minimal. On retrouve cette dépendance du rayon spectral de $A(\omega, \alpha)$, associée à chaque fréquence de Fourier, au facteur de relaxation α . On a également montré ici que cette même relaxation imposée sur la nappe de puissance influence également l'évolution de l'erreur neutronique *via* le terme en $d^{(n)}$ dans

l'expression de $a^{(n+1)}$, comme attendu dans le cadre d'un problème couplé. On s'intéresse dans la suite aux conditions de convergence du système (7.1.10).

7.1.2.2 Conditions générales de convergence du schéma linéarisé

Pour savoir si le schéma numérique donné par (7.1.10) convergera ou non, on doit déterminer le rayon spectral de $A(\omega, \alpha)$ pour une fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$ donnée. Pour une matrice 2×2 à coefficients réels $A(\omega, \alpha) = \begin{pmatrix} a_{11}(\omega, \alpha) & a_{12}(\omega, \alpha) \\ a_{21}(\omega, \alpha) & a_{22}(\omega, \alpha) \end{pmatrix}$, le polynôme caractéristique est donné par :

$$\chi_{A(\omega, \alpha)}(X) = |A(\omega, \alpha) - X\text{Id}| = X^2 - (a_{11} + a_{22})X + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21},$$

où on a allégé les notations en omettant les dépendances de a_{11} , a_{12} , a_{21} et a_{22} . On en déduit les valeurs propres associées données par :

$$\lambda_{\pm}(\omega, \alpha) = \forall \omega \in (\omega_j)_j, \begin{cases} \frac{a_{11} + a_{22} \pm \sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21}}}{2} & \text{si } \Delta > 0 \\ \frac{a_{11} + a_{22}}{2} & \text{si } \Delta = 0 \\ \frac{a_{11} + a_{22} \pm i\sqrt{-(a_{11} - a_{22})^2 - 4a_{12}a_{21}}}{2} & \text{si } \Delta < 0 \end{cases} .$$

Plaçons-nous dans le cas où on a deux valeurs propres distinctes. On note alors $U_+(\omega, \alpha)$ et $U_-(\omega, \alpha)$ deux vecteurs propres associés respectivement à $\lambda_+(\omega, \alpha)$ et $\lambda_-(\omega, \alpha)$ et on construit la matrice colonne :

$$P = (U_+(\omega, \alpha) | U_-(\omega, \alpha)),$$

telle que :

$$A(\omega, \alpha) = P \begin{pmatrix} \lambda_+(\omega, \alpha) & 0 \\ 0 & \lambda_-(\omega, \alpha) \end{pmatrix} P^{-1}.$$

Et on aura alors :

$$U^{(n)} = P \begin{pmatrix} \lambda_+^n(\omega, \alpha) & 0 \\ 0 & \lambda_-^n(\omega, \alpha) \end{pmatrix} P^{-1} U^{(0)}.$$

Dans notre cas, on a comme coefficient pour la matrice $A(\omega, \alpha)$:

$$A(\omega, \alpha) = \begin{pmatrix} a_{11}(\omega, \alpha) & a_{12}(\omega, \alpha) \\ a_{21}(\omega, \alpha) & a_{22}(\omega, \alpha) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & -\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \\ \alpha R \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & \alpha R \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0 - \gamma \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} + 1 - \alpha \end{pmatrix}.$$

On en déduit donc que :

$$\Delta = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} - \alpha R \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0 + \gamma \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} - 1 + \alpha \right)^2 - 4\alpha \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^2 \frac{\gamma R \Sigma_{f0}}{\text{th}_1^{-1}(\omega)}.$$

On pourra ensuite calculer λ_+ et λ_- et finalement, il y aura convergence si :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \rho(\omega, \alpha) := \max(|\lambda_{\pm}(\omega, \alpha)|) < 1$$

7.1.2.3 Apport de la relaxation multiphysique sur la convergence du problème couplé

Opérateur thermohydraulique proposé Dans la suite, on se donne un opérateur thermohydraulique pour pouvoir réaliser des études numériques. On reprend donc la modélisation proposée dans [WA21]. Ainsi, on introduit une modélisation simplifiée pour l'évolution de la température : celle-ci doit être déterminée en résolvant l'équation de la chaleur et en y incluant à la fois de la conduction thermique et de la convection. On a donc :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} + P(x) = \tilde{h}(T(x) - T_c).$$

Ici, on a noté T_c la température du modérateur, k_{cond} la conductivité thermique et \tilde{h} le coefficient d'échange thermique par convection. Comme souligné dans [WA21], ajouter le terme de convection n'est pas *a priori* correct, puisqu'il s'agit d'un phénomène qui n'est pas volumique. On le garde néanmoins puisqu'un tel traitement devient acceptable si la taille du réacteur est plus importante que la longueur caractéristique de convection, ce qui est le cas en physique des réacteurs. De cette manière, on peut étudier l'impact à la fois de la convection et de la conduction sur la stabilité de notre système couplé, comme fait dans [WA21]. Si ce n'est pas l'objectif ici, on conserve cette modélisation pour pouvoir notamment comparer notre schéma numérique à celui introduit dans [WA21]. On aura, si on se place à une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$:

$$\mathbf{th}_1^{-1}(\omega) = \frac{\mathbf{TH}_1^{-1}(\exp(i\omega \Sigma_{t0} x))}{\exp(i\omega \Sigma_{t0} x)} = k_{\text{cond}}(\Sigma_{t0} \omega)^2 + \tilde{h}, \text{ qui est comme attendu indépendant de } x.$$

Preuve. Identifions les différents termes que nous avons introduits au paragraphe 7.1.1.2. Si on identifie les expressions termes à termes, on a ainsi :

$$\mathbf{TH}^{-1}(\cdot) = -k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 \cdot}{\partial x^2} + \tilde{h}(\cdot - T_c).$$

Et on a donc, pour une itération multiphysique n donnée :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{TH}^{-1}(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x)) = -k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 (T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x))}{\partial x^2} + \tilde{h}(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x) - T_c).$$

C'est-à-dire :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{TH}^{-1}(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x)) = \tilde{h} \times (T_0 - T_c) + \varepsilon \left(-k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 T_1^{(n)}(x)}{\partial x^2} + \tilde{h} \times T_1^{(n)}(x) \right).$$

Par (7.1.5), on a donc, pour tout point x de \mathfrak{D} :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_0 + \varepsilon \mathbf{P}_1^{(n-1)}(x) + O(\varepsilon^2) &= \mathbf{TH}^{-1}(T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2)) \\ &= \tilde{h} \times (T_0 - T_c) + \varepsilon \left(-k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 T_1^{(n)}(x)}{\partial x^2} + \tilde{h} \times T_1^{(n)}(x) \right) + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Et par identification vient :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}_1^{(n-1)}(x) = -k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 T_1^{(n)}(x)}{\partial x^2} + \tilde{h} \times T_1^{(n)}(x).$$

Et donc, d'après (7.1.4) :

$$\mathbf{TH}_1^{-1}(\cdot) = -k_{\text{cond}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{h} \times \cdot.$$

Finalement on a bien :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \mathbf{th}_1^{-1}(\omega) = \frac{\mathbf{TH}_1^{-1}\left(\exp(i\omega \Sigma_{t0}x)\right)}{\exp(i\omega \Sigma_{t0}x)} = k_{\text{cond}}(\Sigma_{t0}\omega)^2 + \tilde{h}.$$

Données utilisées On cherche à étudier la convergence du schéma itératif donné en (7.1.9). On doit donc s'intéresser au rayon spectral ρ de la matrice $A(\omega, \alpha)$. Par définition, il y aura convergence du schéma si :

$$\rho(\omega, \alpha) = \max(|\lambda_{\pm}(\omega, \alpha)|) < 1.$$

On a noté ici $\lambda_{-}(\omega, \alpha)$ et $\lambda_{+}(\omega, \alpha)$ les deux valeurs propres, éventuellement confondues, de la matrice $A(\omega, \alpha)$. Pour pouvoir réaliser des expériences numériques, on reprend les valeurs numériques proposées dans [WA21] qu'on détaille ici : $\Sigma_{t0} = 0.65 \text{cm}^{-1}$, $\Sigma_{f0} = 0.02 \text{cm}^{-1}$, $R\Sigma_{f0}\Phi_0 = 100 \text{W.cm}^{-3}$, $h = 1.0 \text{W.cm}^{-2}.\text{K}^{-1}$, $k_{\text{cond}} = 0.025 \text{W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$, $\frac{\Sigma_{t1}}{\Sigma_{t0}} = 1.0894 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$, $\frac{\Sigma_{s1}}{\Sigma_{s0}} = -1.2617 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$ et finalement on a aussi $\frac{\Sigma_{f1}}{\Sigma_{f0}} = -7.3373 \times 10^{-4} \text{K}^{-1}$. On prend pour valeur de $\frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_{t0}} = 0.3$.

Par ailleurs, pour étudier les variations des valeurs propres et du rayon de convergence en fonction de la fréquence de Fourier et du facteur de relaxation multiphysique, on s'autorise à passer de la famille dénombrable des $(\omega_j)_j$ à une description continue de ω .

Absence de couplage Si on n'introduit dans un premier temps aucun couplage, il s'agit alors simplement de résoudre le problème de neutronique sans mettre à jour les sections efficaces. On est alors dans le cas où $\Sigma_{i1} = 0$ pour $i = t, s, a, f$ et donc $\gamma = 0$. On se place à une fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$. On en déduit :

$$A(\omega, \alpha) = \begin{pmatrix} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & 0 \\ \alpha R\Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & 1 - \alpha \end{pmatrix}.$$

Ici, on calcule, à chaque itération de la méthode de la puissance itérée pour le problème neutronique, une nouvelle puissance, puis une puissance relaxée et on met à jour la température du milieu, sans impacter ensuite les sections efficaces. On voit que la température n'a plus d'impact sur la puissance puisque les termes en $\frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)}$ n'apparaissent plus dans l'expression de $d^{(n+1)}(\omega)$. On a alors :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, d^{(n+1)}(\omega) = R\Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \times a^{(n)}(\omega) + (1 - \alpha) \times d^{(n)}(\omega).$$

C'est attendu, puisque la puissance ne dépend dans ce cas que du flux scalaire, les sections efficaces étant fixées au début du problème. La relaxation dans un tel schéma numérique n'a que peu d'intérêt : dans les faits, on convergerait entièrement le problème neutronique puis on

calculerait la puissance résultante, sans calculer à chaque itération neutronique une puissance relaxée. Du point de vue de la neutronique, on retrouve le résultat attendu pour un tel schéma, à savoir $a^{(n+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} a^{(n)}(\omega)$. Le rayon spectral du problème neutronique est donc dans ce cas $\rho(\omega) = \left| \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right|$ et le terme le plus long à converger est celui correspondant à la plus petite fréquence de Fourier autorisée, à savoir $\omega_1 = \frac{\pi}{\Sigma_{t0}X}$. On a tracé son évolution figure 7.2 : il s'agit de la courbe correspondant à Ref. w/ feedbacks. On retrouve les résultats de [SK21] ou encore [WA21].

Couplage sans relaxation Si on ne relaxe pas la puissance calculée après chaque itération neutronique, on considère alors le cas $\alpha = 1$. On doit alors étudier la matrice :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, A(\omega, 1) = \begin{pmatrix} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & -\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \\ R\Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} & R \frac{\Sigma_{f1}\Phi_0 - \gamma\Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \end{pmatrix}.$$

On étudiera ce cas dans le cas général, mais on peut doré et déjà noter qu'on ne retrouve pas le résultat de [WA21] où la puissance est explicitée dans la relation $\forall x \in \mathfrak{D}, T(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{P}(x))$ lors de la résolution itérative du problème couplé. Ainsi, dans [WA21], on utilise la valeur *future* de la puissance pour mettre à jour la température, lors d'une itération n , c'est-à-dire :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{p}^{(n+1)}(x)).$$

Et le schéma numérique qui est retenu après linéarisation dans [WA21] est donc, à une itération multiphysique n donnée :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \begin{cases} k_{\text{cond}} \frac{\partial^2 T_1^{(n+1)}(x)}{\partial x^2} + \mathbf{p}_1^{(n+1)}(x) = \tilde{h} T_1^{(n+1)}(x) \\ \mu \frac{\psi_1^{(n+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0} \psi_1^{(n+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_{t0} (\phi_1^{(n)}(x) - \gamma T_1^{(n+1)}(x)) \\ \mathbf{p}_1^{(n+1)}(x) = R\Sigma_{f1}\Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R\Sigma_{f0}\phi_1^{(n+1)}(x) \end{cases},$$

où on a indiqué en orange les différences avec le schéma numérique retenu dans ce travail et introduit en (7.1.8). Utiliser la valeur mise à jour à l'itération $n + 1$ de la puissance pour calculer la nouvelle température comme fait dans [WA21] ne permet pas d'introduire une relaxation dans la définition de la puissance comme on le fait dans notre schéma. De plus, cela revient à voir le problème couplé comme se décomposant en :

1. Effectuer un calcul neutronique : on effectue une unique itération de la méthode de la puissance itérée
2. Effectuer un calcul multiphysique : on détermine la nouvelle nappe de puissance et la nouvelle nappe de température de manière couplée.

Cela ne correspond pas aux couplages entre neutronique et thermohydraulique qui sont effectués en pratique : en effet, la puissance est calculée à l'intérieur des codes de neutronique puis est transmise aux codes de thermohydraulique qui déterminent, à partir de la nouvelle nappe de puissance, le nouveau champ de température par exemple. À l'inverse, dans le schéma numérique qu'on a introduit, on rend bien compte de ce processus de couplage qu'on peut résumer en :

1. Calcul de thermohydraulique

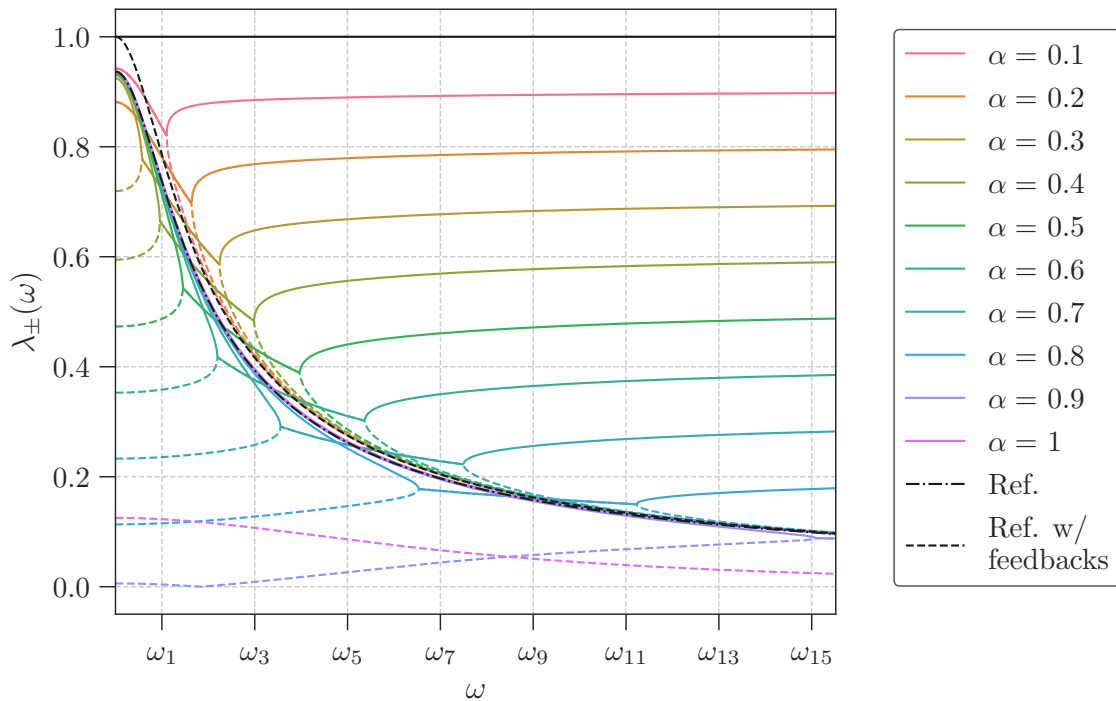


FIGURE 7.2 – Évolution des fonctions $|\lambda_+(\omega, \alpha)|$ (trait plein) et $|\lambda_-(\omega, \alpha)|$ (pointillé), définies au paragraphe 7.1.2.2, en fonction de ω pour différentes valeurs du facteur de relaxation α . La référence sans contre-réaction correspond à $\omega \mapsto \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}$, tandis que la référence correspond aux résultats de [WA21]

2. Mise à jour des sections efficaces
3. Calcul neutronique : on effectue une itération de la puissance
4. Calcul de la nouvelle nappe de puissance et application éventuelle d'une relaxation

Il semble donc plus indiqué d'appliquer le schéma de résolution proposé dans ce travail plutôt que celui proposé par [WA21] pour pouvoir étudier correctement les stratégies de couplage développées dans la partie II.

Cas général pour le problème avec couplage bas niveau L'évolution des fonctions $|\lambda_+(\omega, \alpha)|$ et $|\lambda_-(\omega, \alpha)|$ en fonction de ω et α est donnée figure 7.2. On remarque que pour ce problème simplifié, on n'aura pas de problème de convergence : ainsi, on aura toujours un rayon spectral inférieur à 1 et ce quelle que soit la valeur de ω et le facteur de relaxation α . En fonction du facteur de relaxation, le mode de Fourier qui déterminera la vitesse de convergence varie : ainsi, pour $\alpha > 0.3$, c'est le mode fondamental qui dicte la convergence. Pour $\alpha < 0.3$, on note qu'on a $\rho(\omega_1, \alpha) < \rho(\omega_3, \alpha)$. La vitesse de convergence est donc alors donnée par les fréquences de Fourier plus élevées. D'une manière générale, on observe que l'introduction d'un facteur de relaxation pour la puissance ralentit la convergence des modes de Fourier associés aux harmoniques d'ordre élevé par rapport au cas sans relaxation. En effet, le même facteur de relaxation est introduit pour tous les modes et entraînent donc une sous résolution pour les modes dont la convergence est initialement la plus rapide. C'est cohérent avec la remarque faite à ce sujet dans [KFL17].

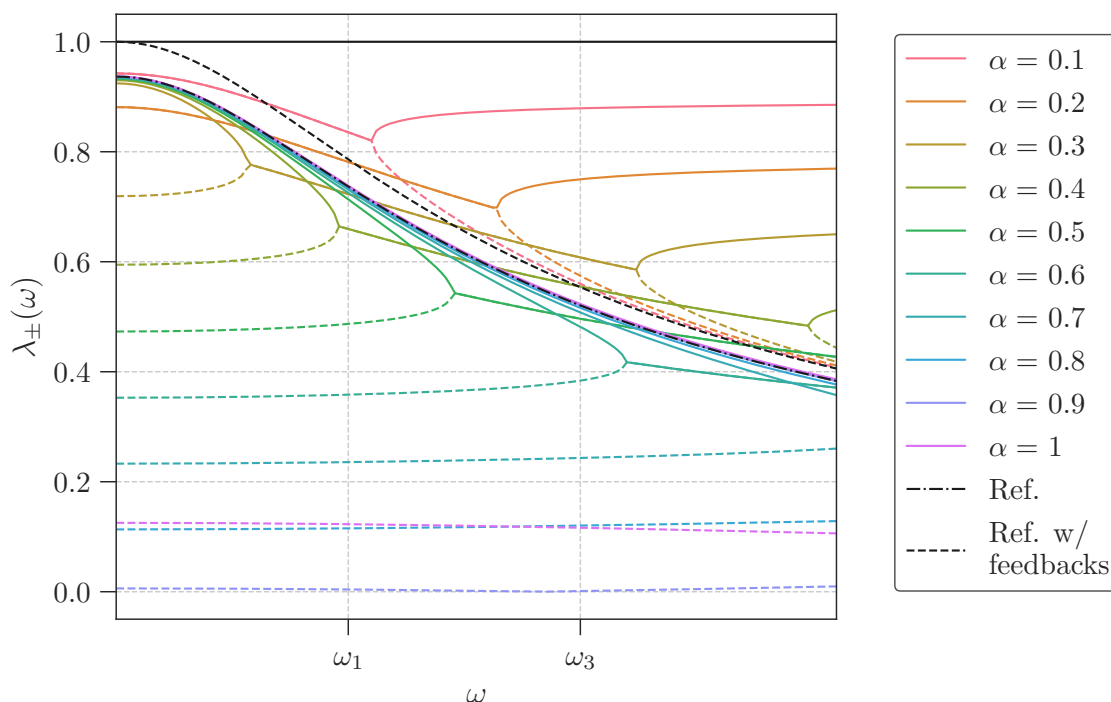


FIGURE 7.3 – Évolution des fonctions $|\lambda_+(\omega, \alpha)|$ (trait plein) et $|\lambda_-(\omega, \alpha)|$ (pointillé), définies au paragraphe 7.1.2.2, pour différentes valeurs du facteur de relaxation α - Zoom autour de la fréquence de Fourier fondamentale. La référence sans contre-réaction correspond à $\omega \mapsto \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}$, tandis que la référence correspond aux résultats de [WA21]

Notons que cela ne signifie pas nécessairement que les modes associés aux fréquences de Fourier plus élevées convergeront en dernier : cela dépend de l'erreur initiale associée à chacun des modes.

Le mode fondamental, associé à la fréquence de Fourier la plus basse, $\omega_1 = \frac{\pi}{\Sigma_{t0}L}$, joue malgré tout un rôle central dans la convergence. Si on zoome autour de la valeur du rayon de convergence pour ω_1 , on observe sur la figure 7.3 qu'on a bien une valeur du coefficient de relaxation optimale, minimisant le rayon spectral. Il s'agirait ici de $\alpha \approx 0.2$. On retrouve bien le résultat théorique attendu concernant l'existence d'une valeur du facteur de relaxation minimisant le rayon spectral de A .

Bilan de la section : On a donc pu dans cette section définir un problème couplé pour la plaque infinie avec une neutronique mono-énergétique et un couplage bas niveau tel que défini au chapitre 6. On a pu étudier la stabilité d'un tel couplage en déterminant le système linéarisé régissant les erreurs réalisées au cours du calcul multiphysique. Cela nous a permis de déterminer la manière dont le facteur de relaxation influe sur le rayon spectral associé au système (7.1.10). Dans la suite, on cherche donc à établir le lien entre convergence partielle de l'opérateur neutronique et relaxation multiphysique, qu'on a observé lors de l'étude des couplages en boîtes noires et hybride dans la partie II.

7.2 Mise en évidence du lien entre convergence partielle de l'opérateur neutronique et relaxation multiphysique dans le cas mono-énergétique

Jusqu'ici, on a étudié un schéma numérique dans lequel on réalise un calcul de thermohydraulique à chaque itération de la méthode de la puissance itérée. Cela correspond au couplage bas niveau qu'on a introduit au chapitre 6. On cherche dans cette section à relier l'introduction d'un facteur de relaxation pour la nappe de puissance à la convergence partielle du solveur neutronique afin d'obtenir quelques éléments de compréhension sur ce lien observé notamment pour les couplages en boîtes noires. On s'intéresse notamment à la manière dont l'introduction de la convergence partielle peut s'accompagner d'une diminution du nombre d'itérations multiphysiques à réaliser pour résoudre le problème couplé. On doit donc être en mesure de rendre compte d'un calcul dans lequel on effectue K itérations neutroniques. Dans cette section, on introduit donc dans un premier temps cette notion de nombre d'itérations de la méthode de la puissance itérée pour l'opérateur neutronique. Après avoir déterminé le nouveau schéma linéarisé régissant l'évolution des erreurs au cours du calcul multiphysique, on met en évidence la manière dont le nombre d'itérations neutroniques influe sur la décroissance des erreurs neutronique et multiphysique et comment cela permet d'accélérer le couplage multiphysique.

7.2.1 Le problème multiphysique de la plaque infinie mono-énergétique avec convergence partielle

Plaçons-nous au début de l'itération multiphysique $n + 1$. Comme expliqué, on introduit dorénavant un nombre d'itérations de la méthode de la puissance itérée utilisée pour résoudre le problème neutronique et le problème à valeur propre associé. Notons $K_{(n+1)}$ ce nombre d'itérations. Celui-ci dépend en effet *a priori* de l'itération multiphysique considérée : dans les solveurs neutroniques comme, par exemple, le solveur MINOS d'APOLLO3®, on itère ainsi avec la méthode de la puissance itérée jusqu'à atteindre une précision souhaitée. Cela correspond à la notion de convergence fine qu'on a étudié dans la partie II. Dans le cas où on utilise la convergence partielle, on aura en fait $\forall i, K_{(i)} = K := \text{cste}$. Le schéma numérique à étudier est le suivant :

1. On commence l'itération $n + 1$ avec un flux scalaire $\phi^{(n)}$ connu ainsi qu'une puissance $p^{(n)}$, une puissance éventuellement relaxée $\mathbf{P}^{(n)}$ (on a $p^{(n)} = \mathbf{P}^{(n)}$ en l'absence de relaxation) et une valeur propre $\lambda^{(n)}$
2. On calcule la nouvelle température pour la nouvelle puissance relaxée :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{P}^{(n)}(x)). \quad (7.2.1)$$

3. On met à jour les sections efficaces macroscopiques :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \Sigma_i^{(n+1)}(x) = \Sigma_{i0} + \Sigma_{i1}(T^{(n+1)}(x) - T_0).$$

4. On fait $K_{(n+1)}$ itérations de transport :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\psi^{(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(n+1)}(x) \psi^{(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_s^{(n+1)} \phi^{(n, K_{(n)})}(x)(x) + \frac{1}{2} \lambda^{(n+1,k)} \nu \Sigma_f^{(n+1)}(x) \phi^{(n, K_{(n)})}(x), \quad (7.2.2)$$

pour $0 \leq k \leq K_{(n+1)} - 1$ avec $\phi^{(n+1,0)} = \phi^{(n,K_{(n)})}$. À chaque itération, on met à jour le flux scalaire et la valeur propre :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \phi^{(n+1,k+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(n+1,k+1)}(x, \mu') d\mu' \frac{\Phi_0}{\frac{1}{X} \int_0^X \int_{-1}^1 \psi^{(n+1,k+1)}(x', \mu) d\mu dx'},$$

$$\lambda^{(n+1,k+1)} = \frac{1 \int_0^X \Sigma_a^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1,k+1)}(x) dx}{\nu \int_0^X \Sigma_f^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1,k+1)}(x) dx}.$$

5. On calcule la nouvelle puissance ainsi que la puissance relaxée à partir des nouveaux flux :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \begin{cases} p^{(n+1)}(x) &= R \Sigma_f^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1,K_{(n+1)})}(x) \\ \mathbf{P}^{(n+1)}(x) &= \alpha p^{(n+1)}(x) + (1 - \alpha) \mathbf{P}^{(n)}(x) \end{cases}.$$

La différence avec le schéma simplifié introduit dans la section précédente est donc simplement liée au fait d'effectuer $K_{(n+1)}$ itérations neutroniques lors de l'itération multiphysique $n + 1$. On a mis en évidence en orange les différences par rapport au système présenté au paragraphe 7.1.1.3. Dans le paragraphe suivant, on met en évidence le système régissant les erreurs neutronique et multiphysique réalisées au cours de ce schéma de couplage.

7.2.2 Établissement du système linéarisé associé au couplage en boîtes noires

L'objectif de ce paragraphe est d'obtenir un système rendant compte de l'évolution de chacune des erreurs effectuées sur la puissance, la température et les flux angulaire et scalaire au cours du calcul multiphysique afin d'étudier l'influence de la convergence partielle sur celles-ci. On reprend donc la démarche menée dans le paragraphe 7.1.2.1.

7.2.2.1 Linéarisation du schéma de couplage en boîtes noires

Comme en 7.1.2.1, on se place proche de la solution et on linéarise les différentes grandeurs qui nous intéressent autour de leur solution respective. Ainsi, pour tout point x dans \mathfrak{D} et à chaque itération multiphysique n on a :

$$p^{(n)}(x) := \mathbf{P}_0 + \varepsilon p_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2),$$

$$\mathbf{P}^{(n)}(x) := \mathbf{P}_0 + \varepsilon \mathbf{P}_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2),$$

$$T^{(n)}(x) := T_0 + \varepsilon T_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2).$$

On introduit par ailleurs, toujours pour tout point x de \mathfrak{D} et à une itération multiphysique n quelconque, le flux angulaire $\psi^{(n,\infty)}(x, \mu)$ et le flux scalaire $\phi^{(n,\infty)}(x)$, respectivement les flux angulaire et scalaire, solutions du problème neutronique à l'itération multiphysique n , c'est-à-dire pour un niveau de puissance $\mathbf{P}^{(n-1)}$, une température $T^{(n)}$ ainsi que pour des sections efficaces $\Sigma_i^{(n)}(T^{(n)})$. Ce sont les flux solutions si on faisait une infinité d'itérations de la méthode de la puissance itérée, c'est-à-dire si $K_{(n)} = \infty$. On peut les linéariser par rapport à la solution globale du problème multiphysique, qu'on a donné au paragraphe 7.1.1.1, pour un point x quelconque de

\mathfrak{D} et à une itération multiphysique n :

$$\begin{aligned}\psi^{(n,\infty)}(x, \mu) &:= \frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon \psi_1^{(n)}(x, \mu) + O(\varepsilon^2), \\ \phi^{(n,\infty)}(x) &:= \Phi_0 + \varepsilon \phi_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

Les flux $\psi_1^{(n)}(x, \mu)$ et $\phi_1^{(n)}(x)$ correspondent aux erreurs faites entre le flux angulaire (respectivement scalaire) solution du problème multiphysique global et celui solution du problème tel que décrit à l'itération multiphysique n , correspondant donc comme on l'a vu à un niveau de puissance $\mathbf{P}^{(n-1)}$ et à une température $T^{(n)}$. À l'intérieur d'une itération multiphysique n , on peut également linéariser les flux angulaire et scalaire à l'itération k de la méthode de la puissance itérée par rapport aux flux convergés $\psi^{(n)}(x, \mu)$ et $\phi^{(n)}(x)$ correspondant à cette même itération multiphysique, que l'on vient d'introduire. On aura, pour un point x de \mathfrak{D} et à une itération multiphysique n donnée :

$$\begin{aligned}\psi^{(n,k)}(x, \mu) &:= \psi^{(n,\infty)}(x, \mu) + \varepsilon \tilde{\psi}_1^{(n,k)}(x, \mu) + O(\varepsilon^2), \\ \phi^{(n,k)}(x) &:= \phi^{(n,\infty)}(x) + \varepsilon \tilde{\phi}_1^{(n,k)}(x) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}$$

Les flux $\tilde{\phi}_1^{(n,k)}(x)$ et $\tilde{\psi}_1^{(n,k)}(x, \mu)$ correspondent ainsi aux erreurs à l'itération multiphysique n entre d'une part les flux de l'itérée courante k de la méthode de la puissance itérée et d'autre part ceux solutions du problème neutronique à cette même itération multiphysique n . En substituant les expressions linéarisées de $\psi^{(n,\infty)}(x, \mu)$ et $\phi^{(n,\infty)}(x)$ dans les définitions de $\psi^{(n,k)}(x, \mu)$ et $\phi^{(n,k)}(x)$, on obtient finalement :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 1, \begin{cases} \psi^{(n,k)}(x, \mu) &= \frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon (\psi_1^{(n,\infty)}(x, \mu) + \tilde{\psi}_1^{(n,k)}(x, \mu)) + O(\varepsilon^2) \\ \phi^{(n,k)}(x) &= \Phi_0 + \varepsilon (\phi_1^{(n,\infty)}(x) + \tilde{\phi}_1^{(n,k)}(x)) + O(\varepsilon^2) \end{cases} . \quad (7.2.3)$$

Par ailleurs, on a en linéarisant directement $\psi^{(n,k)}$ et $\phi^{(n,k)}$ autour de leurs solutions respectives :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 1, \begin{cases} \psi^{(n,k)}(x, \mu) &= \frac{\Phi_0}{2} + \varepsilon \psi_1^{(n,k)}(x, \mu) + O(\varepsilon^2) \\ \phi^{(n,k)}(x) &= \Phi_0 + \varepsilon \phi_1^{(n,k)}(x, \mu) + O(\varepsilon^2) \end{cases} ,$$

dont on déduit par identification avec (7.2.3) :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 1, \begin{cases} \psi_1^{(n,k)}(x, \mu) &= \psi_1^{(n,\infty)}(x, \mu) + \tilde{\psi}_1^{(n,k)}(x, \mu) \\ \phi_1^{(n,k)}(x) &= \phi_1^{(n,\infty)}(x) + \tilde{\phi}_1^{(n,k)}(x) \end{cases} . \quad (7.2.4)$$

Si on résume, on vient ici de décomposer, pour chacun des flux scalaire et angulaire, l'erreur faite à l'itération k de la méthode de la puissance itérée et à l'itération multiphysique n par rapport à la solution globale du problème multiphysique comme étant la somme :

- D'une erreur entre le flux scalaire, respectivement angulaire, solution du problème neutronique à l'itération multiphysique n et le flux scalaire, respectivement angulaire, solution du problème multiphysique globale.
- D'une erreur entre le flux scalaire, respectivement angulaire, calculée à l'itération neutronique k de la méthode de la puissance itérée et le flux scalaire, respectivement angulaire, solution à la même itération multiphysique n .

On peut alors substituer les différentes variables linéarisées dans le schéma numérique qu'on a introduit au paragraphe précédent. On obtient alors le système suivant, pour un point x de \mathfrak{D} quelconque et pour une itération multiphysique n :

$$\forall k < K_{(n+1)}, \left\{ \begin{array}{l} T_1^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}_1(\mathbf{P}_1^{(n)}(x)) \\ \mu \frac{\psi_1^{(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0} \psi_1^{(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_{t0} (\phi_1^{(n+1,k)}(x) - \gamma T_1^{(n+1)}(x)) \\ \phi_1^{(n+1,k+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi_1^{(n+1,k+1)}(x) d\mu \\ \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = \alpha (R\Sigma_{f1} \Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R\Sigma_{f0} \phi_1^{(n+1, K_{(n+1)})}(x)) + (1 - \alpha) \mathbf{P}_1^{(n)}(x) \end{array} \right. \quad (7.2.5)$$

On a décrit ici le système régissant l'évolution des différentes erreurs de nos grandeurs physiques au cours de la résolution du problème multiphysique, lorsqu'on se place proche de la solution globale du problème couplé.

7.2.2.2 Mise en évidence du système régissant les erreurs décomposées en série de Fourier

Le cadre de l'étude étant resté inchangé, on peut introduire les séries de Fourier des différentes erreurs définissant le système (7.2.5). On note x un point de \mathfrak{D} quelconque et on introduit comme en section 7.2.1 les fréquences de Fourier $(\omega_j)_j$, définis de la même manière que dans la section 7.1.2 et on note $K_{(n)}$ le nombre maximal d'itérations autorisées pour la méthode de la puissance itérée à l'itération multiphysique n . On définit alors les séries de Fourier associées aux différentes erreurs qu'on a introduites dans le paragraphe précédent :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 1, \left\{ \begin{array}{l} \phi_1^{(n, \infty)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} a^{(n, \infty)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \\ \tilde{\phi}_1^{(n, k)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{a}^{(n, k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \\ \psi_1^{(n, \infty)}(x, \mu) := \sum_{j=0}^{\infty} b^{(n, \infty)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \\ \tilde{\psi}_1^{(n, k)}(x, \mu) := \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{b}^{(n, k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \\ T_1^{(n)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} c^{(n)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \\ \mathbf{P}_1^{(n)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} d^{(n)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \end{array} \right. .$$

De la même manière, on a :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 1, \forall k \leq K_{(n)}, \left\{ \begin{array}{l} \phi_1^{(n, k)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} a^{(n, k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \\ \psi_1^{(n, k)}(x, \mu) := \sum_{j=0}^{\infty} b^{(n, k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}) \end{array} \right. .$$

Plaçons-nous pour la suite à une itération k de la méthode de la puissance itérée au cours de l'itération multiphysique $n + 1$ ainsi qu'à une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$. En substituant dans le système (7.2.5) les différentes grandeurs par leur série de Fourier associée, on obtient en identifiant les termes pour une fréquence de Fourier ω donnée :

$$\begin{cases} c^{(n+1)}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \\ b^{(n+1,k+1)}(\omega, \mu) = \frac{1}{2} \frac{1}{(1+i\mu\omega)} \left(a^{(n+1,k)}(\omega) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \right), & \text{pour } 0 \leq k \leq K_{(n+1)} - 1 \\ a^{(n+1,k+1)}(\omega) = \int_{-1}^1 b^{(n+1,k+1)}(\omega, \mu) d\mu, & \text{pour } 0 \leq k \leq K_{(n+1)} - 1 \\ d^{(n+1)}(\omega) = \left(\frac{\alpha R \Sigma_{f1} \Phi_0}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} + 1 - \alpha \right) d^{(n)}(\omega) + \alpha R \Sigma_{f0} a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) \end{cases} \quad (7.2.6)$$

Le système reliant les différents coefficients de Fourier des erreurs sur le flux scalaire et la puissance dans le cas où on effectue $K_{(n+1)}$ itérations de la méthode de la puissance itérée pour résoudre le problème de neutronique à chaque itération multiphysique se déduit de (7.2.6). Tout calcul fait, on obtient le schéma itératif sur les erreurs neutronique et multiphysique :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \forall n \geq 0, U^{(n+1)}(\omega, \alpha, K_{(n)}) = A(\omega, \alpha, K_{(n+1)}) U^{(n)}(\omega, \alpha, K_{(n)}), \quad (7.2.7)$$

avec d'une part

$$U^{(n)}(\omega, \alpha, K_{(n)}) := \begin{pmatrix} a^{(n)}(\omega, \alpha, K_{(n)}) \\ d^{(n)}(\omega, \alpha, K_{(n)}) \end{pmatrix},$$

et d'autre part pour $A(\omega, \alpha, K_{(n+1)})$:

$$A := \begin{pmatrix} \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} & - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \\ \alpha R \Sigma_{f0} \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} & \frac{\alpha R \Sigma_{f1} \Phi_0}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} - \frac{\alpha R \gamma \Sigma_{f0}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} + 1 - \alpha \end{pmatrix}.$$

Preuve. Des définitions des erreurs sur les flux et par (7.2.4), on a immédiatement :

$$\forall n \geq 1, \forall k \leq K_{(n)}, \forall \omega \in (\omega_j)_j, \begin{cases} a^{(n,k)}(\omega) = a^{(n,\infty)}(\omega) + \tilde{a}^{(n,k)}(\omega) \\ b^{(n,k)}(\omega, \mu) = b^{(n,\infty)}(\omega, \mu) + \tilde{b}^{(n,k)}(\omega, \mu) \end{cases} \quad (7.2.8)$$

Si on intègre selon μ l'équation reliant $b^{(n+1,k+1)}(\omega, \mu)$ à $a^{(n+1,k)}(\omega)$ dans (7.2.6), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 b^{(n+1,k+1)}(\omega, \mu) d\mu = a^{(n+1,k+1)}(\omega) &= \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \frac{1}{(1+i\mu\omega)} \left(a^{(n+1,k)}(\omega) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \right) d\mu \\ &= \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \left(a^{(n+1,k)}(\omega) - \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n)}(\omega) \right). \end{aligned}$$

Dont on déduit que :

$$a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} a^{(n+1, 0)}(\omega) - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \left(\sum_{\ell=0}^{K_{(n+1)}-1} \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^\ell \right) d^{(n)}(\omega),$$

c'est-à-dire :

$$a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} a^{(n+1, 0)}(\omega) - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}(\omega).$$

Or, on initialise le flux scalaire à la nouvelle itération multiphysique $n + 1$ avec le flux scalaire final de l'itération multiphysique n , c'est-à-dire :

$$a^{(n+1, 0)}(\omega) = a^{(n, K_{(n)})}(\omega).$$

Finalement :

$$a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} a^{(n, K_{(n)})}(\omega) - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}(\omega). \quad (7.2.9)$$

En combinant (7.2.9) et (7.2.6), il vient immédiatement (7.2.7)

On peut aller un peu plus loin dans l'analyse et expliciter les différentes composantes des erreurs constituant $a^{(n+1, K_{(n+1)})}$. On sait ainsi que la méthode de la puissance itérée converge vers la solution du problème neutronique. Cela signifie que, à l'itération multiphysique $n + 1$, l'erreur entre le flux scalaire à l'itération k de la méthode de la puissance itérée et le flux scalaire solution de l'itération multiphysique n tend vers 0. Autrement dit :

$$\forall n, \lim_{k \rightarrow \infty} a^{(n, k)}(\omega) = a^{(n, \infty)}(\omega) \text{ et donc par (7.2.8) } \forall n, \lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{a}^{(n, k)}(\omega) = 0.$$

On en déduit en prenant la limite pour $K_{(n+1)} \rightarrow \infty$ dans (7.2.9), que :

$$a^{(n+1, \infty)}(\omega) = - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{1}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}(\omega).$$

L'erreur finale entre le flux scalaire convergé à l'itération multiphysique $n + 1$ et le flux scalaire solution du problème multiphysique global, c'est-à-dire $a^{(n+1, \infty)}$, ne dépend donc que de l'erreur faite sur la nappe de puissance à l'itération multiphysique n : c'est un résultat attendu puisqu'on sait que la méthode de la puissance converge vers la bonne solution à l'intérieur d'une itération multiphysique donnée. L'écart entre le flux scalaire parfaitement convergé à une itération multiphysique donnée et le flux scalaire solution du problème global ne peut donc

dépendre que de l'erreur faite sur la nappe de température et donc sur celle de puissance qui sont considérées à cette même itération multiphysique. On déduit par ailleurs de l'expression de $a^{(n+1)}(\omega)$ et de (7.2.9) que :

$$\tilde{a}^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^{K_{(n+1)}} a^{(n, K_{(n)})}(\omega) + \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}(\omega).$$

Dire que le solveur neutronique converge à une précision ε_N donnée à l'itération multiphysique $n + 1$ impose donc de faire $K_{(n+1)}$ itérations neutroniques tel que $|\tilde{a}^{(n+1, K_{(n+1)})}| < \varepsilon_N$.

On retrouve bien le cas précédent si $\forall n, K_{(n)} = 1$, à savoir : $A(\omega, \alpha, 1) = A(\omega, \alpha)$. L'étude de ce système avec $A(\omega, \alpha, K_{(n+1)})$ permet donc de couvrir les différents couplages haut et bas niveau possibles.

Remarque sur le poids des erreurs : Plaçons-nous à une fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$ et à une itération multiphysique n . Désignons par poids de l'erreur neutronique sur le flux scalaire la grandeur :

$$\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^{K_{(n+1)}}.$$

De même, on appelle poids de l'erreur multiphysique sur le flux scalaire la grandeur :

$$\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)}.$$

On remarque que plus $K_{(n+1)}$ augmente, c'est-à-dire plus on fait d'itérations neutroniques, plus le poids de l'erreur neutronique sur le flux scalaire diminue en comparaison à celui de l'erreur multiphysique qu'on a fait à l'itération multiphysique précédente. C'est cohérent : à la fin de la résolution du problème de neutronique, l'erreur par rapport au flux scalaire solution est dominée par l'erreur qu'on commet à l'itération considérée sur les sections efficaces, la température et la puissance.

Bilan intermédiaire : Dans cette section, on a donc réussi à déterminer, l'évolution des erreurs pour le flux scalaire et la nappe de puissance pour le problème couplé simplifié au cours du calcul multiphysique. Pour cela, on a linéarisé le schéma de couplage initial et décomposé les différentes erreurs intervenant en série de Fourier. Cela nous a permis d'exprimer la dépendance des coefficients amplificateurs de Fourier associés aux erreurs en fonction d'une part du nombre d'itérations effectuées pour résoudre le problème de neutronique et d'autre part du facteur de relaxation qu'on applique sur cette même nappe de puissance. Ce système est donné par (7.2.7). Il s'agit maintenant d'étudier la convergence associée à un tel système. Pour cela, on étudie le rayon spectral de la matrice $A(\omega, \alpha, K_{(n+1)})$. On se propose donc dans les paragraphes suivants de décrire la manière dont convergence partielle et relaxation agissent sur la convergence du schéma numérique introduit en section 7.2.1.

7.2.3 Influence du niveau de convergence partielle et de la relaxation multiphysique sur la convergence du couplage en boîtes noires

On cherche dans cette section à étudier l'évolution du rayon spectral de la matrice $A(\omega, \alpha, K)$ en fonction du facteur de relaxation multiphysique α et du nombre d'itérations neutroniques effectuées K à chaque fois qu'on résout le problème neutronique associé. Dans un premier temps, on met en évidence la dépendance en fonction de K et α du rayon spectral de la matrice $A(\omega, \alpha, K)$ définie en (7.2.7), régissant l'évolution des erreurs effectuées au cours du calcul multiphysique sur la puissance et le flux scalaire. Ensuite, on montre comment la convergence partielle permet de réduire effectivement le nombre d'itérations multiphysiques à réaliser pour atteindre un niveau de précision fixée.

7.2.3.1 Lien entre convergence partielle et relaxation pour le couplage en boîtes noires

On fixe dans ce paragraphe un nombre donné d'itérations de la méthode de la puissance itérée, qu'on note donc K .

Démarche suivie On a vu au paragraphe 7.1.2.2 que les valeurs propres, éventuellement doubles ou imaginaires conjuguées, associées à $A(\omega, \alpha, K)$, étaient données par :

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm}(\omega, \alpha, K) &= \frac{a_{11}(\omega, \alpha, K) + a_{22}(\omega, \alpha, K) \pm \sqrt{\Delta(\omega, \alpha, K)}}{2} \\ &= \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K + \alpha R \frac{\Sigma_{f1}\Phi_0 - \gamma\Sigma_{f0}f\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} + 1 - \alpha \right) \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \left(\left[\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K - \left(\alpha R \frac{\Sigma_{f1}\Phi_0 - \gamma\Sigma_{f0}f\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} + 1 - \alpha \right) \right]^2 \right)^{1/2} \\ &\quad - 4 \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K f\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right) \frac{\gamma\alpha R \Sigma_{f0}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \end{aligned}$$

où on a noté $f\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^K}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}$ et où on a défini $\sqrt{\Delta} := i\sqrt{-\Delta}$ pour $\Delta < 0$.

Le rayon spectral du système multiphysique (7.2.7), pour une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$, est donc donné par :

$$\rho(\omega, \alpha, K) = \max(|\lambda_+(\omega, \alpha, K)|, |\lambda_-(\omega, \alpha, K)|).$$

On cherche donc les conditions sur ω , α et K pour avoir $\rho(\omega, \alpha, K) < 1$ et ainsi garantir un système stable et une décroissance des erreurs sur le flux scalaire et sur la puissance vers 0.

Modes asymptotiques On s'intéresse dans un premier temps aux modes asymptotiques, c'est-à-dire au cas $\omega \rightarrow \infty$. La matrice $A(\omega \rightarrow \infty, \alpha, K)$ devient alors :

$$A(\omega \rightarrow \infty, \alpha, K) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 - \alpha \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de $A(\omega \rightarrow \infty, \alpha, K)$ sont alors 0 et $1 - \alpha$ et ce quelle que soit la valeur de K . On retrouve cela figure 7.4, donnant l'évolution en fonction de ω du rayon spectral pour différents couples (α, K) . Les modes asymptotiques ne posent donc pas de problème de convergence.

Importance du mode fondamental D'autre part, on note que pour chaque fréquence de Fourier et pour chaque valeur de K , on pourrait déterminer une valeur de facteur de relaxation minimisant le rayon spectral pour la fréquence de Fourier considérée. Dans les faits, un unique facteur de relaxation est utilisé pour l'ensemble des modes comme on l'a déjà souligné. Au-delà d'un certain niveau de convergence partielle, on remarque ainsi que le mode fondamental peut alors poser des problèmes de convergence : on a par exemple $\rho(\omega_1, \alpha = 1, K \geq 100) > 1$. Il est indispensable de choisir le facteur de relaxation multiphysique pour le mode (éventuellement les modes) posant des problèmes de convergence, et non pour des fréquences de Fourier plus élevées.

Malgré tout, on remarque que le mode fondamental n'est pas toujours celui correspondant au rayon spectral le plus élevé et n'est donc pas nécessairement le mode le plus lent à converger. Ainsi, pour l'ensemble des valeurs de K étudiées ici, un facteur de relaxation proche de 0 conduit à chaque fois à un rayon spectral qui est plus important pour les modes les plus élevés par rapport aux modes associés à des fréquences de Fourier plus basses. Rappelons malgré tout que cela ne signifie pas nécessairement que ce sera les harmoniques correspondantes aux fréquences de Fourier élevées qui convergeront effectivement les dernières : cela dépend également de l'amplitude initiale de l'erreur associée à chacune de ces harmoniques.

Apports de la convergence partielle L'intérêt de la convergence partielle apparaît d'abord dans la structure de la matrice $A(\omega, \alpha, K)$, qu'on rappelle ici :

$$A(\omega, \alpha, K) = \begin{pmatrix} \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^K & -\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^K}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} \frac{\gamma}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \\ \alpha R \Sigma_{f0} \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^K & \frac{\alpha R \Sigma_{f1} \Phi_0}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} - \frac{\alpha R \gamma \Sigma_{f0}}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^K}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} + 1 - \alpha \end{pmatrix}.$$

On note ainsi comment interviennent respectivement le nombre d'itérations neutroniques K réalisées à l'itération multiphysique 1 et le facteur de relaxation multiphysique α dans la définition de la matrice $A(\omega, \alpha, K)$: il n'y a ainsi pas stricte équivalence dans le rôle joué par ces deux grandeurs, puisque certains termes, comme le coefficient a_{11} dans ladite matrice, ne dépendent que d'un seul des deux paramètres. Ainsi, comme on pouvait s'y attendre, le facteur de relaxation n'apparaît que dans le calcul de l'erreur multiphysique, définie comme étant celle sur la puissance. Le nombre d'itérations neutroniques effectuées apparaît lui dans chaque coefficient. On comprend donc que la convergence partielle a un effet plus systématique sur la résolution d'un tel système.

De plus, puisqu'elle agit *via* les termes en $\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}\right)^K$, l'impact sur chacun des modes sera différent alors qu'avec l'introduction d'un facteur de relaxation, on impactera tous les modes d'une manière similaire comme on l'a vu. Ainsi, si l'on compare figure 7.4 le cas sans convergence partielle ($K = 1000$) au cas avec convergence partielle $K = 10$, on observe que, pour ce dernier cas, sans utiliser de facteur de relaxation ($\alpha = 1, K = 10$), l'ensemble des modes convergent avec un rayon spectral $\rho(\omega)$ assez constant en fonction des fréquences de Fourier. Sans convergence partielle

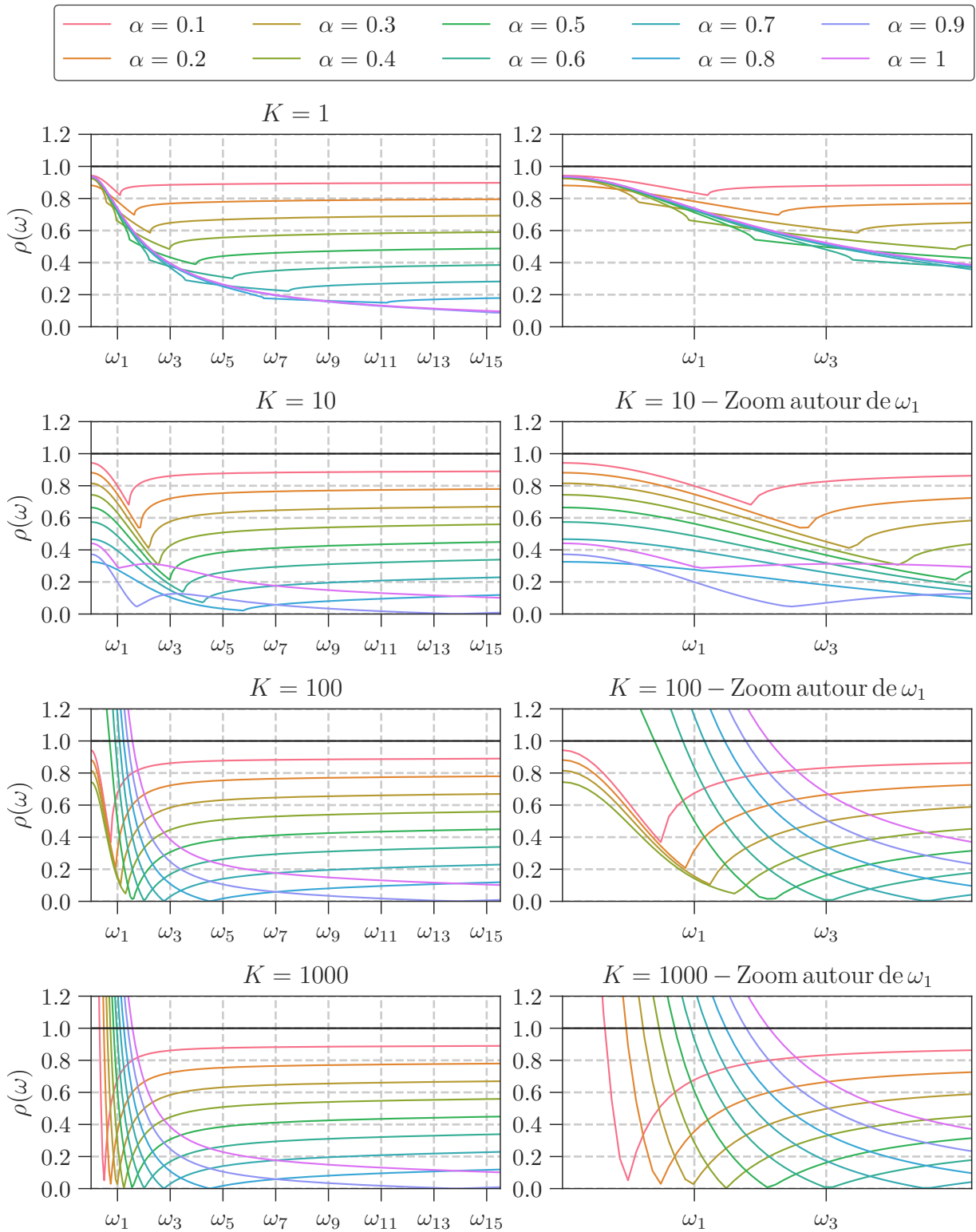


FIGURE 7.4 – Évolution de $\rho(\omega, \alpha, K)$ en fonction de ω pour différents niveaux de convergence partielle K et pour différentes valeurs du facteur de relaxation α - Zoom sur les premières harmoniques à droite (a)

($K = 1000$), mais avec relaxation, on arrive à avoir un rayon spectral très petit pour le mode fondamental (par exemple pour $\alpha = 0.3$), mais cela implique d'avoir des vitesses de convergence plus faibles pour les modes suivants.

Comme on a pu le voir au chapitre 4, si le niveau de convergence partielle est trop faible, la vitesse de convergence sera alors également plus faible : c'est ce qu'on observe en comparant l'évolution du rayon spectral du cas $K = 1$ avec celui du cas $K = 10$: dans le cas sans relaxation ($\alpha = 1$), on obtient des rayons spectraux associés aux premiers modes plus petits pour le cas $K = 10$ que pour le cas $K = 1$. On retrouve donc cette notion de niveau de convergence partielle optimal, qu'il est nécessaire de déterminer en fonction du problème étudié et qu'on avait introduit au chapitre 2 et mis en évidence dans la partie au chapitre 4.

Niveau de convergence partielle optimal On a tracé figure 7.5 l'évolution de $\rho(\omega, \alpha, K)$ pour ω_j avec $j = 1, 2, 3, 4$ en parallèle de celle de $\Delta(\omega, \alpha, K)$ pour les mêmes ω_j . On y a indiqué en pointillé les différentes valeurs du couple (K, α) pour lesquelles on avait $\Delta(\omega_j, \alpha, K) = 0$ ainsi que par un trait plein celles pour lesquelles on a éventuellement $\rho(\omega_j, \alpha, K) = 1$.

On confirme ici que seule la fréquence de Fourier fondamentale peut poser des problèmes en termes de stabilité : on y observe en effet toute une plage de données pour lesquelles des couples (K, α) conduisent à un rayon spectral supérieur à 1. Pour les autres modes, on a toujours $\rho(\omega, \alpha, K) < 1$ pour ce problème. En traçant en parallèle l'évolution de Δ , on peut également faire la conjecture qu'on aura un rayon spectral $\rho(\omega)$ minimal pour les couples (α, K) tels que $\Delta(\omega, \alpha, K)$ soit proche de 0, et ce quelle que soit la fréquence de Fourier considérée. Il s'agit de conjonctures et il conviendrait de prouver ces observations analytiquement. On peut imaginer aboutir sur des conditions sur K et α telles que $\Delta(\omega_1, \alpha, K) = 0$ par exemple. Auquel cas, connaissant les grandeurs caractéristiques des réacteurs à eau pressurisée, on peut s'attendre à pouvoir donner des conseils pertinents pour le choix du niveau de convergence partielle et, si nécessaire, du facteur de relaxation à introduire.

Si on trace l'évolution des modules des valeurs propres λ_+ et λ_- et leur répartition pour différentes valeurs de K et α , données figures 7.6 et 7.7, on retrouve le fait qu'on semble avoir un rayon de convergence minimal pour des valeurs propres proches en module, c'est-à-dire pour $\Delta = 0$. De plus, il ne semble pas y avoir de valeur propre privilégiée : en fonction du couple (α, K) retenu, la dominance des deux valeurs propres varie. L'importance de la valeur propre positive semble malgré tout augmenter avec ω . Notons également que sans relaxation, c'est toujours la valeur propre négative qui donne le rayon spectral, sauf lorsqu'on introduit un niveau de convergence partielle suffisamment bas. On ne peut cependant pas, à partir de cette seule observation, en conclure que la stabilité du couplage est simplement liée à la valeur propre λ_- .

Convergence vers la solution du problème multiphysique initial Enfin, on peut noter qu'on a démontré pour le problème de la plaque infinie mono-énergétique que, quel que soit le niveau de convergence partielle retenu, les erreurs sur le flux scalaire et la puissance tendaient vers 0, avec éventuellement la nécessité d'utiliser un facteur de relaxation multiphysique. En effet, quelle que soit la valeur de K , si on trouve une valeur de α telle que le système (7.2.7) soit convergent, alors on a bien :

$$\forall \omega_j, \lim_{n \rightarrow \infty} U^{(n)}(\omega, \alpha, K) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

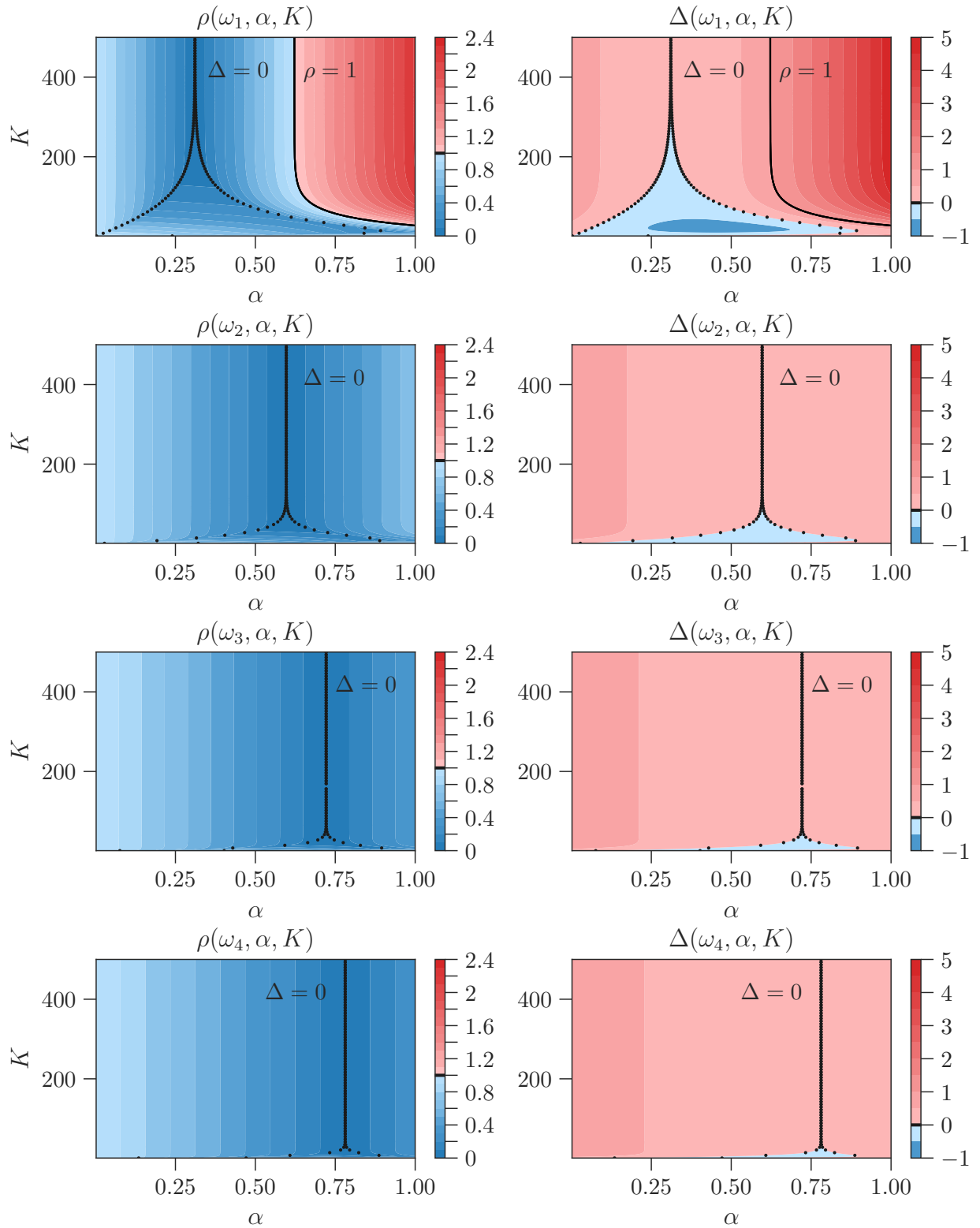


FIGURE 7.5 – Évolution de $\rho(\omega_j, \alpha, K)$ et $\Delta(\alpha, K)$ en fonction de α et K pour les 4 premières fréquences de Fourier autorisées $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ et ω_4 .

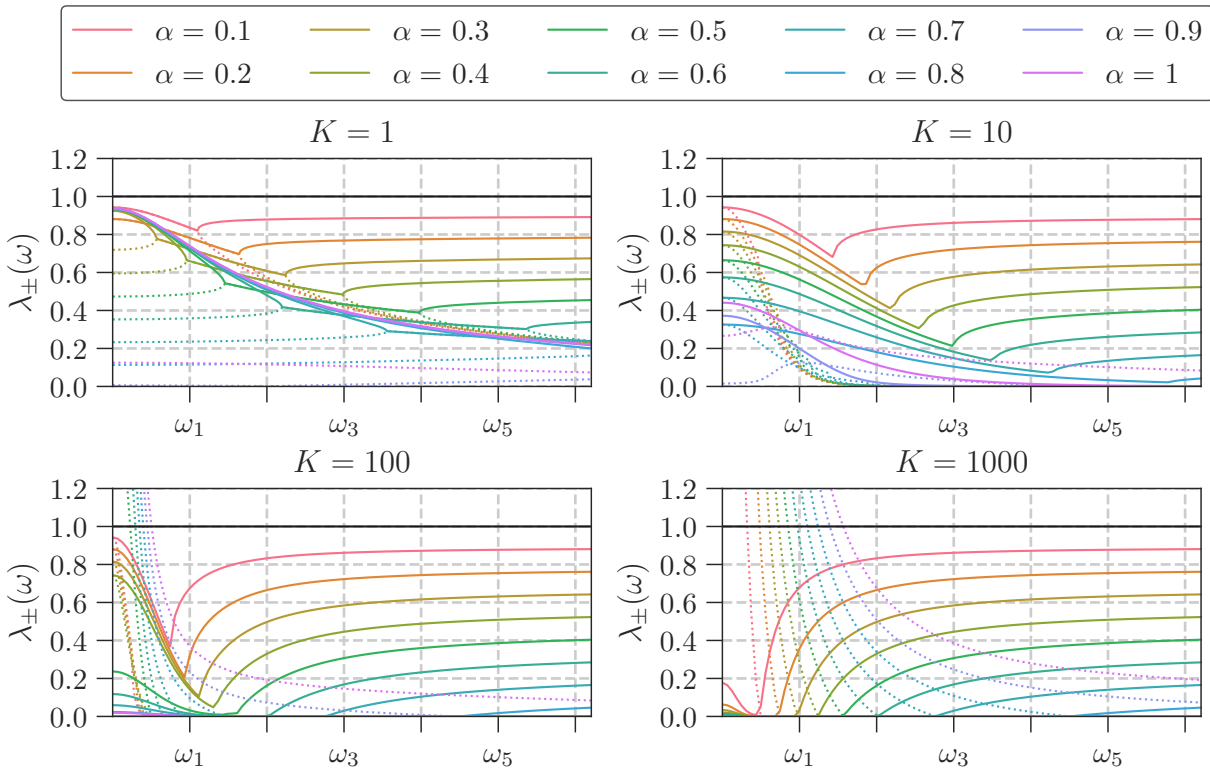


FIGURE 7.6 – Évolution des valeurs propres de $A(\omega, \alpha, K)$ en fonction de K , α et ω . On a tracé en pointillé $\lambda_-(\omega, \alpha, K)$ et en trait plein $\lambda_+(\omega, \alpha, K)$.

On a donc apporté une justification théorique, pour ce problème simplifié, au fait qu’effectivement, un schéma de calcul avec convergence partielle du solveur neutronique converge bien vers la même solution que le schéma équivalent avec convergence fine. Bien sûr, il ne s’agit pas d’une preuve dans le cas général des couplages entre neutronique et thermohydraulique. Malgré tout, il s’agit à notre connaissance d’un premier élément de démonstration théorique.

Bilan intermédiaire : On a donc pu illustrer avec cette étude la manière dont le rayon spectral de la matrice $A(\omega, \alpha, K)$ dépendait du facteur de relaxation multiphysique α et du niveau de convergence partielle K considéré pour le solveur neutronique. De la même manière que pour la relaxation, on a vu qu’introduire de la convergence partielle permettait de garantir la convergence du schéma itératif considéré, et ce de manière plus efficace. À partir d’un certain niveau de convergence partielle, la convergence est de plus garantie sans avoir à introduire de relaxation multiphysique. On a également illustré la manière dont la convergence partielle permettait d’agir sur l’ensemble des modes de Fourier de manière spécifique. Enfin, on a pu proposer des pistes de réflexions sur le choix des paramètres α et K à partir des expériences numériques qu’on a effectuées. On se propose dans la suite de se rapprocher de l’étude d’un problème multiphysique *réel*, avec notamment un nombre K d’itérations neutroniques qui varient au cours du calcul multiphysique.

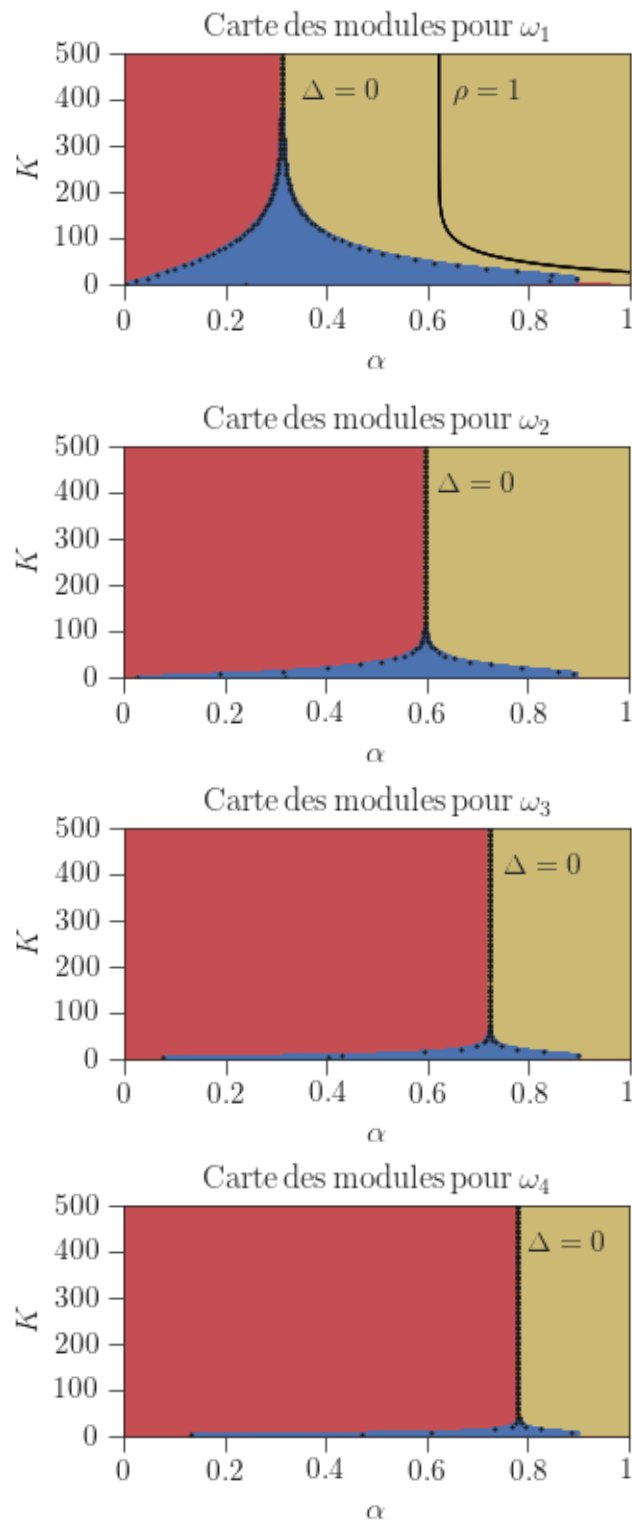


FIGURE 7.7 – Évolution de la carte des modules pour $A(\omega, \alpha, K)$ en fonction de K , α et ω : la zone jaune correspond aux couples (α, K) pour lesquels $|\lambda_-| > |\lambda_+|$, la zone rouge à ceux pour lesquels $|\lambda_-| < |\lambda_+|$ et la zone bleue ceux pour lesquels $|\lambda_-| = |\lambda_+|$. Les lignes $\rho = 1$ et $\Delta = 0$ correspondent à celles présentes sur la figure (7.5) pour les différentes fréquences de Fourier considérées

7.2.3.2 Réduction du nombre d'itérations multiphysiques *via* la convergence partielle de l'opérateur neutronique

Définitions des approches avec convergence fine et convergence partielle Si l'étude réalisée ici permet de comprendre la manière dont agissent la relaxation multiphysique et la convergence partielle neutronique sur la résolution du problème couplé et de comparer les deux approches, il convient pour aller plus loin de se donner une précision à atteindre sur le flux angulaire et le flux scalaire d'une part et d'autre part sur la puissance pour le problème multiphysique global. On distingue ainsi deux cas :

- **Convergence fine** : on converge le problème neutronique à chaque itération multiphysique jusqu'à atteindre la précision ε_N souhaitée. On se place dans ce cas dans une situation de convergence fine et on doit donc avoir pour toutes les itérations multiphysiques n : $\varepsilon_N \geq |\tilde{a}^{(n, K(n))}|$. Le nombre d'itérations neutroniques à réaliser à l'itération multiphysique $n+1$ peut être obtenu en résolvant, en $K_{(n+1)}$ et pour chaque fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$ considérée, l'équation :

$$\varepsilon_N = \pm \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} a^{(n, K(n))} + \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{\left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} - 1}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}.$$

Le nombre d'itérations multiphysiques N à effectuer est donné par le niveau de précision ε_{MP} souhaité : N est le plus petit entier n tel que $d^{(n)} \leq \varepsilon_{MP}$.

- **Convergence partielle** : on ne converge pas le problème de neutronique à chaque appel du solveur et on utilise la convergence partielle pour le solveur neutronique : on se donne alors un nombre maximal d'itérations neutroniques $K_{\text{partielle}}$ et on calcule l'évolution, au cours de la simulation multiphysique, de l'erreur neutronique sur le flux scalaire avec l'expression de $\tilde{a}^{(n, K_{\text{partielle}})}$. Le nombre final d'itérations multiphysiques N à effectuer pour résoudre le problème correspond au plus petit entier n tel que :

$$K_{(n)} < K_{\text{partielle}}, \text{ avec } \begin{cases} |\tilde{a}^{(n, K(n))}| \leq \varepsilon_N & (\text{convergence de la neutronique}) \\ d^{(n)} \leq \varepsilon_{MP} & (\text{convergence du problème multiphysique}) \end{cases} .$$

Définition du problème multiphysique retenu : précisions retenues On se contentera d'étudier le mode fondamental puisqu'on a vu que c'était lui qui posait des problèmes de convergence. De plus, l'amplitude de l'erreur associée à ce mode est *a priori* plus importante que pour les modes correspondant aux fréquences de Fourier supérieures. Si on se donne une erreur initiale, disons $a^{(0,0)}(\omega_1) = 1$ et $d^{(0)}(\omega_1) = 1$ ainsi que des niveaux de précisions neutronique et multiphysique à atteindre, par exemple $\varepsilon_N = 10^{-12}$ et $\varepsilon_{MP} = 10^{-10}$, on peut tracer l'évolution du rayon spectral $\rho_n(\omega_1, \alpha, K_{(n)})$ à chaque itération multiphysique n , ainsi que celle du nombre d'itérations neutroniques $K_{(n)}$ nécessaire pour atteindre une erreur de ε_N , et enfin l'évolution de l'erreur multiphysique $d^{(n)}(\omega_1, \alpha, K_{(n)})$ au cours du calcul multiphysique. On peut donc comparer sur ce cas simple les approches avec ou sans convergence partielle et l'apport de la relaxation multiphysique sur le rayon spectral d'une part, mais également leur influence sur le nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques à réaliser pour atteindre les différentes précisions désirées.

Influence de la convergence partielle et de la relaxation sur le nombre d'itérations multiphysiques On trace ici l'évolution de $\rho_n(\omega_1, \alpha, K_{(n)})$, $K_{(n)}$ et $d^{(n)}(\omega_1, \alpha, K_{(n)})$ pour la fréquence de Fourier fondamentale ω_1 . On a vu que le mode associé n'était pas forcément le plus lent à converger selon les couples (α, K) retenus, mais que son étude était malgré tout centrale puisqu'il s'agit du mode qui peut poser des problèmes de convergence. Les résultats sont donnés figure 7.8.

On remarque que l'introduction de la convergence partielle permet de stabiliser le calcul et de ne plus avoir à introduire un facteur de relaxation pour être en mesure d'avoir un schéma stable comme on l'a déjà observé sur les différents cas réels que nous avons étudiés au chapitre 4 et comme on a pu le souligner dans la section précédente.

De plus, on a des vitesses de convergence avec l'utilisation de la convergence partielle qui se rapprochent de la vitesse optimale de convergence pour le cas avec convergence fine. Ainsi, le meilleur cas avec convergence fine, à savoir $\alpha = 0.3$ sur la figure 7.8 voit sa vitesse de convergence multiphysique approchée par le cas $(\alpha = 0.8, K = 12)$. D'une manière générale, il semble qu'on puisse, pour ce problème simplifié, trouver pour chaque cas avec convergence fine et relaxation multiphysique α_1 un couple (α_2, K_2) avec convergence partielle pour la neutronique qui ait une vitesse de convergence multiphysique comparable. Finalement la convergence partielle ne semble pas dégrader la vitesse de convergence multiphysique pour les couplages en boîtes noires et permet d'obtenir des vitesses comparables quelque soit les couples (α, K) retenus.

La convergence partielle présente l'intérêt supplémentaire de réduire le coût par itération multiphysique en réduisant le nombre d'itérations neutroniques par appel tout en maintenant la vitesse de convergence multiphysique par rapport aux cas avec convergence fine. Ainsi, le nombre d'itérations neutroniques totales à effectuer est donné par l'intégrale des courbes $K_{(n)}$ figure 7.8. On observe que l'aire sous les courbes correspondant aux cas avec convergence partielle est plus petite que celle sous les courbes équivalentes avec convergence fine. Par ailleurs, on remarque également que, par rapport à certains cas avec convergence fine et relaxation, on a même besoin de moins d'itérations multiphysiques : on peut observer cela en comparant le cas $(\alpha = 1, K = 12)$ aux cas $(\alpha \leq 0.6, K_{\text{fine}})$. On observe ainsi qu'on peut, en plus de réduire le nombre d'itérations neutroniques, réduire le nombre d'itérations multiphysiques à réaliser pour résoudre le problème selon les couples $(\alpha, K_{\text{partielle}})$ retenus.

On juge que, dans le cadre de ce travail, cette première étude est satisfaisante et permet de comprendre les différentes observations que nous avons faites lors de l'étude des couplages en boîtes noires entre neutronique et thermohydraulique, au chapitre 4. Dans ce paragraphe, on a donc étudié les algorithmes de couplages multiphysiques en boîtes noires tels qu'utilisés au chapitre 4, en introduisant les notions de précisions à atteindre à la fois pour le problème multiphysique et pour le problème neutronique. On a ainsi pu vérifier que la convergence partielle du problème neutronique permettait à la fois de limiter le nombre total d'itérations neutroniques à faire, ainsi que le nombre d'itérations multiphysiques, avec une vitesse de convergence multiphysique qu'on peut rendre comparable au cas avec convergence fine et facteur de relaxation multiphysique optimisé.

Bilan de la section : Dans cette section, on a donc pu mettre en évidence le lien entre convergence partielle de l'opérateur neutronique et relaxation multiphysique pour la plaque infinie couplée mono-énergétique. Pour cela, on a établi le système linéarisé régissant l'évolu-

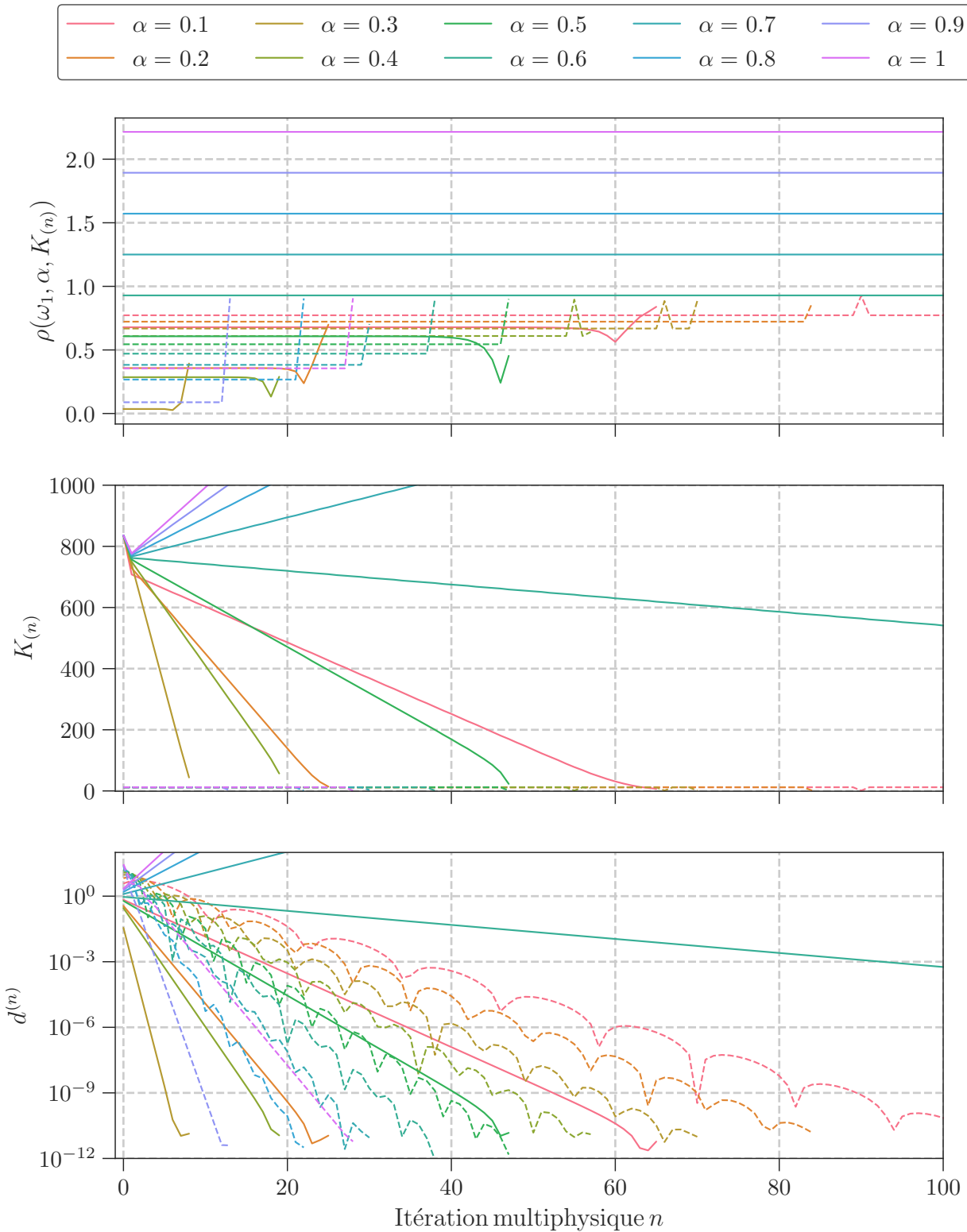


FIGURE 7.8 – Évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques $K(n)$ nécessaires pour converger et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}$ au cours du calcul multiphysique pour la fréquence de Fourier fondamental ω_1 . En trait plein, le cas avec convergence fine jusqu'à atteindre ε_N à chaque itération multiphysique, en pointillé, le cas avec convergence partielle et $K_{\text{partielle}} = 12$.

tion des erreurs notamment sur le flux scalaire et la puissance, et on en a déduit la manière dont le nombre d'itérations neutroniques effectuées et la relaxation multiphysique permettent de maximiser la vitesse de convergence du problème couplé. On s'est notamment intéressé aux différences entre ces deux approches : si la relaxation n'agit que sur l'erreur multiphysique, la convergence partielle permet elle de contrôler à la fois l'erreur neutronique et celle sur la nappe de puissance.

7.3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a donc introduit un problème simplifié de plaque infinie avec des conditions de réflexion au bord. En se restreignant à l'équation de transport mono-dimensionnelle ainsi qu'à un problème mono-énergétique avec une diffusion isotrope, on a pu proposer un cadre analytique pour étudier le lien entre convergence partielle du problème neutronique et l'introduction d'un facteur de relaxation multiphysique au niveau de la nappe de puissance : celle-ci est ainsi échangée avec un opérateur thermohydraulique, permettant de calculer une nouvelle nappe de température et de mettre à jour les sections efficaces macroscopiques régissant le problème de neutronique. On simule de ce fait un couplage en boîtes noires entre un opérateur neutronique et un autre thermohydraulique.

Après linéarisation et décomposition des erreurs sur la température, la puissance et les flux angulaire et scalaire neutronique en séries de Fourier, on a pu mettre en évidence la manière dont intervenaient sur les erreurs neutronique et multiphysique, d'une part le nombre d'itérations de la méthode de la puissance itérée effectuées à l'intérieur de notre opérateur neutronique et d'autre part le facteur de relaxation multiphysique. Cela a permis d'illustrer le lien reliant ces deux paramètres. On a ainsi été en mesure de proposer une première explication théorique de la manière dont la convergence partielle permettait de stabiliser le couplage, en rendant le schéma itératif convergeant. La manière dont elle pouvait également accélérer la convergence du problème multiphysique en lui-même a aussi été illustrée. Contrairement à la relaxation multiphysique, on a enfin pu montrer que la convergence partielle agissait sur les différents modes de Fourier de manière différenciée. De plus, elle permet de contrôler l'évolution de l'erreur neutronique et de celle sur la puissance, contrairement à la relaxation qui n'agit que sur l'erreur multiphysique. C'est, à notre connaissance, la première fois qu'un tel lien est illustré analytiquement et que la convergence partielle du solveur neutronique est étudiée dans un couplage avec un opérateur thermohydraulique.

Le cadre de cette étude est malgré tout limité. On ne peut pour le moment en déduire de règle générale sur le choix d'un facteur de relaxation multiphysique ou sur celui d'un niveau de convergence partielle. Pour cela, il s'agit dans un premier temps de prouver analytiquement les observations faites sur le lien entre rayon spectral minimal et les différents paramètres étudiés section 7.2. Ensuite, il convient de détailler l'opérateur thermohydraulique et de rendre compte d'un schéma itératif pour la résolution du problème thermohydraulique également. Il s'agit ensuite d'étudier la convergence partielle de l'opérateur thermohydraulique également. Comme précédemment souligné, l'idée est avant tout ici de comprendre la manière dont la convergence partielle des différents problèmes mono-physiques aide à la convergence du problème multiphysique. Le fait de se placer proche de la solution finale pour pouvoir linéariser le système décrivant le problème global et pouvoir ensuite introduire les différentes séries de Fourier des termes d'erreurs est d'ailleurs une autre limite à souligner : les remarques faites ne s'appliquent *a priori* que

pour les dernières itérations multiphysiques, lorsqu'on est *effectivement* proche de la solution du problème global pour l'ensemble des grandeurs. Malgré tout, ces premières explications semblent prometteuses et constituent une première étape dans la compréhension de la convergence partielle pour les problèmes couplés entre neutronique et thermohydraulique.

Dans le chapitre suivant, on étend le travail effectué ici pour les couplages en boîtes noires, réalisés sur la nappe de puissance, entre un solveur de neutronique et un autre de thermohydraulique. On s'intéresse donc dans la suite aux couplages hybrides que nous avons introduits au chapitre 6. L'idée est d'analyser la manière dont un couplage sur le flux convergé impacte le système rendant compte de l'évolution des erreurs sur le flux scalaire et la puissance au cours du couplage multiphysique. On cherche ainsi à retrouver les remarques faites durant l'étude des couplages hybride, dans la partie II du présent document.

Chapitre 8

Étude des performances des couplages hybrides entre neutronique et thermohydraulique pour une plaque infinie

L'objectif de ce chapitre est d'étudier les performances des couplages hybrides en termes de vitesse de convergence et de stabilité des calculs couplés par rapport au couplage en boîtes noires, étudié au chapitre 7. L'enjeu est ainsi de rendre compte des observations faites durant l'étude des couplages hybrides au chapitre 6 : on a en effet noté qu'effectuer un couplage entre neutronique et thermohydraulique sur le flux convergé et non pas sur la nappe de puissance permettait d'accélérer la convergence du problème multiphysique.

Pour cela, on établit dans un premier temps le lien entre convergence partielle de l'opérateur neutronique et introduction d'une relaxation sur le flux convergé dans le cas d'un couplage hybride pour la plaque infinie, après avoir établi le nouveau schéma numérique correspondant à un couplage hybride. Ensuite, on compare les vitesses de convergence et la stabilité des couplages en boîtes noires et hybride.

On reprend les notions du chapitre précédent et on se place dans le même cadre d'étude : le problème multiphysique à résoudre reste ainsi inchangé. On considère le cas mono-énergétique seulement : en effet, la *structure* des systèmes issus des cas avec plusieurs groupes d'énergie est identique à celle du cas mono-énergétique, comme on l'explique dans l'annexe D.

Sommaire

8.1	Établissement du schéma de couplage hybride sur le flux convergé . . .	218
8.2	Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage hybride . . .	219
8.2.1	Linéarisation du schéma de couplage hybride et décomposition des erreurs en série de Fourier	219
8.2.2	Mise en évidence du système reliant les coefficients des séries de Fourier associées aux erreurs pour le couplage hybride	221
8.3	Étude de la convergence du problème multiphysique	222
8.3.1	Lien entre convergence partielle du solveur neutronique et relaxation hybride	222
8.3.2	Résolution du problème multiphysique avec un couplage hybride	223

8.1 Établissement du schéma de couplage hybride sur le flux convergé

On essaie ici de reproduire le type de couplage hybride qu'on a exploré numériquement au chapitre 6. Dans les couplages en boîtes noires faisant intervenir des solveurs pré-existants, on applique un facteur de relaxation sur la puissance calculée une fois le problème neutronique résolu puisque c'est la grandeur multiphysique échangée entre nos opérateurs neutronique et thermohydraulique, grandeur sur laquelle on définit notre point fixe : c'est la démarche qu'on a étudié au chapitre 4 ainsi qu'au chapitre 7. À l'inverse, ici, on se donne accès à des grandeurs internes à l'opérateur neutronique et on met en place une relaxation sur le flux convergé. Le schéma numérique est alors le suivant :

1. On commence l'itération $n + 1$ avec un flux connu scalaire relaxé $\hat{\phi}^{(n)}$ ainsi qu'une puissance $p^{(n)} = \mathbf{P}^{(n)}$ (on n'a plus de relaxation sur la nappe de puissance), et une valeur propre $\lambda^{(n)}$
2. On calcule la nouvelle température associée à la nouvelle puissance :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{P}^{(n)}(x)).$$

3. On met à jour les sections efficaces macroscopiques :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \Sigma_i^{(n+1)}(x) = \Sigma_{i0} + \Sigma_{i1}(T^{(n+1)}(x) - T_0).$$

4. On fait $K_{(n+1)}$ itérations de transport :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mu \frac{\psi^{(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(n+1)}(x) \psi^{(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_s^{(n+1)}(x) \phi^{(n, K_{(n)})}(x) + \lambda^{(n+1,k)} \nu \Sigma_f^{(n+1)}(x) \phi^{(n, K_{(n)})}(x), \quad (8.1.1)$$

pour $0 \leq k \leq K_{(n+1)} - 1$ avec $\phi^{(n+1,0)} = \hat{\phi}^{(n)}$. À chaque itération, on met à jour le flux scalaire et la valeur propre :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \phi^{(n+1,k+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(n+1,k+1)}(x, \mu') d\mu' \frac{\Phi_0}{\frac{1}{X} \int_0^X \int_{-1}^1 \psi^{(n+1,k+1)}(x', \mu) d\mu dx'},$$

$$\lambda^{(n+1,k+1)} = \frac{1 \int_0^X \Sigma_a^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1,k+1)}(x) dx}{\nu \int_0^X \Sigma_f^{(n+1)}(x) \phi^{(n+1,k+1)}(x) dx}.$$

5. Une fois le problème neutronique résolu, on calcule le nouveau flux relaxé :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \hat{\phi}^{(n+1)}(x) = \beta \times \phi^{(n+1, K_{n+1})}(x) + (1 - \beta) \times \hat{\phi}^{(n)}(x),$$

où on a noté β le facteur de relaxation utilisé.

6. On calcule la nouvelle puissance à partir du flux relaxé :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}^{(n+1)}(x) = R \Sigma_f^{(n+1)}(x) \hat{\phi}^{(n+1)}(x).$$

On a mis en évidence en orange les différences avec le schéma de couplage en boîtes noires introduit en section 7.2.1.

Avant de continuer, on peut d'ores et déjà noter une différence avec les cas réels étudiés partie II : ici, on relaxe simplement le flux convergé, sans appliquer de méthode d'accélération. On s'attend malgré tout à ce que cette relaxation permette de stabiliser le calcul multiphysique, voire d'accélérer la convergence du problème global, au moins dans le cas avec convergence fine. L'introduction d'une relaxation sur le flux convergé doit également permettre de saisir en quoi travailler sur les grandeurs internes au solveur neutronique modifie la *structure* du système régissant les erreurs neutroniques et multiphysiques au cours de la résolution du problème couplé, comme on l'a vu par exemple au paragraphe 7.2.3.1.

Bilan de la section : On a ici modifié le schéma problème multiphysique défini en section 7.2.1 pour y intégrer un couplage hybride sur le flux convergé. Le couplage hybride considéré étant défini, on s'intéresse dans le paragraphe suivant à établir le système linéarisé rendant compte de l'évolution des erreurs dans le cadre de ce couplage hybride.

8.2 Mise en évidence du système linéarisé associé au couplage hybride

L'objectif de cette section est d'explicitier le système linéarisé régissant l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique pour un schéma de couplage hybride. Comme pour le couplage en boîtes noires étudié au chapitre précédent, on linéarise dans un premier temps le schéma de couplage, puis on introduit dans un second dans les différentes séries de Fourier permettant de décrire les erreurs neutronique et multiphysique.

8.2.1 Linéarisation du schéma de couplage hybride et décomposition des erreurs en série de Fourier

La démarche et les notations sont identiques à celles utilisées lors de l'analyse du couplage en boîtes noires section 7.1.2. La seule différence réside dans l'introduction du flux relaxé $\hat{\phi}$.

Linéarisation : On introduit donc la linéarisation du flux relaxé $\hat{\phi}$, à savoir :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 0 \hat{\phi}^{(n)}(x) := \Phi_0 + \varepsilon \hat{\phi}_1^{(n)}(x) + O(\varepsilon^2).$$

On a donc immédiatement, pour une itération multiphysique n donné :

$$\hat{\phi}_1^{(n)} = \beta \times \phi_1^{(n)} + (1 - \beta) \hat{\phi}_1^{(n-1)}.$$

Le système régissant l'évolution des erreurs neutronique, thermohydraulique et multiphysique suite à la linéarisation est ainsi, pour une itération multiphysique n et un point $x \in \mathfrak{D}$:

$$\forall k < K_{(n+1)}, \begin{cases} T_1^{(n+1)}(x) = \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}} \mathbf{P}_1^{(n)}(x) \\ \mu \frac{\psi_1^{(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0} \psi_1^{(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_{t0} \left(\phi_1^{(n+1,k)}(x) - \gamma T_1^{(n+1)}(x) \right) \\ \phi_1^{(n+1,k+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi_1^{(n+1,k+1)}(x) d\mu \\ \hat{\phi}_1^{(n+1)}(x) = \beta \times \phi_1^{(n+1, K_{(n+1)})}(x) + (1 - \beta) \times \hat{\phi}_1^{(n)}(x) \\ \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = R \Sigma_{f1} \Phi_0 T_1^{(n+1)}(x) + R \Sigma_{f0} \hat{\phi}_1^{(n+1)}(x) \end{cases} . \quad (8.2.1)$$

En effet, la seule différence par rapport à (7.2.5) réside dans l'étape de relaxation qu'on applique dorénavant au flux ; puis on calcule la nouvelle puissance avec le flux relaxé, d'où la relation immédiate entre $\mathbf{P}_1^{(n+1)}$, $T_1^{(n+1)}$ et $\hat{\phi}_1^{(n+1)}$.

Décomposition des erreurs en série de Fourier : On reprend pour la suite les notions introduites au paragraphe 7.2.2.2 pour les séries de Fourier associées aux différentes erreurs. On définit simplement celle donnant l'erreur sur le flux relaxé, à savoir pour toute itération multiphysique n et tout point x de \mathfrak{D} :

$$\hat{\phi}_1^{(n)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} \hat{a}^{(n)}(\omega_j, \beta, K_{(n+1)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}).$$

On a donc immédiatement, pour une itération multiphysique n et en allégeant les notations :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \hat{a}^{(n+1)}(\omega) = \beta \times a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) + (1 - \beta) \hat{a}^{(n)}(\omega), \quad (8.2.2)$$

où $a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega)$ a été défini au paragraphe 7.2.2.2.

Au cours d'une itération multiphysique et avant d'appliquer la relaxation au flux convergé, on peut noter qu'il n'y a aucune différence avec les développements réalisés dans la section 7.2.2.2, excepté l'initialisation du flux à l'itération multiphysique $n + 1$ qui se fait à partir du flux relaxé calculé à l'itération multiphysique n . On a donc dorénavant, pour toutes les fréquences de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$:

$$a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} \hat{a}^{(n)}(\omega) - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}(\omega), \quad (8.2.3)$$

où on a omis certaine dépendance pour alléger les notations. On peut maintenant, à partir de (8.2.1), (8.2.2) et (8.2.3), déterminer le schéma itératif reliant les coefficients de Fourier associés aux erreurs neutronique et multiphysique au cours du calcul multiphysique de la même manière qu'au paragraphe 7.2.2.2.

8.2.2 Mise en évidence du système reliant les coefficients des séries de Fourier associées aux erreurs pour le couplage hybride

Avec les notations introduites, le système à résoudre dans le cas où on effectue $K_{(n+1)}$ itérations de la méthode de la puissance itérée pour résoudre le problème de neutronique avant de calculer un flux convergé relaxé suivi de la nouvelle nappe de puissance pour finalement mettre à jour les sections efficaces *via* un calcul de thermohydraulique est donc :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, V^{(n+1)}(\omega) = B(\omega, \beta, K_{(n+1)}) V^{(n)}(\omega), \quad (8.2.4)$$

avec d'une part :

$$V^{(n)}(\omega) := \begin{pmatrix} \hat{a}^{(n)}(\omega, \beta, K_{(n)}) \\ d^{(n)}(\omega, \beta, K_{(n)}) \end{pmatrix},$$

et d'autre part $B(\omega, \beta, K_{(n+1)})$ définie comme :

$$B := \begin{pmatrix} \beta \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} + 1 - \beta & -\beta \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}} \\ R\Sigma_{f0} \left(\beta \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} + 1 - \beta \right) \frac{R\Sigma_{f1}\Phi_0}{\mathbf{th}_1^{-1}} - \frac{\beta R\gamma\Sigma_{f0}}{\mathbf{th}_1^{-1}} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} \end{pmatrix}.$$

Preuve. En introduisant une relaxation, l'expression finale de l'erreur sur le flux scalaire à l'itération neutronique $K_{(n+1)}$ et à l'itération multiphysique $n + 1$ vient immédiatement, en injectant (8.2.2) dans (8.2.3) à une fréquence de Fourier ω donnée :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \hat{a}^{(n+1)}(\omega) = \left(\beta \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} + 1 - \beta \right) \hat{a}^{(n)}(\omega) - \beta \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} d^{(n)}(\omega).$$

Et on a par ailleurs immédiatement à partir de (8.2.1) :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, d^{(n+1)}(\omega) = \frac{R\Sigma_{f1}\Phi_0}{\mathbf{th}_1^{-1}} d^{(n)}(\omega) + R\Sigma_{f0} \hat{a}^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega).$$

On a donc réussi à rendre compte de notre problème couplé *via* un schéma itératif reliant nos différentes erreurs entre deux itérations multiphysiques. Une différence notable entre la matrice $A(\omega, \alpha, K_{(n+1)})$ et la matrice $B(\omega, \beta, K_{(n+1)})$ est le rôle joué par les facteurs de relaxation α et β : alors que pour le couplage en boîtes noires, la relaxation n'était appliquée que pour le calcul de $d^{(n+1)}$, β apparaît lui dans l'ensemble des coefficients de la matrice B . La relation entre convergence partielle et relaxation semble ici renforcée, puisque les deux paramètres $K_{(n+1)}$ et β apparaissent toujours ensemble dans la matrice B .

On vérifie au passage que, comme attendu : $A(\omega, \alpha = 1, K_{(n+1)}) = B(\omega, \beta = 1, K_{(n+1)})$. Ainsi, en l'absence de relaxation pour les couplages en boîtes noires et hybride, les deux schémas numériques sont équivalents et les étapes de linéarisation puis l'introduction des séries de Fourier aboutissent au même schéma itératif régissant les erreurs neutronique et multiphysique.

Bilan de la section : Dans cette section, on a mis en évidence le système linéaire (8.2.4) rendant compte de l'évolution des erreurs sur le flux scalaire et la nappe de puissance au cours du couplage hybride. Cela nous a permis de prouver le lien entre convergence partielle de l'opérateur neutronique et introduction d'une relaxation sur le flux convergé, lien qui est renforcé par rapport au couplage en boîtes noires. On peut dans la suite mener une analyse similaire à celle du paragraphe 7.2.3.1 : il s'agit d'étudier l'influence respective de la convergence partielle et de la relaxation *hybride* (c'est-à-dire de la relaxation appliquée au flux neutronique) sur la stabilité du couplage hybride et sa vitesse de convergence. On cherche également à comparer les caractéristiques de ce couplage hybride à celui équivalent en boîtes noires.

8.3 Influence du niveau de convergence partielle et de la relaxation hybride sur la convergence problème multiphysique

8.3.1 Lien entre convergence partielle du solveur neutronique et relaxation hybride

On note dans la suite α le facteur de relaxation utilisé pour les couplages en boîtes noires ou hybride.

Conditions générales de convergence : On a vu en 7.1.2.1 que les valeurs propres, éventuellement doubles ou imaginaires conjuguées, associées à $B(\omega, \alpha, K)$, étaient données par :

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm}^B(\omega, \alpha, K) &= \frac{b_{11}(\omega, \alpha, K) + b_{22}(\omega, \alpha, K) \pm \sqrt{\Delta(\omega, \alpha, K)}}{2} \\ &= \frac{1}{2} \left(\alpha \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K + 1 - \alpha + R \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0 - \alpha \gamma \Sigma_{f0} f(\omega)}{\mathbf{th}_1^{-1}} \right) \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \left(\left(\alpha \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K + 1 - \alpha - \left(R \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0 - \alpha \gamma \Sigma_{f0} f(\omega)}{\mathbf{th}_1^{-1}} \right) \right)^2 \right)^{1/2} \\ &\quad - 4 \left(\alpha \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K + 1 - \alpha \right) f(\omega) \frac{\alpha \gamma R \Sigma_{f0}}{\mathbf{th}_1^{-1}} \end{aligned}$$

où on a noté $f(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^K}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}$ et où on a toujours $\sqrt{\Delta} := i\sqrt{-\Delta}$ pour $\Delta < 0$.

Le rayon spectral de $B(\omega, \alpha, K)$, associé à notre problème couplé hybride, pour une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$, est donc donné par :

$$\rho^B(\omega, \alpha, K) = \max(|\lambda_+^B(\omega, \alpha, K)|, |\lambda_-^B(\omega, \alpha, K)|).$$

On cherche donc les conditions sur ω , α et K pour avoir $\rho^B(\alpha, K) < 1$ et ainsi garantir un système stable et une décroissance des erreurs sur le flux scalaire et sur la puissance vers 0. Comme dans le paragraphe 7.2.3.1, on considère dans cette étude un nombre d'itérations neutroniques K constantes dans un premier temps.

Analyse de la stabilité et comparaisons avec les couplages en boîtes noires : La figure 8.1 donne l'évolution du rayon spectral en fonction de la fréquence de Fourier pour différentes valeurs de K et du facteur de relaxation dans le cas d'un couplage en boîtes noires et d'un couplage équivalent hybride.

Contrairement à ce qu'on observe dans nos cas d'étude présentés au chapitre 6, il semblerait ici que le couplage hybride n'accélère pas la convergence ni n'améliore la stabilité du calcul par rapport à un couplage équivalent en boîtes noires. Ainsi, on remarque que la valeur du rayon spectral pour le couplage hybride est plus importante que celle pour le couplage en boîtes noires correspondant, et ce, pour tous les couples (α, K) et les fréquences de Fourier ω considérés. On ne retrouve ainsi pas l'effet *accélérateur* du couplage hybride qu'on a étudiée partie II.

Cela peut s'expliquer d'une part par le caractère trop simplifié de notre modèle théorique. D'autre part, on peut noter que, pour les cas d'étude, on n'a pas simplement introduit une relaxation sur le flux convergé : on n'a pas étudié l'introduction de l'accélération d'Anderson.

On peut ainsi analyser comment l'introduction, ici, d'une relaxation et plus généralement d'une méthode d'accélération se manifeste pour un couplage hybride *via* le système régissant l'évolution des erreurs de ce couplage : il s'agit alors de comparer les systèmes (7.2.7) et (8.2.4). Alors que pour les couplages en boîtes noires, la relaxation n'intervenait que dans les termes liés à la puissance, le facteur de relaxation intervient ici dans tous les termes de la matrice $B(\omega, \beta, K)$, au même titre que le nombre d'itérations neutroniques K . Si cela ne se manifeste cependant pas dans cet exemple par une amélioration de la vitesse de convergence, cela peut malgré tout expliquer les bonnes performances des couplages hybrides dans un cas plus réel.

On peut également comparer les performances de ce couplage hybride pour la résolution d'un problème multiphysique. Dans la suite, on reprend donc l'étude menée au paragraphe 7.2.3.2.

8.3.2 Résolution du problème multiphysique avec un couplage hybride

On se donne donc des erreurs initiales $\hat{a}^{(0,0)} = 1$ et $d^{(0)} = 1$ ainsi que des niveaux de précisions neutronique et multiphysique à atteindre, par exemple $\varepsilon_N = 10^{-12}$ et $\varepsilon_{MP} = 10^{-10}$. On trace alors, pour la fréquence de Fourier fondamentale ω_1 , l'évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques nécessaire pour atteindre une erreur de ε_N à chaque itération multiphysique et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}(\omega_1)$ au cours du calcul multiphysique pour des couplages en boîtes noires et hybride. L'objectif est de comparer sur ce cas simplifié les différentes approches. On s'attend, du fait de la comparaison sur le rayon spectral vue dans le paragraphe précédent, à ce que les couplages en boîtes noires soient plus efficaces que les couplages hybrides équivalents. Si le mode fondamental n'est pas forcément le plus lent à converger selon les couples (β, K) retenus, son étude est malgré tout centrale puisqu'il s'agit du mode qui peut poser des problèmes de convergence pour notre problème. Les résultats sont donnés figure 8.2 pour le cas avec convergence fine et figure 8.3 pour le cas avec convergence partielle.

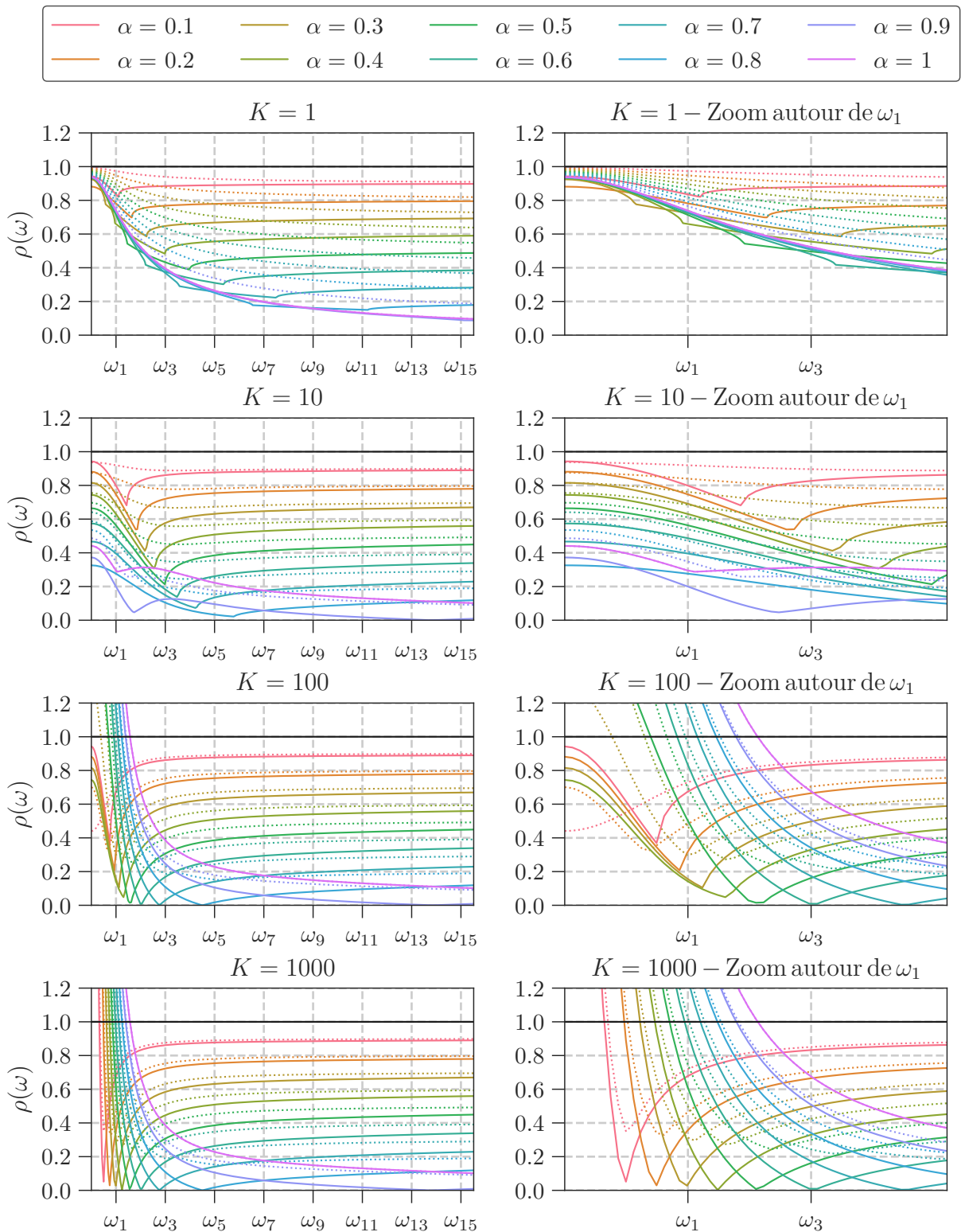


FIGURE 8.1 – Évolution de $\rho^A(\omega, \alpha, K)$ et $\rho^B(\omega, \alpha, K)$ en fonction de ω pour différentes valeurs du facteur de relaxation et différents niveaux de convergence partielle K - Zoom sur les premières harmoniques - Comparaison d'un couplage en boîtes noires (trait plein) à un couplage hybride (trait en pointillé)

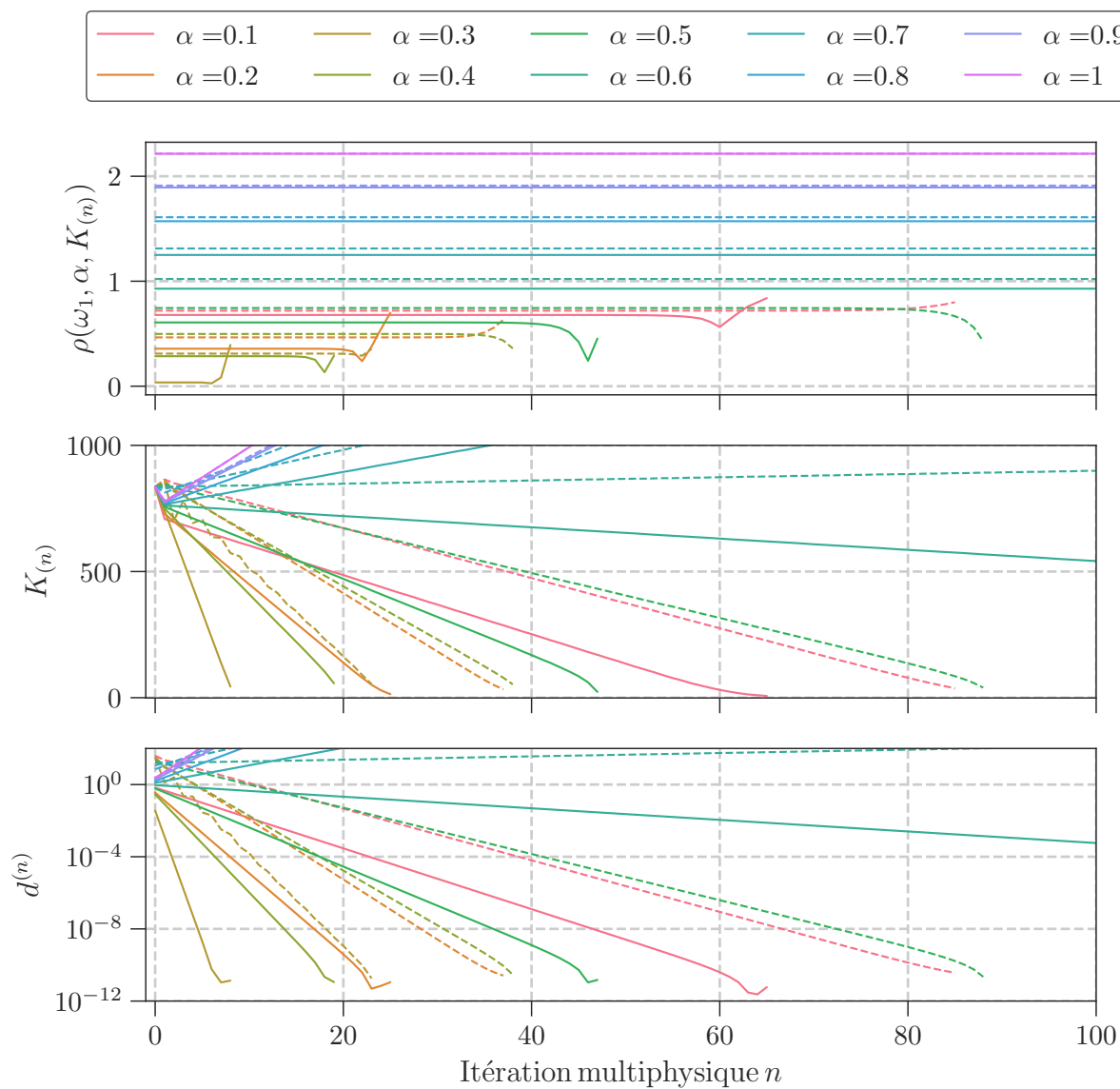


FIGURE 8.2 – Évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques nécessaire pour converger et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}$ au cours du calcul multiphysique pour la fréquence de Fourier fondamentale ω_1 . En trait plein, le cas pour un couplage haut, en pointillé, le couplage équivalent hybride

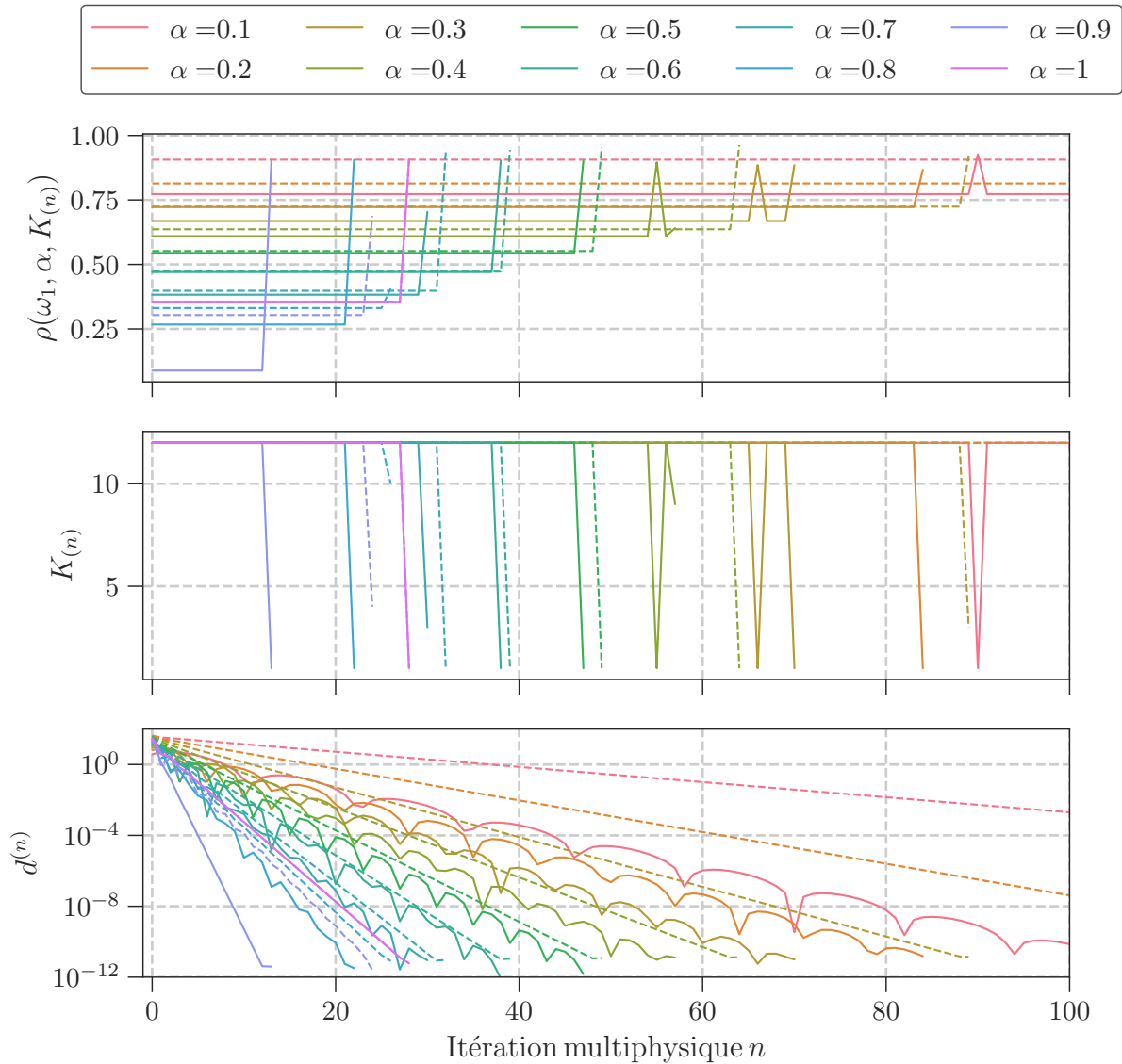


FIGURE 8.3 – Évolution du rayon spectral, du nombre d'itérations neutroniques nécessaires pour converger et de l'erreur multiphysique $d^{(n)}$ au cours du calcul multiphysique pour la fréquence de Fourier fondamental ω_1 avec convergence partielle. En trait plein, le cas avec convergence partielle ($K_{partielle} = 12$) pour un couplage haut, en pointillé, le couplage équivalent hybride

Comme pour les couplages en boîtes noires, on peut noter que l'introduction d'une relaxation hybride permet de stabiliser le couplage hybride et d'obtenir un schéma itératif convergent. Cependant, la plage de convergence en termes de facteur de relaxation est plus étroite que pour le couplage en boîtes noires : ainsi, avec convergence fine ($K = 1000$), le cas $\alpha = 0.5$ converge dans le cas d'un couplage en boîtes noires alors que ce n'est plus le cas pour un couplage hybride. On remarque également que, comme pour les couplages en boîtes noires, l'introduction de la convergence partielle pour les couplages hybrides permet de stabiliser le calcul et de ne plus avoir à introduire un facteur de relaxation, comme on a pu l'observer pendant l'étude des différents cas réels dans la partie II. On a des vitesses de convergence proches par rapport aux couplages équivalents en boîtes noires, mais toujours inférieures. Notamment, la convergence partielle la plus efficace pour le couplage en boîtes noires ($\alpha = 0.9$ et $K = 12$) semble être beaucoup plus efficace que pour le cas équivalent hybride ($\alpha = 0.9$ et $K = 12$) en termes de nombre d'itérations multiphysiques à réaliser pour converger.

L'introduction d'une relaxation au niveau du flux convergé n'apporte donc pas ici d'avantage par rapport à l'introduction d'une relaxation multiphysique sur la nappe de puissance. On touche ici aux limites de cette étude : le fait de travailler sur un cas simplifié ne nous permet pas d'analyser l'ensemble des remarques faites partie II. De plus, les remarques présentées ici ne sont valables que lorsqu'on est proche de la solution. On peut imaginer que les couplages hybrides tels que mis en place dans la partie II apportent un réel avantage au début du calcul multiphysique, justement lorsqu'on est loin de la solution globale et que la cohérence entre le flux et la nappe de puissance est importante. C'est d'ailleurs ce qu'on a observé section 6.3 lorsqu'on a comparé les nappes de puissance au cours du couplage pour le mini-cœur, figures 6.6, 6.7 et 6.8. De fait, lorsqu'on est proche de la solution multiphysique, cette cohérence physique est plus ou moins assurée *de fait* : les couplages hybrides apportent donc moins dans de telles situations.

8.4 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a pu développer un cadre analytique pour analyser un premier couplage hybride : il s'agit simplement d'introduire une relaxation sur le flux convergé entre deux itérations multiphysiques. En reprenant la démarche introduite pour les couplages en boîtes noires, on a pu traduire ce couplage en un schéma itératif avec une relation géométrique entre les erreurs neutronique et multiphysique, donné par (8.2.4). La convergence de ce schéma est alors dictée par la valeur du rayon spectral associé à ce système.

L'étude du rayon spectral associé à (8.2.4) permet de mettre en évidence qu'un couplage en boîtes noires équivalent, présentant donc le même facteur de relaxation ainsi que le même nombre d'itérations neutroniques effectuées, semble plus efficace par rapport à un couplage hybride, en termes de vitesse de convergence multiphysique et de stabilité du schéma de couplage. On ne retrouve donc pas les conclusions qu'on a pu faire partie II. Malgré tout, cette étude nous a permis de prouver le lien entre convergence partielle et introduction d'une relaxation bas niveau pour les couplages hybrides, lien qui semble plus intriqué que pour les couplages en boîtes noires. En effet, les termes impactant les différentes erreurs et faisant apparaître le facteur de relaxation "hybride" font toujours jouer le nombre d'itérations neutroniques, ce qui n'était pas le cas pour les couplages en boîtes noires.

Comme précisé dans les analyses menées précédemment, l'ambition de ce chapitre est avant tout de saisir comment le passage à un couplage hybride peut modifier la *structure* du système

itératif rendant compte de l'évolution des erreurs lors du couplage multiphysique. À ce titre, on considère qu'on a effectivement pu apercevoir quelques différences notables et que cette étude peut être la première étape vers une analyse plus poussée des couplages hybrides. Notamment, on peut souligner des différences majeures avec le cadre des études réelles paramétriques menées dans la partie II, au-delà du problème physique simplifié étudié. La première est que l'analyse théorique menée dans ces deux chapitres n'est valable *a priori* que proche de la solution. C'est en effet la condition pour qu'on puisse linéariser nos différentes équations. Cependant, on s'attend à ce que l'apport des couplages hybrides soient d'autant plus important qu'on est loin de notre solution multiphysique. Le résultat obtenu dans ce chapitre n'est donc, à ce titre, pas totalement surprenant. La deuxième limite est qu'on a introduit dans le chapitre 6 à l'intérieur du solveur neutronique une méthode d'accélération et non pas simplement un facteur de relaxation.

On se propose donc dans un dernier chapitre de développer un cadre pour analyser l'effet de l'accélération d'Anderson sur le système linéaire rendant compte de l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique pour un couplage en boîtes noires et pour un autre hybride.

Chapitre 9

Étude de l'influence de l'accélération d'Anderson sur les couplages en boîtes noires et hybride pour la plaque mono-énergétique infinie

On cherche dans ce chapitre à introduire l'accélération d'Anderson pour les deux types de couplage, à savoir en boîtes noires sur la nappe de puissance et hybride sur le flux convergé. L'objectif est d'obtenir un système itératif rendant compte de l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique pour chacune des différentes stratégies de couplage. Cela doit permettre de comprendre de quelle manière l'accélération d'Anderson modifie le système régissant l'évolution des erreurs mis en évidence au paragraphe 7.2.2.2 par le système (7.2.7) pour le couplage en boîtes noires et en section 8.2.2 avec (8.2.4) pour le couplage hybride. On cherche par là à comparer les systèmes obtenus pour chacun des types de couplage et à donner quelques pistes d'explication concernant les performances observées en termes de réduction du nombre d'itérations neutroniques avec l'utilisation de l'accélération d'Anderson pour les couplages hybrides, qu'on a mis en évidence dans le chapitre 6.

Pour cela, on reprend la démarche proposée dans les deux chapitres précédents, en s'intéressant au problème couplé mono-énergétique. Dans la suite, on met en évidence la manière dont le système (7.2.7) est modifié par l'accélération d'Anderson appliquée à la nappe de puissance pour les couplages en boîtes noires et ensuite on montre en quoi l'utilisation de la méthode d'Anderson pour les couplages hybrides permet *a priori* une meilleure convergence pour le problème couplé en analysant la manière dont le système (8.2.4) est modifié par Anderson.

Sommaire

9.1	Impact de l'accélération d'Anderson sur un couplage en boîtes noires . . .	230
9.1.1	Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage en boîtes noires . . .	230
9.1.2	Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage en boîtes noires	231
9.2	Impact de l'accélération d'Anderson sur un couplage hybride	234
9.2.1	Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage hybride	234

9.2.2	Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage hybride	235
9.3	Bilan du chapitre	238

9.1 Mise en évidence de l'impact de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique pour un couplage en boîtes noires

9.1.1 Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage en boîtes noires

La mise en équation est identique à celle développée dans la section 7.2.1. Seule l'étape concernant le calcul de la nouvelle puissance est impactée par l'utilisation de l'accélération d'Anderson, présentée section 2.3. Ainsi, le calcul de la puissance se fait en deux étapes. Plaçons-nous à la fin de l'itération multiphysique n . On détermine dans un premier temps la nouvelle puissance à partir du nouveau flux convergé pour tout point x de notre domaine \mathfrak{D} , à savoir :

$$p^{(n)}(x) = R\Sigma_f^{(n)}(x)\phi^{(n,K(n))}(x).$$

Ensuite, on applique l'accélération d'Anderson à l'ordre m : on considère l'ordre $m_{(n)} = \min(n, m)$ pour déterminer la nouvelle puissance accélérée qui sera utilisée pour le calcul thermohydraulique à l'itération multiphysique $n + 1$:

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}^{(n+1)}(x) = \sum_{\ell=0}^{m_{(n)}} \alpha_{\ell}^{(n)} p^{(n-m_{(n)}+\ell)}(x),$$

avec les coefficients d'Anderson $(\alpha_{\ell}^{(n)})_{\ell=0, \dots, m_{(n)}}$ qui minimisent la norme

$$\left\| \sum_{\ell=0}^m \alpha_{\ell}^{(n)} \left(p^{(n-m_{(n)}+\ell)}(x) - \mathbf{P}^{(n-m_{(n)}+\ell)}(x) \right) \right\|_2$$

sous la contrainte

$$\sum_{\ell=0}^{m_{(n)}} \alpha_{\ell}^{(n)} = 1.$$

Le reste du schéma numérique présenté en section 7.2.1 reste inchangé : à l'itération multiphysique $n + 1$, la nappe de température sera mise à jour en utilisant la nappe de puissance accélérée calculée à la fin de l'itération multiphysique n , c'est-à-dire $\mathbf{P}^{(n+1)}$, c'est-à-dire :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, T^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{P}^{(n+1)}(x)).$$

Ensuite, on met à jour les sections efficaces et on résout le problème neutronique avec les nouvelles sections efficaces macroscopiques.

9.1.2 Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage en boîtes noires

On ne détaillera ici que les aspects liés à l'introduction de l'accélération d'Anderson, le reste étant identique à ce qu'on a présenté et démontré au chapitre 7.

Linéarisation : L'étape de linéarisation conduit directement, en se donnant une itération multiphysique n , à :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = \sum_{\ell=0}^{m(n)} \alpha_\ell^{(n)} p_1^{(n-m(n)+\ell)}(x),$$

avec les $(\alpha_\ell^{(n)})_{\ell=0, \dots, m(n)}$ minimisant $\left\| \sum_{\ell=0}^{m(n)} \alpha_\ell^{(n)} (p_1^{(n-m(n)+\ell)}(x) - \mathbf{P}_1^{(n-m(n)+\ell)}(x)) \right\|_2$ sous la contrainte $\sum_{\ell=0}^m \alpha_\ell^{(n)} = 1$.

Décomposition des erreurs en série de Fourier : Celle-ci reste inchangée. On introduit simplement la série de Fourier associée aux erreurs $p_1^{(n)}$ sur la puissance $p^{(n)}$:

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \forall n \geq 0, p_1^{(n)}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} e^{(n)}(\omega_j, (\alpha_\ell^{(n)}), K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}). \quad (9.1.1)$$

Plaçons-nous à une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$ donnée pour toute la suite du développement. On a donc, en omettant les dépendances pour alléger les notations et par identification :

$$\forall n \geq 0, d^{(n+1)} = \sum_{\ell=0}^{m(n)} \alpha_\ell^{(n)} e^{(n-m(n)+\ell)}.$$

Mise en évidence du système linéaire régissant les erreurs : Le système obtenu reliant les différents coefficients de Fourier introduits, pour une fréquence de Fourier ω fixée, peut être déterminé comme pour (7.2.9) ou (8.2.3).

On se place au début de l'itération multiphysique $n + 1$. On a donc une puissance accélérée $d^{(n+1)} = \sum_{\ell=0}^{m(n)} \alpha_\ell^{(n)} e^{(n-m(n)+\ell)}$ qui permet de calculer une nouvelle température, de mettre ensuite à jour les sections efficaces macroscopiques, et enfin de déterminer le nouveau flux scalaire solution de l'itération multiphysique $n + 1$. On calcule ensuite la nouvelle puissance correspondante, ainsi que celle accélérée avec l'accélération d'Anderson à la fin de l'itération multiphysique $n + 1$. C'est cette dernière qui servira pour la prochaine itération multiphysique : il s'agit donc de $p^{(n+2)}$.

Finalement, on obtient un système sur les coefficients de Fourier :

$$\left\{ \begin{array}{l} c^{(n+1)}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} d^{(n+1)}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \left(\sum_{\ell=0}^{m(n)} \alpha_\ell^{(n)} e^{(n-m(n)+\ell)}(\omega) \right) \\ a^{(n+1, K(n+1))}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K(n+1)} a^{(n, K(n))}(\omega) - \gamma \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K(n+1)}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} c^{(n+1)}(\omega) , \\ e^{(n+1)}(\omega) = R\Sigma_{f1} \Phi_0 c^{(n+1)}(\omega) + R\Sigma_{f0} a^{(n+1, K(n+1))}(\omega) \\ d^{(n+2)}(\omega) = \sum_{\ell=0}^{m(n+1)} \alpha_\ell^{(n+1)} e^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(\omega) \end{array} \right.$$

où on a indiqué en orange les différences avec le système linéarisé régissant les erreurs pour le couplage en boîtes noires déterminé au paragraphe 7.2.2.2. Les $(\alpha_\ell^{(n+1)})_{\ell=0, \dots, m(n+1)}$ introduits minimisent quant à eux :

$$\left\| \sum_{\ell=0}^{m(n+1)} \alpha_\ell^{(n+1)} \left(p^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(x) - \mathbf{P}^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(x) \right) \right\|_2,$$

c'est-à-dire :

$$\left\| \sum_{\ell=0}^{m(n+1)} \alpha_\ell^{(n+1)} \left(p_1^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(x) - \mathbf{P}_1^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(x) \right) \right\|_2, \quad (9.1.2)$$

toujours sous la contrainte $\sum_{\ell=0}^{m(n+1)} \alpha_\ell^{(n+1)} = 1$.

Finalement, on peut définir les coefficients C_i tels que pour tout ω dans $(\omega_j)_j$:

$$\begin{aligned} - C_1 &:= C_1(\omega, (\alpha_\ell), K_{(n+1)}) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} ; \\ - C_2 &:= C_2(\omega, (\alpha_\ell), K_{(n+1)}) = - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \\ - C_3 &:= C_3(\omega, (\alpha_\ell), K_{(n+1)}) = R\Sigma_{f0} \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} \\ - C_4 &:= C_4(\omega, (\alpha_\ell), K_{(n+1)}) = \frac{R\Sigma_{f1} \Phi_0}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} - \frac{R\gamma \Sigma_{f0} \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} 1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega) \left(1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)}. \end{aligned}$$

Cela permet de rendre compte du système décrivant l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique de ce problème couplé, qui est donné par :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \forall n \geq 0, W^{(n+1)}(\omega) = C^{(n)}(\omega, (\alpha_\ell^{(n)}), K_{(n+1)}) W^{(n)}(\omega) \quad (9.1.3)$$

avec :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \forall n \geq 0, W^{(n)}(\omega) := \begin{pmatrix} a^{(n)}(\omega, K_{(n)}) \\ e^{(n-m(n))}(\omega, K_{(n)}) \\ \vdots \\ e^{(n)}(\omega, K_{(n)}) \end{pmatrix}$$

d'une part et d'autre part, en omettant les différentes dépendances des coefficients C_i pour alléger les notations, pour tout $n \geq 0$ et pour toute fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$:

$$C^{(n)}(\omega, (\alpha_\ell^{(n)}), K_{(n+1)}) := \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \alpha_0^{(n)} & C_2 \alpha_1^{(n)} & \cdots & \cdots & C_2 \alpha_{m-1}^{(n)} & C_2 \alpha_m^{(n)} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ C_3 & C_4 \alpha_0^{(n)} & C_4 \alpha_1^{(n)} & \cdots & \cdots & C_4 \alpha_{m(n)-1}^{(n)} & C_4 \alpha_{m(n)}^{(n)} \end{pmatrix}$$

Analyse du système linéarisé : Il est important de noter que les coefficients $(\alpha_\ell^{(n)})$ varient à chaque nouvelle itération multiphysique n . On remarque que les mêmes coefficients d'Anderson apparaissent partout dans la matrice. La neutronique *voit* l'étape d'accélération *via* la mise à jour des sections efficaces, mais est initialisée avec une valeur pour le flux scalaire qui n'est pas cohérente avec le niveau de puissance accélérée et qui n'est pas impactée par cette étape d'accélération. Cela se traduit dans la première ligne de la matrice par le fait que le coefficient devant $a^{(n)}(\omega, K_{(n)})$ lors du calcul de $a^{(n+1)}(\omega, K_{(n+1)})$ n'est impacté par aucun coefficient d'Anderson : si l'étape d'accélération permet de réduire efficacement l'erreur sur la nappe de puissance, ce gain peut être en partie effacé par une erreur sur la neutronique encore importante : malgré une nappe de puissance proche de la nappe solution à la suite de l'étape d'accélération, on aura potentiellement à réaliser un grand nombre d'itérations neutroniques car, lors de l'initialisation du problème à valeur propre, le flux utilisé ne correspond pas à la nappe de puissance accélérée. Cela confirme donc en partie les remarques que nous avons pu faire lors de l'étude des cas réels, au chapitre 6

Remarque sur le calcul des coefficients d'Anderson : On n'est pas en mesure d'aller plus loin dans cette analyse puisque la résolution du problème d'optimisation sous contrainte (9.1.2) nécessite de connaître les $p_1^{(n+1-m(n+1)+\ell)}$ ou bien de les remplacer par leur décomposition en série de Fourier, auquel cas il faut, pour pouvoir effectivement déterminer les $(\alpha_\ell^{(n)})$, tronquer à un ordre L ladite décomposition puisqu'il faut autrement minimiser :

$$\left\| \sum_{\ell=0}^{m(n+1)} \alpha_\ell^{(n+1)} \left(\sum_{j=0}^{\infty} [e^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(\omega_j) - d^{(n+1-m(n+1)+\ell)}(\omega_j)] \exp(i\omega_j x \Sigma t_0) \right) \right\|_2, \quad (9.1.4)$$

Récemment, dans [SK22], une manière d'effectivement analyser l'impacte de l'accélération d'Anderson pour ce type de problème est introduite, en se donnant effectivement un flux $\phi(x)$ initial

et en estimant le rayon spectral par $\rho_n = \frac{\|\phi^{(n+1)} - \phi^{(n)}\|}{\|\phi^{(n)} - \phi^{(n-1)}\|}$. Il est donc possible de poursuivre cette analyse à l'avenir.

Bilan de la section : On a pu dans cette section mettre en évidence l'apport de l'accélération d'Anderson à l'ordre m et la manière dont l'introduction de cette accélération impacte l'évolution des différentes erreurs au cours du calcul multiphysique pour un couplage en boîtes noires. Cela se traduit dans la *structure* du système (9.1.3) rendant compte de l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique de notre problème couplé par rapport au système (7.2.7) équivalent sans l'accélération d'Anderson. On note ainsi l'introduction des différents coefficients issus de l'étape d'accélération devant les termes m liés à l'erreur multiphysique et à son historique, sur les m dernières nappes de puissance. Dans la section suivante, on reproduit cette analyse pour un couplage hybride et on met en évidence les différences avec le cas d'un couplage en boîtes noires.

9.2 Mise en évidence de l'impact de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique pour un couplage hybride

9.2.1 Mise en place de l'accélération d'Anderson pour le couplage hybride

On cherche dans ce paragraphe à appliquer l'accélération d'Anderson sur le flux convergé. Les différentes étapes du schéma numérique peuvent être résumées de la manière suivante : au début de l'itération multiphysique n , on met à jour les sections efficaces, *via* un calcul de thermohydraulique à partir de la nappe de puissance déterminée à la fin de l'itération multiphysique $n - 1$. Ensuite, on résout le problème de neutronique avec la méthode de la puissance itérée. Une fois la convergence du problème neutronique atteinte, on dispose d'un nouveau flux convergé et on réalise une étape d'accélération avec Anderson à partir des m derniers flux convergés. Le flux accéléré ainsi déterminé sert à calculer la nappe de puissance à la fin de l'itération multiphysique n qui sera utilisée pour le calcul thermohydraulique à l'itération multiphysique $n + 1$. De plus, on initialise également le problème neutronique à l'itération multiphysique $n + 1$ avec ce flux accéléré. La cohérence entre puissance et flux est donc bien maintenue au début de l'itération multiphysique $n + 1$. Détaillons cela.

La mise en équation est identique à celle développée dans la section 8.1. Seule l'étape concernant le calcul du nouveau flux relaxé est impactée par l'utilisation de l'accélération d'Anderson. Ainsi, si on se place à la fin de l'itération multiphysique n , et si on conserve la notation $m_{(n)} = \min(n, m)$, la mise à jour du flux scalaire s'effectue de la manière suivante :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, \phi^{(n+1,0)}(x) := \sum_{\ell=0}^{m_{(n)}} \beta_{\ell}^{(n)} \phi^{(n-m_{(n)}+\ell, K_{(n-m_{(n)}+\ell)})}(x). \quad (9.2.1)$$

Comme en section 9.1.1 on a introduit les coefficients d'Anderson $(\beta_{\ell}^{(n)})_{\ell=0, \dots, m_{(n)}}$ minimisant :

$$\left\| \sum_{\ell=0}^{m_{(n)}} \beta_{\ell}^{(n)} \left(\phi^{(n-m_{(n)}+\ell, K_{(n-m_{(n)}+\ell)})}(x) - \phi^{(n-m_{(n)}+\ell, 0)}(x) \right) \right\|_2,$$

sous la contrainte $\sum_{\ell=0}^{m(n)} \beta_{\ell}^{(n)} = 1$. On accélère bien le calcul du flux convergé à partir de l'historique des $m(n)$ derniers flux convergés, chacun étant solution du problème d'une itération multiphysique ℓ associée à une nappe de température $T^{(\ell)}$.

On n'a ensuite plus qu'à calculer la nouvelle puissance à partir du flux accéléré :

$$\forall x \in \mathfrak{D}, p^{(n)}(x) = R\Sigma_f^{(n)}(x)\phi^{(n+1,0)}(x).$$

9.2.2 Influence de l'accélération d'Anderson sur l'évolution des erreurs pour le couplage hybride

Donnons-nous une itération multiphysique n pour la suite.

Linéarisation : L'étape de linéarisation conduit là encore directement à partir de la définition de $\phi^{(n+1,0)}$ donnée par (9.2.1), à :

$$\phi_1^{(n+1,0)}(x) = \sum_{\ell=0}^{m(n)} \beta_{\ell}^{(n)} \phi_1^{(n-m(n)+\ell, K_{(n-m(n)+\ell)}}(x),$$

avec les $(\beta_{\ell}^{(n)})_i$ minimisant $\left\| \sum_{\ell=0}^{m(n)} \beta_{\ell}^{(n)} \left(\phi_1^{(n-m(n)+\ell, K_{(n-m(n)+\ell)}}(x) - \phi_1^{(n-m(n)+\ell, 0)}(x) \right) \right\|_2$ toujours

sous la contrainte $\sum_{\ell=0}^{m(n)} \beta_{\ell}^{(n)} = 1$.

Décomposition des erreurs en série de Fourier : L'analyse de Fourier développée en section 8.2 reste inchangée, sauf en ce qui concerne l'étape de relaxation qu'on remplace ici par une étape d'accélération. On a dorénavant, pour une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$ donnée et en allégeant les notations :

$$a^{(n+1,0)}(\omega) = \sum_{\ell=0}^m \beta_{\ell}^{(n)} a^{(n-m(n)+\ell, K_{(n-m(n)+\ell)}}(\omega) \quad (9.2.2)$$

Par ailleurs, on a conservé les notations introduites en (9.1.1) concernant la décomposition en série de Fourier de la puissance $p^{(n)}$.

Mise en évidence du système linéaire régissant les erreurs Puisqu'on initialise le problème neutronique avec le flux accéléré calculé à l'itération multiphysique précédente, on a maintenant, par rapport à (8.2.3) :

$$a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} a^{(n+1,0)}(\omega) - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{\gamma}{\mathbf{th}_1^{-1}} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} e^{(n)}(\omega)$$

Finalement, on obtient un système sur les coefficients de Fourier décrivant les différentes étapes à l'itération multiphysique $n + 1$ et pour une fréquence de Fourier ω dans $(\omega_j)_j$ donnée :

$$\begin{cases} c^{(n+1)}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} e^{(n)}(\omega) \\ a^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) = \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}} a^{(n+1, 0)}(\omega) - \gamma \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}} c^{(n+1)}(\omega) \\ a^{(n+2, 0)}(\omega) = \sum_{\ell=0}^m \beta_\ell^{(n+1)} a^{(n+1-m(n)+\ell, K_{(n+1-m(n)+\ell)})}(\omega) \\ e^{(n+1)}(\omega) = R\Sigma_{f1} \Phi_0 c^{(n+1)}(\omega) + R\Sigma_{f0} a^{(n+2, 0)}(\omega) \end{cases} \quad (9.2.3)$$

On notera qu'on a deux familles de coefficients d'Anderson, correspondant à deux accélérations successives : les $(\beta_\ell^{(n)})_\ell$ ont été introduits précédemment. Ils sont déterminés lors de l'itération multiphysique n , lorsqu'on détermine le flux accéléré $\phi^{(n+1, 0)}$ qui nous sert à calculer la puissance $p^{(n)}$. Ainsi, ils n'apparaissent pas explicitement dans (9.2.3) mais *via* $a^{(n+1, 0)}(\omega)$ et sa définition donnée en (9.2.2). Les $(\beta_\ell^{(n+1)})_\ell$ jouent le même rôle lors de l'itération multiphysique $n + 1$. Le calcul de la puissance à la fin de l'itération $n + 1$ fait donc intervenir les deux familles de coefficients, puisque cela implique le flux initialisé au début de l'itération multiphysique $n + 1$, calculé à partir des $(\beta_\ell^{(n)})_\ell$ et le flux accéléré à la fin de l'itération multiphysique $n + 1$, donné par les $(\beta_\ell^{(n+1)})_\ell$.

À partir de (9.2.3), on en déduit le système rendant compte du problème multiphysique couplé à l'itération multiphysique $n + 1$, donné par :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \forall n \geq 0, Y^{(n+1)}(\omega) = D^{(n)}\left(\omega, (\beta_\ell^{(n)}), (\beta_\ell^{(n+1)}), K_{(n+1)}\right) Y^{(n)}(\omega), \quad (9.2.4)$$

avec :

$$\forall \omega \in (\omega_j)_j, \forall n \geq 0, Y^{(n)}(\omega) := \begin{pmatrix} a^{(n-m)}(\omega, K_{(n)}) \\ \vdots \\ a^{(n)}(\omega, K_{(n)}) \\ e^{(n)}(\omega, K_{(n)}) \end{pmatrix}.$$

Si on note :

$$\begin{aligned} - D_1(\omega, K_{(n+1)}) &:= \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}; \\ - D_2(\omega, K_{(n+1)}) &:= -\frac{\gamma \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} 1 - \left(\frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \right)^{K_{(n+1)}}}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega) \frac{1 - \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega}}{\omega}}; \\ - D_3 &:= R\Sigma_{f0}; \\ - D_4(\omega) &:= \frac{\Sigma_{f1} \Phi_0}{\Sigma_{f0} \mathbf{th}_1^{-1}(\omega)}, \end{aligned}$$

on a alors :

$$\mathbf{L}_{m+1}^{(n)} := D_1 \times \begin{pmatrix} \beta_0^{(n)} \\ \beta_1^{(n)} \\ \vdots \\ \beta_m^{(n)} \\ \frac{D_2}{D_1} \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{L}_{m+2}^{(n)} := D_3 \times \begin{pmatrix} D_1 \beta_0^{(n)} \beta_m^{(n+1)} \\ D_1 \beta_1^{(n)} \beta_m^{(n+1)} + \beta_0^{(n+1)} \\ \vdots \\ D_1 \beta_m^{(n)} \beta_m^{(n+1)} + \beta_{m-1}^{(n+1)} \\ D_2 \beta_m^{(n+1)} + \frac{D_4}{D_3} \end{pmatrix},$$

où on a omis de préciser les dépendances des D_i qui sont explicitées ci-dessous, ce qui nous permet d'expliciter la matrice $D^{(n)}(\omega, (\beta_\ell^{(n)}), (\beta_\ell^{(n+1)}), K_{(n+1)})$:

$$\begin{cases} \forall \omega \in (\omega_j)_j \\ \forall n \geq 0 \end{cases}, D^{(n)}(\omega, (\beta_\ell^{(n)}), (\beta_\ell^{(n+1)}), K_{(n+1)}) := \begin{array}{c} \begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc} 0 & \boxed{\text{Id}_m} & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & & 0 \end{array} \right) \\ \mathbf{L}_{m+1}^{(n) \mathbf{T}} \\ \mathbf{L}_{m+2}^{(n) \mathbf{T}} \end{array} \end{array} \cdot$$

← m+2 colonnes →

↑ m+2 lignes ↓

Analyse du système linéarisé : On remarque que la matrice $D^{(n)}(\omega, (\beta_\ell^{(n)}), (\beta_\ell^{(n+1)}), K_{(n+1)})$

introduite fait intervenir les coefficients d'Anderson issus de deux accélérations successives. Comme on l'a expliqué, on a dans ce schéma de couplage une cohérence entre la nappe de puissance qui sert à mettre à jour les sections efficaces et le flux qui sert à initialiser le problème de neutronique. Cela se traduit par le rôle joué par les $(\beta_\ell^{(n)})_i$ dans les vecteurs $\mathbf{L}_{m+1}^{(n)}$ et $\mathbf{L}_{m+2}^{(n)}$. On comprend dans un tel cas que, si le flux accéléré est proche du flux solution du problème multiphysique global, la nappe de puissance se rapprochera également de sa solution. On comprend également qu'on tire parti d'une double accélération à chaque itération multiphysique alors que ça n'était pas le cas pour les couplages en boîtes noires, sur la nappe de puissance simplement. On arrive donc ici à donner des éléments théoriques permettant de comprendre, sur un cas simplifié, les différences qu'entraînent ce changement de niveau dans le couplage en termes de système numérique à résoudre et d'interaction entre les différentes erreurs faites d'un point de vue neutronique et multiphysique.

La même remarque concernant la détermination effective des coefficients d'Anderson que celle donnée à la fin du paragraphe 9.1.2 peut être faite ici.

Bilan de la section : On a pu dans cette section mettre en évidence pour les couplages hybrides l'apport de l'accélération d'Anderson à l'ordre m et la manière dont l'introduction de cette accélération impacte l'évolution des différentes erreurs au cours du calcul multiphysique.

Cela se traduit *via* la composition du système (9.2.4) rendant compte de l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique de notre problème couplé, qu'il convient de comparer au système (8.2.4) pour un problème équivalent mais sans l'accélération d'Anderson. On a ainsi observé que deux familles de coefficients d'Anderson agissent sur les erreurs à la fois multiphysique et neutronique à chaque itération multiphysique. De plus, on a montré que la cohérence entre la puissance et le flux qui sert à initialiser le problème neutronique à chaque itération multiphysique était maintenue au cours du calcul.

9.3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, on a introduit l'accélération d'Anderson pour les couplages à en boîtes noires et pour les couplages hybrides. Tout d'abord, on a modifié les problèmes décrits en sections 7.2 et 8.1 en y introduisant une étape d'accélération à la place de l'application d'un facteur de relaxation. Ensuite, on a linéarisé les différentes équations régissant le problème introduit respectivement dans les sections 9.1.1 et 9.2.1. Cela nous a permis de déterminer un système linéarisé déterminant l'évolution des erreurs neutroniques, thermohydraulique et multiphysique, sur la nappe de puissance donc, au cours du calcul multiphysique. La décomposition de ces erreurs en série de Fourier nous a permis de déterminer un schéma itératif rendant compte du problème couplé avec l'accélération d'Anderson, donné par les systèmes (9.1.3) et (9.2.4). On a ainsi pu mettre en évidence les différences entre les deux méthodes de couplage. Dans le cadre d'un couplage en boîtes noires, les coefficients issus de l'étape d'optimisation dans l'accélération d'Anderson n'interviennent ainsi que devant les termes d'erreurs liées à la nappe de puissance. De plus, dans la matrice régissant l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique, seule une famille de coefficients d'Anderson apparaît, correspondant au problème d'optimisation dérivé des différentes étapes de calcul au cours de l'itération multiphysique $n + 1$. Au contraire, pour les couplages hybrides, les termes d'erreur neutronique et multiphysique sont tous impactés par les coefficients issus des deux dernières itérations accélérées. En effet, on voit apparaître dans ce cas deux niveaux d'accélération, le flux initial d'une itération multiphysique $n + 1$ étant issu d'une étape d'accélération menée à l'itération multiphysique n précédente et la puissance calculée à la fin de la même itération multiphysique $n + 1$ étant calculée suite à une seconde étape d'accélération. Ce simple cas d'étude permet donc de saisir certaines propriétés des couplages hybrides lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson pour accélérer la résolution du problème multiphysique considéré.

Conclusion de la troisième partie

Dans cette partie, on a pu introduire un problème simplifié s’approchant des calculs couplés entre neutronique et thermohydraulique faisant intervenir un solveur pour chacune des disciplines. Celui-ci rend compte d’un problème de transport neutronique mono-énergétique dans une plaque infinie. En supposant une diffusion isotrope, on a donc à résoudre un problème à valeur propre dont on détermine la solution avec la méthode de la puissance itérée. On a couplé ce problème neutronique avec une modélisation thermohydraulique du milieu, permettant d’introduire une dépendance des sections efficaces à la température de la plaque. La démarche d’analyse a été présentée en détails pour un premier cas simplifié. Elle s’appuie sur une linéarisation du problème initial, puis l’introduction de séries de Fourier associées aux différentes erreurs régissant le problème linéarisé.

Ce problème multiphysique couplé a servi dans un premier temps de support pour étudier les stratégies de couplage en boîtes noires et hybride. À chaque fois, on s’est intéressé au lien entre convergence partielle du problème neutronique et introduction d’une relaxation, au niveau de la nappe de puissance pour les couplages en boîtes noires et au niveau du flux convergé pour les couplages hybrides. On a montré dans les deux cas qu’effectivement, la convergence partielle agissait d’une manière similaire à une relaxation et permettait d’une part de stabiliser le calcul en rendant le schéma étudié convergeant, et d’autre part d’accélérer la convergence du problème multiphysique global. On a également pu démontrer que lorsqu’on introduit de la convergence partielle, on convergeait malgré tout vers la même solution que le problème couplé avec convergence fine. De ce fait, l’intérêt de la méthode et son efficacité ont été justifiés, rejoignant les remarques qui ont pu être faites dans la deuxième partie de ce manuscrit. Cependant, l’introduction d’une relaxation dans les couplages hybrides n’a pas permis de rendre compte de leur efficacité et on n’a pas retrouvé les conclusions faites à la suite de l’étude des cas de couplage réels menée au chapitre 6. Notamment, on a trouvé ici que les couplages équivalents en boîtes noires étaient plus efficaces que les couplages hybrides, ce qui contredit nos précédentes conclusions. Différentes hypothèses ont été formulées pour expliquer les limites de cette étude. La plus évidente est liée au fait qu’on a étudié une relaxation appliquée au flux neutronique et non pas une accélération à proprement parlé, contrairement à ce qui a été mis en place dans la partie II. Malgré tout, on aurait pu s’attendre à ce qu’une “relaxation hybride”, sur le flux donc, soit plus efficace qu’une relaxation équivalente en boîtes noires : une piste de réflexion intéressante d’après nous est liée à l’étape de linéarisation : les conclusions qu’on a pu tirer ici ne sont ainsi valables qu’une fois que l’on se place *assez* proche de la solution multiphysique globale. Or, il apparaît que les couplages hybrides apportent en termes de vitesse de convergence d’autant plus qu’on est loin de cette même solution, puisque le principal apport de ces couplages réside dans la cohérence entre nappe de flux et nappe de puissance qu’ils garantissent au cours du calcul multiphysique. Proche de la solution multiphysique, cette cohérence est *de fait* assurée, ce qui peut expliquer les performances limitées de ces couplages dans le cadre de cette étude.

On a également exploré la manière dont l'utilisation de l'accélération d'Anderson modifiait le système régissant l'évolution des différentes erreurs au cours du calcul multiphysique, et ce, pour les couplages en boîtes noires et hybrides. On a montré que dans le premier cas, l'étape d'accélération impactait uniquement l'erreur multiphysique et ne faisait intervenir qu'une unique famille de coefficients d'Anderson. À l'inverse, dans le cas des couplages hybrides, on a montré que les deux erreurs, neutronique et multiphysique, étaient impactées par l'accélération et qu'à chaque itération multiphysique, on avait deux familles de coefficients d'Anderson. L'efficacité des couplages hybrides est soulignée ici au moins dans la *structure* du système régissant l'évolution des erreurs du problème couplé lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson. Une fois encore, la cohérence entre le flux et la puissance est maintenue avec les couplages hybrides, ce qui est d'après nous un point clef. On n'a pas été en mesure de poursuivre cette analyse en déterminant effectivement pour un cas numérique les coefficients d'Anderson puisque cela aurait nécessité de résoudre le problème d'optimisation (9.1.4).

Différentes pistes pour prolonger et approfondir ces analyses ont été proposées. On peut ainsi essayer d'introduire un opérateur thermohydraulique dont le comportement se rapprocherait des solveurs thermohydrauliques industriels : cela permettrait notamment d'étudier la convergence partielle pour cet opérateur thermohydraulique. Enfin, si la généralisation aux cas multi-énergétiques a été développée en annexe D pour ne pas alourdir le propos ici, celle-ci peut également être développée analytiquement : on n'y propose ainsi qu'une discussion au cas avec deux niveaux d'énergie, pour le couplage en boîtes noires. Les structures des systèmes obtenus semblant être conservées, cette généralisation ne semble pas poser de problème particulier : le travail reste malgré tout à mener.

Conclusion générale

Bilan général

L'objectif de cette thèse était l'étude des algorithmes de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique, et la détermination d'une méthodologie de couplage pour les outils de calcul développés au CEA. Tout au long de ce travail, on s'est concentré en premier lieu sur le contrôle du temps de calcul total, deuxièmement sur la capacité des méthodes à améliorer la vitesse de convergence du problème multiphysique et à limiter le nombre total d'itérations monophasiques effectuées au cours du couplage et enfin sur la stabilité des couplages en fonction des méthodes utilisées.

Tout d'abord, on a présenté la manière dont les principaux algorithmes de résolution de problèmes non-linéaires peuvent permettre de réaliser ce type de simulations multiphysiques en couplant des codes de calcul préexistants. La méthode de Gauss–Seidel relaxée est la plus couramment utilisée dans le cadre des couplages en boîtes noires du fait de sa facilité d'utilisation. Celle-ci peut être accélérée avec des méthodes comme l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante, permettant d'accélérer la vitesse de convergence des calculs couplés. Une autre possibilité pour limiter le temps de calcul total est de contrôler la sur-résolution au cours des simulations couplées. La convergence partielle des solveurs est un moyen simple et efficace pour parvenir à cela. Une seconde approche consiste à faire évoluer la précision demandée aux solveurs au cours du calcul : il s'agit des méthodes de type *Residual Balance*, et notamment de celle de l'*Adaptive Residual Balance*. La méthode du JFNK, couramment utilisée pour les couplages multiphysiques, a en revanche été écartée de ce travail, ses performances étant étroitement liées à une étape de préconditionnement : elle est donc *a priori* plus complexe à mettre en œuvre que l'accélération d'Anderson, que l'on a étudiée, pour des performances comparables. Pour comparer ces algorithmes, on a développé deux cas d'études en trois dimensions : il s'agit d'un mini-cœur de REP et du cœur KAIST, issu d'un benchmark neutronique. On s'est intéressé à leur état stationnaire respectif, en couplant les codes APOLLO3® et THEDI et en étudiant un point fixe défini sur la nappe de puissance.

Ensuite, on a étudié, sur ces cas d'application, les différentes méthodes de couplage précédemment introduites. Dans un premier temps, on s'est restreint à des couplages en boîtes noires. On a montré que l'optimisation du niveau de convergence partielle pour APOLLO3® et du facteur de relaxation pour la méthode de Gauss–Seidel permet à la fois de stabiliser le couplage, de diminuer le temps de calcul total et de limiter le nombre d'itérations neutroniques et multiphysiques. Les valeurs optimisées de ces paramètres dépendent alors du cas d'étude. Après avoir illustré l'intérêt de la méthode de l'*Adaptive Residual Balance*, on a proposé une variante appelée *Dynamic Residual Balance*, permettant d'atteindre des temps de calcul comparables à l'approche optimisée avec Gauss–Seidel, mais présentant l'avantage de n'avoir aucun paramètre libre. On a finalement montré que l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante, appliquée sur la puissance dans le cadre des couplages en boîtes noires, permettent de garantir la convergence du calcul, sans toutefois apporter d'amélioration en termes de temps de calcul total par rapport aux approches précédentes, que ce soit avec convergence fine ou partielle d'APOLLO3®. Dans ce dernier cas, cela est dû au changement dans la définition même du point fixe qu'on cherche à accélérer, qui devrait alors être défini sur le flux et non plus sur la puissance.

L'enjeu principal en termes de temps de calcul s'avérant être le nombre d'itérations neutroniques à réaliser lorsqu'on converge finement APOLLO3®, on a implémenté l'accélération d'Anderson dans le solveur SP_N MINOS. Cela se traduit par une division par un facteur 3 à 6 du nombre

d'itérations par appel. On a montré qu'il était alors envisageable de réaliser des calculs couplés avec convergence fine des solveurs en un temps et un nombre total d'itérations neutroniques acceptables. En tirant parti de la linéarité entre source de fission et flux, on a par ailleurs été en mesure de limiter le surcoût associé à l'utilisation de l'accélération d'Anderson dans MINOS. Cela rend ainsi cette méthode d'accélération compétitive par rapport à l'accélération de Chebyshev initialement utilisée dans APOLLO3®. Combinée à une méthode de couplage multiphysique comme la méthode de la sécante ou l'accélération d'Anderson, appliquée alors à la nappe de puissance, on a à disposition une méthodologie sans paramètre libre, garantissant la convergence du couplage et limitant le nombre d'itérations neutroniques effectuées.

Enfin, on a proposé une nouvelle approche, dite hybride, pour réaliser des couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique. En donnant à l'accélération d'Anderson accès, au niveau multiphysique, au flux neutronique, dont dépend l'initialisation d'APOLLO3®, on améliore les vitesses de convergence neutronique et multiphysique. L'optimisation du niveau de convergence partielle permet également d'améliorer le temps de calcul final. En outre, l'approche hybride permet la mise en place de couplage bas niveau, pour lesquels la thermohydraulique et la thermique sont mises à jour à chaque itération neutronique. On est alors en mesure de réduire grandement le nombre d'itérations neutroniques à effectuer, au prix d'un grand nombre d'appels à la thermohydraulique. Selon le coût relatif entre ces deux calculs, cette manière de réaliser des calculs couplés peut être avantageuse.

Finalement, on a étudié le problème multiphysique analytique d'une plaque infinie, avec une neutronique mono-énergétique couplée à une thermohydraulique simplifiée. En linéarisant le système obtenu et en introduisant les séries de Fourier pour les termes d'erreurs, on a pu écrire le système régissant l'évolution de ces derniers au cours du couplage, selon la stratégie de couplage retenue. Cette analyse nous a permis de mettre en évidence le lien entre convergence partielle du solveur neutronique et introduction d'une relaxation pour la méthode de Gauss-Seidel, sur la nappe de puissance pour les couplages en boîtes noires et sur le flux pour les couplages hybrides. On a également pu illustrer les différences que cela implique dans la composition des systèmes à résoudre, régissant l'évolution des erreurs neutronique et multiphysique, entre les couplages en boîtes noires et l'approche hybride, lorsqu'on applique simplement une relaxation ou bien lorsqu'on utilise l'accélération d'Anderson.

Principaux apports et enseignements

Cette thèse a été l'occasion d'explorer différentes méthodologies de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Jusqu'ici, les couplages réalisés au CEA étaient généralement réalisés sur la nappe de puissance, *via* la méthode de Gauss-Seidel, avec convergence partielle et introduction d'un facteur de relaxation. Cette approche est efficace comme on l'a vu, à condition de choisir correctement le niveau de convergence partielle et la valeur du facteur de relaxation. La difficulté réside dans le choix de ces paramètres : ce qui est valable pour un cas d'étude ne l'est pas systématiquement pour un autre. L'utilisation de la convergence partielle semble être un choix par défaut, permettant de limiter le temps de calcul et de contrôler le nombre d'itérations neutronique effectuées au cours du couplage. La méthode du *Dynamic Residual Balance* est une possibilité pour s'extraire du caractère arbitraire de la convergence partielle. Il semble en effet bénéfique de faire évoluer la précision demandée à chacun des solveurs couplés en fonction de l'état respectif des autres codes de calcul impliqués dans le couplage. Se baser sur les erreurs initiales et

finales de chacun des solveurs semble être un moyen simple pour estimer, au cours du couplage, les variations d'amplitude des contre-réactions entre les solveurs et les perturbations qu'elles induisent pour chacun des solveurs. Ce type d'approche gagnerait d'après nous à être étudiée plus en détails, dans le cadre des couplages entre codes de calcul itératifs. Il s'agit ainsi d'un moyen d'estimer d'une certaine manière les réponses qu'entraîne la mise à jour d'une physique sur l'autre.

L'implémentation de l'accélération d'Anderson à l'intérieur du solveur MINOS semble intéressante en soi, puisqu'elle améliore la vitesse de convergence de la neutronique. Elle permet donc de mettre en place des couplages avec convergence fine du solveur. Associée à des méthodes de couplage, en boîtes noires ou hybrides, améliorant la stabilité de la simulation multiphysique, comme l'accélération d'Anderson ou la méthode de la sécante, son utilisation permet d'avoir à disposition une méthodologie de couplage simple entre neutronique, thermohydraulique et thermique. On peut sans difficulté introduire un code thermomécanique comme *ALCYONE* dans ce schéma de couplage, ou utiliser un solveur thermohydraulique plus précis comme *FLICA4*, sans craindre une explosion du nombre d'itérations neutroniques ou des problèmes de stabilité. Objectif au départ annexe de cette thèse, puisque n'étant pas lié à un quelconque aspect multiphysique, on apporte ici une méthode efficace pour améliorer les performances de MINOS. En prenant un peu de recul, il s'avère nécessaire, avant toute réflexion sur la mise en place de schéma de couplage plus ou moins sophistiqué, de s'interroger sur les codes de calcul que l'on souhaite coupler et les éventuelles difficultés qu'ils apportent avec eux.

L'approche hybride proposée avait pour objectif initial de rendre accessible les variables bas niveau du couplage à l'accélération d'Anderson : cela rend possible l'utilisation de n'importe quel niveau de convergence partielle et permet d'ailleurs la mise en place de couplage bas niveau. On a dû pour cela s'extraire de l'approche couplage en boîtes noires à proprement parler. Cela est l'occasion d'une réflexion générale sur les couplages entre codes de calcul existants : la facilité d'utilisation de l'accélération d'Anderson ou des méthodes de type relaxation dynamique, comme la méthode de la sécante, en font des candidates idéales pour stabiliser les couplages multiphysiques. Elles donnent cependant une fausse impression de simplicité sur la manière d'efficacement réaliser un tel couplage. En effet, un raisonnement mené uniquement sur les grandeurs physiques que l'on souhaite déterminer n'est pas suffisant et il convient avant toute chose de correctement définir le problème mathématique que l'on cherche à résoudre. Le sens physique permet alors, dans un nécessaire second temps et une fois le problème correctement défini, de tirer parti des éventuels réalités physiques reliant ces grandeurs. L'implémentation proposée de l'accélération d'Anderson pour MINOS s'appuie ainsi sur la linéarité entre flux neutronique et source de fission pour limiter le temps de calcul.

Les analyses de stabilité pour des couplages non-linéaires sont complexes à réaliser. Malgré tout, en étudiant des cas simples linéarisés, on montre qu'on est en mesure d'apporter des éléments de réponse et de justifier certains phénomènes qu'on observe lorsqu'on réalise des couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique, comme par exemple le lien entre convergence partielle neutronique et relaxation de la nappe de puissance ou du flux. De plus, on a pu prouver que pour le problème linéarisé, on convergeait toujours vers la même solution, avec ou sans convergence partielle. Réaliser ce type d'étude théorique est d'après nous nécessaire pour améliorer la compréhension des algorithmes de couplage et la confiance que l'on place dans les résultats multiphysiques obtenus. Cela est valable bien au-delà des seuls couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique.

Un point central abordé par cette thèse concerne la notion de convergence partielle du solveur neutronique. Si, initialement, son utilisation a pour objectif de limiter la sur-résolution vis-à-vis de la thermohydraulique et de la thermique, il apparaît ici que son apport est plus fondamental : elle est, en fait, une méthode d'accélération multiphysique en elle-même dans les couplages entre neutronique, thermohydraulique et thermique. Avec convergence partielle, il semble même plus efficace de réaliser ce type de calcul multiphysique avec une initialisation uniforme quelconque des solveurs couplés plutôt que de réaliser un calcul neutronique pur, en utilisant les grandeurs thermohydraulique et thermique solutions. Les résultats théoriques obtenus confirment d'ailleurs ce point et permettent de le présenter comme un enseignement *a priori* général : il ne s'agit pas d'une simple *astuce numérique* permettant de gagner en nombre d'itérations neutroniques et en temps de calcul total, mais bien méthode *en soi* améliorant la performance des couplages multiphysiques. À ce titre, on comprend l'intérêt des méthodes de type *Residual Balance*, qui permettent, de fait, de faire en quelque sorte évoluer le niveau de convergence partielle demandée aux solveurs au cours du couplage.

Deux visions du couplage semblent à termes se dessiner, selon que l'on recoure ou non à la convergence partielle des solveurs. L'avantage de faire converger à chaque appel les codes utilisés est d'avoir à disposition, à chaque itération multiphysique, des champs physiques avec un même niveau de précision et donc de confiance, facilitant par exemple les possibilités d'arrêt et de reprise des calculs. À condition d'avoir des solveurs suffisamment rapides à converger, cette approche ne présente pas réellement d'inconvénient, puisqu'alors la sur-résolution ne pénalise pas le temps de calcul total et simplifie la mise en place des couplages. À l'inverse, la convergence partielle doit être privilégiée en cas de difficulté à atteindre la précision cible demandée pour l'un des codes de calcul et si une approche de type *Residual Balance* n'est pas envisageable. Seul le résultat final est alors digne de confiance.

Perspectives

La première perspective de ce travail pourrait être l'optimisation et l'intégration de l'accélération d'Anderson dans MINOS. Notons par ailleurs que suite à ce travail de thèse, l'accélération d'Anderson a été intégrée à l'autre solveur cœur d'APOLLO3®, MINARET, qui résout les équations S_N . On a eu l'occasion à plusieurs reprises d'évoquer au cours de ce manuscrit les optimisations envisageables pour réduire le surcoût en temps de calcul associé à son utilisation : on peut imaginer une mémoire persistante, pour n'avoir à l'initialiser qu'une seule fois. Il est également nécessaire de rendre son utilisation possible pour des calculs parallélisés avec MPI : puisqu'on n'a utilisé que des fonctions présentes au préalable dans MINOS et compatibles avec une parallélisation, cela ne devrait pas poser de problème. Finalement, on peut envisager de rendre son implémentation compatible avec la méthode de décomposition de domaine proposée par MINOS.

Durant l'ensemble de ce travail de thèse, on ne s'est intéressé qu'à la vérification des méthodes et stratégies de couplage présentées précédemment : c'est une étape incontournable pour l'ensemble des algorithmes qui ont été abordés et plus particulièrement encore pour l'approche hybride, qui ne bénéficie pas de la vérification qu'offre l'utilisation de C3PO. Le travail mené a été avant tout méthodologique : on a utilisé des modélisations conçues pour conduire à des temps de calculs compatibles avec les expérimentations numériques. Il serait maintenant intéressant de tester les recommandations proposées sur des modélisations plus avancées, ainsi que d'explorer les performances des méthodologies de couplage qui ont été proposées sur des cas d'étude plus

réalistes. On peut penser par exemple à un cœur complet de réacteur à eau sous pression. La modélisation pourrait alors être à l'échelle cellule pour la neutronique et la thermique, avec une thermohydraulique à l'échelle sous canal, faisant donc intervenir les codes de calcul FLICA4 et ALCYONE. D'un point de vue plus subjectif, est revenue tout au long de cette thèse la question d'avoir un résultat de référence auquel se comparer. À l'avenir, les thématiques autour des simulations multiphysiques étant vouées à prendre de plus en plus d'importance, il pourrait être intéressant de développer un tel cas d'étude multiphysique de référence au CEA. Ce cœur de référence pourrait également être proposé comme benchmark multiphysique, cruellement manquant lorsqu'il s'agit de comparer les différentes techniques de couplage mises au point à l'international.

À propos de la maquette de couplage hybride développée, elle n'est pour le moment pas intégrable dans APOLLO3® puisqu'elle ne répond pas à l'architecture logicielle qui y avait été choisie. Plutôt que de reprendre cette maquette, on recommande plutôt d'enrichir les solveurs de neutroniques de méthodes d'accès permettant d'implémenter ce type d'algorithmes : il s'agit alors de rajouter le flux comme attribut, qu'on pourrait récupérer et modifier, et à partir duquel l'initialisation se ferait. C'est d'après nous la façon la plus simple de généraliser l'approche hybride proposée, qui pourrait alors être mise en œuvre directement en Python avec l'accélération d'Anderson proposée par C3PO.

Enfin, on peut noter qu'on s'est exclusivement intéressé à des algorithmes de couplage séquentiel, entre codes préexistants donc. L'approche monolithique, visant à résoudre directement l'ensemble des équations décrivant le problème multiphysique offre d'autres perspectives : l'écriture d'un nouveau solveur peut s'accompagner, dès la conception, d'algorithmes de Newton, par exemple. Un autre peut être d'explorer les techniques de différentiation automatique. On a alors accès à tout moment aux dérivées partielles des différentes grandeurs en jeu dans le couplage, ce qui peut permettre de calculer de nouvelles précisions plus pertinentes dans les approches de type *Residual Balance* par exemple et facilite par ailleurs la mise en place d'algorithmes de Newton.

Pour finir, l'analyse théorique des couplages mis en place nous a permis de justifier et de généraliser les conclusions de ce travail de thèse. Le problème simplifié proposé durant cette thèse a vocation à être complexifié. Cela passe notamment par la mise en place d'un modèle plus réaliste pour la thermohydraulique, en implémentant un transitoire stabilisé simplifié. Cela peut permettre d'étudier la convergence partielle du solveur thermohydraulique et ainsi comparer l'influence relative des convergences partielles de chacun des solveurs. Cette étude gagnerait à être accompagnée d'expériences numériques : un point particulièrement enrichissant pourrait être la mise en place pour APOLLO3® d'un tel cas simplifié, qui donnerait la possibilité d'étudier les différentes approches de couplage implémentées pour MINOS et de les confronter avec les résultats théoriques qu'on a déterminés.

Annexes

Annexe A

Établissement des équations SP_N

Pour établir les équations SP_N , on repart de l'équation de transport (1.1.4) que l'on considère pour un groupe d'énergie g donné et on introduit comme condition aux limites une condition d'albédo isotrope :

$$\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g' \neq g} \frac{\beta^{gg'}(\vec{r})}{\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} > 0} \vec{\Omega}' \cdot \vec{n} \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega', \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \partial \mathcal{D} \times \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0,$$

où on a noté $\beta^{gg'}$ une matrice d'albédo multigroupe et \vec{n} le vecteur unitaire orthogonal sortant au domaine \mathcal{D} . On introduit par ailleurs les composantes paires ψ_+^g et impaires ψ_-^g du flux :

$$\psi_{\pm}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \pm \psi^g(\vec{r}, -\vec{\Omega})}{2}.$$

Ce qui se traduit en termes de conditions aux limites par :

$$\psi_-^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}|}{\vec{\Omega} \cdot \vec{n}} \times \left(\psi_+^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \sum_{g' \neq g} \beta_{gg'}^+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} |\vec{\Omega}' \cdot \vec{n}| \psi_+^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' \right), \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \partial \mathcal{D} \times S < 0.$$

On a noté ici $\beta_{gg'}^+$ la matrice définie par $\beta^+ := 4 \times \beta \times (\mathbf{I} + \beta)^{-1}$. On reprend alors la démonstration donnée dans [BL11]. Différentes manières d'établir ces équations sont également données par [LMM93a] et [Pom], à partir d'hypothèses différentes.

A.1 Établissement des équations 1D

L'établissement des équations SP_N repose sur deux hypothèses. La première est de supposer qu'en tout point du réacteur, il existe un système de coordonnées locales dans lequel le flux angulaire est une fonction dont les variations sont lentes en x , y et en l'angle azimutal φ : c'est donc une hypothèse géométrique. Cela sous-entend qu'en tout point, le flux angulaire présente une symétrie plane. On peut alors écrire :

$$\psi(x, y, z, \theta, \varphi) = \phi(z, \mu) + \varepsilon \psi_\varepsilon(x, y, z, \theta, \varphi),$$

pour ε petit et $\mu := \cos(\theta)$. On considère de plus que ce système de coordonnées locales varie lentement en espace. On a alors :

$$\nabla\psi \approx \frac{\partial\psi}{\partial z} \vec{k} \quad , \quad \mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{k} \quad \text{et} \quad \vec{\Omega} \cdot \nabla\psi \approx \mu \frac{\partial\psi}{\partial z}.$$

Si on développe les sections de transfert sur les polynômes de Legendre, l'équation de transport stationnaire devient alors :

$$\begin{aligned} & \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} + \Sigma_t^g(z) \right) \phi^g(z, \mu) = \\ & \sum_{g'} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \Sigma_{s\ell}^{g' \rightarrow g}(z) P_\ell(\mu) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_\ell(\mu') \phi^{g'}(z, \mu') d\mu' + \\ & \frac{\chi_p^g(z)}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_f^{g'}(z) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \phi^{g'}(z, \mu') d\mu', \end{aligned} \quad (\text{A.1.1})$$

où ϕ est le flux scalaire tel que défini en (1.1.2). La condition aux limites devient :

$$\phi_-^g(z, \mu) = \frac{|\mu|}{\mu} \times \left(\phi_+^g(z, \mu) - \sum_{g' \neq g} \beta_{gg'}^+ \frac{1}{2} \int_{-1}^1 |\mu'| \phi_+^{g'}(z, \mu') d\mu' \right). \quad (\text{A.1.2})$$

Il s'agit d'une équation 1D dans le système de coordonnées locales introduit précédemment. Pour résoudre l'équation (A.1.1), on peut introduire l'approximation P_N : on limite la décomposition du flux angulaire sur les polynômes de Legendre à l'ordre N , c'est-à-dire :

$$\phi^g(z, \mu) = \sum_{\ell=0}^N \alpha_\ell \phi_\ell^g(z) P_\ell(\mu),$$

où les coefficients α_ℓ introduits sont des facteurs de normalisation qu'on introduit dans un premier temps pour simplifier la résolution. N étant toujours impair dans la suite, on note $N_h = \frac{N+1}{2}$, correspondant aux nombres de composants pairs et impairs du flux.

On multiplie alors l'équation (A.1.1) par $\alpha_\ell P_\ell$ et on l'intègre selon μ sur entre -1 et 1 tout en injectant cette approximation de ϕ^g . On obtient alors, en utilisant les formules de récurrences reliant les polynômes de Legendre entre eux, les équations correspondant au problème P_N à une dimension :

$$\begin{aligned} & h_\ell \frac{\partial \phi_{\ell-1}^g(z)}{\partial z} + h_{\ell+1} \frac{\partial \phi_{\ell+1}^g(z)}{\partial z} + t_\ell \Sigma_r^g(z) \phi_\ell^g(z) = \\ & \sum_{g' \neq g} t_\ell \Sigma_{s\ell}^{g' \rightarrow g}(z) \phi_\ell^{g'}(z) + \delta_{\ell,0} t_0 \frac{\chi_p^g(z)}{k_{\text{eff}}} \sum_g \nu \Sigma_f^{g'}(z) \phi_0^{g'}(z), \end{aligned} \quad (\text{A.1.3})$$

où on a introduit les coefficients $h_m := \frac{m\alpha_m\alpha_{m-1}}{(2m+1)(2m-1)}$; $t_\ell := \frac{\alpha_\ell^2}{(2\ell+1)}$ et $\Sigma_{r\ell}^g := \Sigma_t^g - \Sigma_{s\ell}^{g' \rightarrow g}$. Les nouvelles conditions aux limites sont obtenues de la même manière. On les obtient, en multipliant

(A.1.2) par $\mu\alpha_e P_e$, où e est un indice pair et en intégrant selon μ entre 0 et 1 :

$$h_e \phi_{e-1}^g + h_{e+1} \phi_{e+1}^g = \sum_{e'=0}^{N-1} \left(h_{e,e'}^b \phi_{e'}^g - h_{e,0}^b h_{0,e'}^b \sum_{g' \neq g} \beta_{gg'}^+ \phi_{e'}^{g'} \right), \text{ pour } e \text{ pair tel que } 0 \leq e \leq N-1, \quad (\text{A.1.4})$$

avec $h_{\ell,k}^b := \alpha_\ell \alpha_k \int_0^1 \mu P_\ell(\mu) P_k(\mu) d\mu$.

A.2 Établissement des équations 3D

Pour déterminer les équations régissant le système 3D, il convient de multiplier les équations impaires de (A.1.3) par \vec{k} , le vecteur unitaire du système de coordonnées local, colinéaire à \vec{n} à la frontière du domaine. En procédant de la sorte, on obtient un système d'équations permettant de déterminer un flux 3D dont les composantes paires sont scalaires et les composantes impaires sont vectorielles.

$$\begin{cases} T_i \vec{\phi}_i + H \vec{\nabla} \phi_p & = \vec{S}_i \\ H^{\mathbf{T}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i + T_p \phi_p & = S_p \end{cases}, \quad (\text{A.2.1})$$

avec la condition aux limites à la frontière :

$$H^{\mathbf{T}} (\vec{\phi}_i \cdot \vec{n}) = \Gamma_e \phi_e. \quad (\text{A.2.2})$$

On a noté ici ϕ_p et $\vec{\phi}_i$ les composantes paires et impaires du flux angulaire, c'est-à-dire :

$$\phi_p := (\phi_p^1, \dots, \phi_p^G)^{\mathbf{T}}, \text{ avec } \phi_p^g := (\phi_0^g, \phi_2^g, \dots, \phi_{N-1}^g)^{\mathbf{T}},$$

et

$$\vec{\phi}_i := (\vec{\phi}_i^1, \dots, \vec{\phi}_i^G)^{\mathbf{T}}, \text{ avec } \vec{\phi}_i^g := (\vec{\phi}_1^g, \vec{\phi}_3^g, \dots, \vec{\phi}_N^g)^{\mathbf{T}}.$$

D'autre part, les matrices T_p et T_i sont les matrices de disparition paires et impaires définies par :

$$T_p := \text{diag}(T_p^1, \dots, T_p^G), \text{ avec } T_p^g := \text{diag}(t_0 \Sigma_{r0}^g, t_2 \Sigma_{r2}^g, \dots, t_{N-1} \Sigma_{rN-1}^g),$$

et

$$T_i := \text{diag}(T_i^1, \dots, T_i^G), \text{ avec } T_i^g := \text{diag}(t_1 \Sigma_{r1}^g, t_3 \Sigma_{r3}^g, \dots, t_N \Sigma_{rN}^g).$$

On a également introduit les composantes paires S_p et impaires \vec{S}_i de la source :

$$S_p := T_{sp} \phi_p + P_p \phi_p \text{ et } \vec{S}_i = T_{si} \vec{\phi}_i.$$

Dans ces dernières expressions, on a noté T_{sp} et T_{si} les matrices de transfert paires et impaires données par :

$$T_{sp} := (T_{sp}^{gg'}), \text{ avec } T_{sp}^{gg'} := \text{diag}(t_0 \Sigma_{s0}^{g' \rightarrow g}, t_2 \Sigma_{s2}^{g' \rightarrow g}, \dots, t_{N-1} \Sigma_{sN-1}^{g' \rightarrow g}),$$

et

$$T_{si} := (T_{si}^{gg'} \text{ avec } T_{si}^{gg'}) := \text{diag}(t_1 \Sigma_{s1}^{g' \rightarrow g}, t_3 \Sigma_{s3}^{g' \rightarrow g}, \dots, t_N \Sigma_{sN}^{g' \rightarrow g}).$$

Finalement, la matrice de fission P est définie comme :

$$P_p := \begin{pmatrix} \chi_{pp}^1 \\ \vdots \\ \chi_{pp}^G \end{pmatrix} \cdot (F_p^1, \dots, F_p^G) \text{ avec } \chi_{pp}^g := \begin{pmatrix} \chi_p^g \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } F_p^g := (\nu \Sigma_f^g, 0, \dots, 0).$$

Il reste à définir la matrice H constituée par des blocs diagonaux :

$$H := \text{diag}(H^d, H^d, \dots, H^d) \text{ avec } H^d := \begin{pmatrix} h_1 & h_2 & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & h_{N-2} & h_{N-1} \\ 0 & 0 & \cdot & 0 & h_N \end{pmatrix}.$$

Enfin, la matrice Γ_p , définie sur la frontière, est, elle aussi, constituée de blocs diagonaux tous identiques :

$$\Gamma_p := \text{diag}(\Gamma_p^d, \Gamma_p^d, \dots, \Gamma_p^d) \text{ avec } (\Gamma_p^d)_{i,j} := h_{2(i-1), 2(j-1)}^b$$

A.3 Forme diagonalisée et lien avec le problème de diffusion

L'objectif de ce paragraphe est de diagonaliser le système (A.2.1) pour retrouver la forme des équations P_1 et d'autre part identifier les équations du système SP_N stationnaire à celles du problème SP_1 stationnaire dans lequel le nombre de groupes d'énergie aurait augmenté. Pour cela on procède à un changement de variable sur le flux pair :

$$\tilde{\phi}_p := H \phi_p.$$

On multiplie ensuite les équations de (A.2.1) et celles donnant les conditions aux limites (A.2.2) par $H^{-\mathbf{T}} := (H^{\mathbf{T}})^{-1}$. On obtient alors comme nouveau système :

$$\begin{cases} T_i \vec{\phi}_i + H \vec{\nabla} \tilde{\phi}_p & = \vec{S}_i \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i + (H^{-\mathbf{T}} T_p H^{-1}) \tilde{\phi}_p & = H^{-\mathbf{T}} S_p \end{cases}, \quad (\text{A.3.1})$$

avec la condition aux limites à la frontière :

$$\vec{\phi}_i \cdot \vec{n} = (H^{-\mathbf{T}} \Gamma_e H^{-1}) \tilde{\phi}_e. \quad (\text{A.3.2})$$

En fixant les α_ℓ introduit précédemment, on obtient alors la formulation diagonalisée souhaitée. On se donne ainsi $\alpha_0 = 1$. On a alors $\alpha_\ell = \frac{4\ell^2 - 1}{\ell \alpha_{\ell-1}}$ et les h_i deviennent égaux à 1 ce qui donne pour la matrice H^d :

$$H^d = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \cdot & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Les matrices H^{-1} et $H^{-\mathbf{T}}$ sont, elles, composées respectivement des blocs H_d^{-1} et $H_d^{-\mathbf{T}}$ donnés par :

$$H_d^{-1} := \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & \cdot \\ 0 & 1 & -1 & 1 & \cdot \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad H_d^{-\mathbf{T}} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdot \\ 1 & -1 & 1 & 0 & \cdot \\ -1 & 1 & -1 & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}.$$

On peut alors à partir de cette forme diagonale résoudre les équations SP_N données par (A.3.1) et (A.3.2) comme des équations SP_1 en traitant les harmoniques introduites dans la formulation SP_N comme des pseudos groupes d'énergie pour la formulation SP_1 . On pourra se référer à [BL11] pour plus de détails sur ce point. Notons finalement qu'on peut retrouver un problème de diffusion à partir de ces mêmes équations. Ainsi, si on suppose les transferts impairs nuls, c'est-à-dire si on considère $\forall g, \forall i > 0, \Sigma_{s2i-1}^g = 0$, la source impaire devient nulle et (A.3.1) devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\phi}_1^{(g,i)} = -\frac{1}{3\Sigma_r^{(g,i)}} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = -\frac{1}{3\Sigma_t^{(g,i)}} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} \\ -\vec{\nabla} D^{(g,i)} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} + \Sigma_{r0}^{(g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \sum_{(g',j) \neq (g,i)} \Sigma_{s0}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} + \frac{\chi^{(g,i)}}{k_{\text{eff}}} \sum_{(g',j)} \nu \Sigma_f^{(g',j)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} \end{array} \right. , \quad (\text{A.3.3})$$

où on a noté (g, i) les pseudos groupes d'énergie, c'est-à-dire par exemple que le flux pair (g, i) correspond à l'harmonique i du flux pair multigroupe g introduit précédemment. L'identification des sections efficaces des pseudos groupes alourdirait ici inutilement le paragraphe.

Annexe B

Méthodes de Krylov et lien avec les méthodes de type JFNK

B.1 Introduction aux méthodes de Krylov

B.1.1 Principe

On reprend ici la présentation faite dans [Pat16]. On cherche à résoudre une équation du type $Ax = b$ avec A une matrice symétrique de taille m et b un vecteur de dimension m également. Le principe des méthodes de Krylov est de rechercher une approximation de la solution dans un espace vectoriel K_n de dimension réduite $n \leq m$ que l'on construit comme $K_n = Vect(r_0, Ar_0, \dots, A^{n-1}r_0)$ avec $r_0 = b - Ax_0$ où on a noté x_0 une estimation initiale de la solution du système linéaire à résoudre. Généralement, on choisit cette estimation nulle, et on a alors $r_0 = b$. On se place dans ce dernier cas.

Le fonctionnement des méthodes de Krylov s'appuie sur la propriété suivante : si les vecteurs $b, Ab, \dots, A^{n-1}b$ ne forment pas une famille libre, la solution x peut être générée par la famille $b, Ab, \dots, A^{n-2}b$. On se contente donc des cas où la dimension de K_n est effectivement n .

B.1.2 Procédé d'Arnoldi

On introduit alors les vecteurs $(q_i)_{0 \leq i \leq n}$ de dimensions m formant une base de K_n et Q_n la matrice de passage de la base canonique à la base constituée des vecteurs (q_i) . Q_n est donc de dimension n et est composée des vecteurs colonnes q_i . Si on considère un vecteur $x_n \in K_n$ exprimé dans la base canonique de \mathbb{R}^n , on note alors y_n tel que $x_n = Q_n y_n$ les coordonnées de x_n dans la base (q_i) . La construction d'une telle base se fait généralement pour des raisons de stabilité selon le procédé d'Arnoldi (aussi appelé Gram-Schmidt). On obtient alors une matrice de passage Q_n orthogonale dont l'inverse est Q_n^T . L'algorithme pour la construction d'une telle base est le suivant, avec le premier vecteur $q_1 = \frac{b}{\|b\|}$:

1. $q_{n+1} \leftarrow Aq_n$.
2. pour $i = 1, \dots, n$:
 - a) $h_{i,n} \leftarrow q_i^T q_{n+1}$.
 - b) $q_{n+1} \leftarrow q_{n+1} - h_{i,n} q_i$.
3. $h_{n+1,n} \leftarrow \|q_{n+1}\|$.
4. $q_{n+1} \leftarrow \frac{q_{n+1}}{h_{n+1,n}}$.

On doit mémoriser lors de l'algorithme les scalaires $h_{i,j}$ calculés, qui permettent de construire la matrice $H_n = (h_{i,j})$ telle que $H_n = Q_n^T A Q_n$. On remarque qu'on ne calcule pas les éléments de H_n en dessous de la première sous-diagonale. On les prend donc nul, et on obtient ainsi une matrice d'Hessenberg. On rajoute alors à H_n une ligne de 0 sauf sur la dernière colonne où on ajoute $h_{n+1,n}$. On obtient alors :

$$\tilde{H}_n = \begin{pmatrix} H_n \\ h_{n+1,n}(e_n^T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,n} \\ h_{2,1} & \ddots & & h_{2,n} \\ 0 & \ddots & h_{n-1,n-1} & \vdots \\ \vdots & & h_{n,n-1} & h_{n,n} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{n+1,n} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1.1})$$

Et on a alors par construction $\tilde{H}_n = Q_{n+1}^T A Q_n$. Ce développement permet d'aborder la méthode GMRES.

B.1.3 La méthode GMRES

En repartant de la dernière égalité, on a $AQ_n = Q_{n+1}\tilde{H}_n$. En multipliant par un vecteur y_n quelconque de \mathbb{R}^n , on a donc :

$$AQ_n y_n = Q_{n+1} \tilde{H}_n y_n. \quad (\text{B.1.2})$$

Si on prend y_n non pas quelconque, mais comme les coordonnées d'un vecteur x_n exprimées dans la base des (q_i) , on a alors $x_n = Q_n y_n$ et on a alors, en notant que b s'écrit $\|b\|_{q_1}$ dans cette même base :

$$Ax_n - b = Q_{n+1}(\tilde{H}_n y_n - \|b\|_{q_1}). \quad (\text{B.1.3})$$

En prenant la norme L_2 par exemple, invariante pour les transformations orthogonales, on a alors :

$$\|Ax_n - b\| = \|\tilde{H}_n y_n - \|b\|_{q_1}\|. \quad (\text{B.1.4})$$

Il est ainsi équivalent de trouver le vecteur x_n de K_n exprimé dans la base canonique de \mathbb{R}^m qui minimise la norme du résidu $\|Ax_n - b\|$ et de trouver le vecteur $y_n \in \mathbb{R}^n$ qui minimise la norme du résidu $\|\tilde{H}_n y_n - \|b\|_{q_1}\|$ (qu'on avait noté r^{GMRES} dans la partie 2.3.3.1) puis de calculer $x_n = Q_n y_n$. Pour résoudre ce problème on calcule au cours de la fabrication de la matrice \tilde{H}_n sa décomposition QR : $H_n = O_n R_n$ avec O_n orthogonale et R_n triangulaire supérieure. On retient alors que la minimisation de $\|R_n y_n - \|b\|_{q_1}\|$ revient dans les faits à résoudre un système linéaire triangulaire.

B.2 Lien avec la méthode JFNK

Dans la méthode GMRES qu'on vient d'introduire, la matrice initiale du problème linéaire à résoudre $Ax = b$ n'intervient qu'à travers un produit matrice-vecteur dans le procédé d'Arnoldi. Dans notre cas, la matrice A n'est pas quelconque, il s'agit de la jacobienne de la fonction F dont on cherche les zéros. On peut donc utiliser son développement de Taylor en u pour approximer ce produit :

$$J_u v = \frac{F(u + \varepsilon v) - F(u)}{\varepsilon} + O(\varepsilon). \quad (\text{B.2.1})$$

On voit donc qu'on n'a pas besoin de former explicitement la jacobienne ni de la stocker en mémoire, mais simplement d'effectuer un calcul supplémentaire en effectuant un nouvel appel à F , en plus de celui nécessaire pour l'itération de Newton, $F(u)$. Notons malgré tout qu'on doit stocker l'ensemble des vecteurs formant la base de l'espace de Krylov lors du procédé d'Arnoldi, ce qui peut être un enjeu en termes de mémoire.

B.3 Choix des paramètres de la méthode

B.3.1 Choix de ε

Différentes possibilités existent pour déterminer un ε correct. On trouve par exemple dans [CJ84] le choix d'une valeur légèrement supérieure à la racine carrée de la précision de la machine, $\varepsilon_{\text{mach}}$. Un autre choix donné dans [KK04] est de prendre :

$$\varepsilon = \frac{1}{n\|v\|_2} \sum_{i=1}^n b|u_i| + b, \quad (\text{B.3.1})$$

avec n la taille du système linéaire et b une constante de magnitude similaire à la racine carrée de l'erreur numérique de la machine (typiquement 10^{-6} pour un encodage 64-bits en double précision). Dans [BS90], on trouve une autre proposition :

$$\varepsilon = \frac{b}{\|v\|_2} \max(|u^T v|, \text{typ}(u)|v|)\text{sign}(u^T v), \quad (\text{B.3.2})$$

avec $\text{typ}(u)$ la taille typique de u , rentrée par l'utilisateur.

Dans ces deux dernières propositions, le choix de prendre $b = \sqrt{\varepsilon_{\text{mach}}}$ signifie qu'on considère que $F(u)$ peut être déterminé à la précision $\varepsilon_{\text{mach}}$. Si en réalité, on ne peut le déterminer qu'à la précision $\varepsilon_{\text{réel}}$, on prendra $b = \sqrt{\varepsilon_{\text{réel}}}$. Enfin, une dernière possibilité en cas de précision limitée dans l'évaluation de $F(u)$, retenue dans [PW98] ou encore [?], est de considérer :

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{(1 + \|u\|)\varepsilon_{\text{mach}}}}{\|v\|} \quad (\text{B.3.3})$$

Dans le cas des couplages multiphysiques, on contrôle la précision $\varepsilon_{\text{réel}}$ demandée aux solveurs. Cela correspond donc à la formule (B.3.2).

B.3.2 Précision sur la résolution du système linéaire

Le choix de la précision avec laquelle on résout le système linéaire (B.1.4), où son système équivalent suite à la décomposition QR de H_n , est important pour la méthode JFNK : une valeur trop importante entraînerait moins d'itérations de Krylov mais plus d'itérations non-linéaires, tandis qu'une valeur trop faible entraînerait un nombre d'itérations de Krylov par itération de Newton trop important. On pourra se référer à la stratégie proposée par SENEAL dans le choix de cette précision par exemple, qui reprend les travaux de [EW96]. Le lecteur intéressé pourra également se rapporter à [STW97] ou encore à [TWS02] à propos de la sur-résolution dans les méthodes de Newton inexacte, ou encore à [MK94] à propos de stratégies avec une précision variable.

Annexe C

Optimisation de la convergence partielle pour le mini-cœur

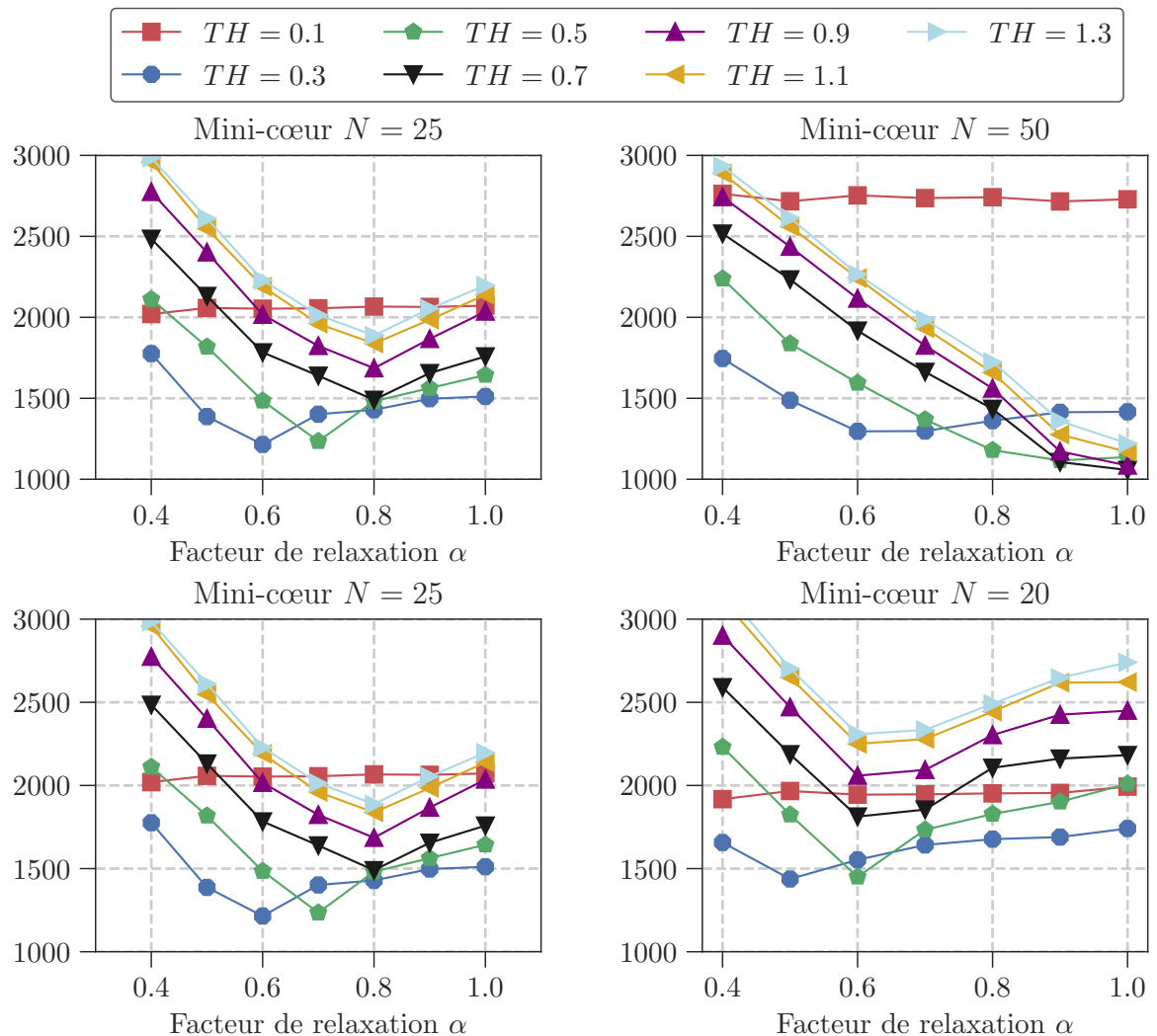


FIGURE C.1 – Évolution du temps de calcul total en fonction du niveau de convergence partielle des solveurs pour le mini-cœur - avec $TH = 0.1$ et $N = 50$ par exemple dans le cas où on limite la durée du transitoire à 0.1 sec avec 50 itérations neutroniques autorisées.

Annexe D

Généralisation au problème de la plaque infinie couplée à deux groupes d'énergie

L'objectif de cette annexe est de généraliser les remarques faites aux chapitres 7 et 8 concernant le lien entre convergence partielle du solveur neutronique et introduction d'une relaxation multiphysique à un problème neutronique représentatif en termes de nombre de groupes d'énergie. Ainsi, comme indiqué dans la partie I, les études de sûreté font typiquement intervenir une discrétisation en 2 ou 8 groupes d'énergie. Dans une première section, on établit donc le problème de la plaque infinie couplée à deux groupes d'énergie, pour ensuite mettre en évidence le système linéarisé régissant les erreurs faites sur la puissance d'une part et les flux scalaires de chacun des groupes d'énergie d'autre part. Cela nous permet dans un dernier paragraphe de généraliser les conclusions précédentes en s'appuyant sur la structure du système ainsi obtenu.

D.1 Mise en équation du problème couplé de la plaque infinie à deux groupes d'énergie

D.1.1 Mise en équation du problème transport à deux groupes d'énergie

On étudie dans ce paragraphe le cas avec deux groupes d'énergie correspondant aux neutrons rapides (groupe 1) et thermiques (groupe 2). On fait l'hypothèse qu'on n'a pas d'up-scattering, c'est-à-dire que des neutrons thermiques ne peuvent pas être diffusés vers le domaine rapide. De plus, on considère que toutes les fissions ont lieu dans le domaine rapide. Le reste des hypothèses faites reste inchangé par rapport à 7.2.1. D'un point de vue neutronique *pur*, on doit donc résoudre le problème suivant, pour tous les points x du domaine \mathfrak{D} considéré :

$$\begin{cases} \mu \frac{\psi^{(1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(1)}(x) \psi^{(1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s^{(1 \rightarrow 1)}(x) + \lambda \nu^{(1)} \Sigma_f^{(1)}(x) \right) \phi^{(1)}(x) + \frac{1}{2} \lambda \nu^{(1)} \Sigma_f^{(2)}(x) \phi^{(2)}(x) \\ \mu \frac{\psi^{(2)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(2)}(x) \psi^{(2)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s^{(1 \rightarrow 2)}(x) \phi^{(1)}(x) + \Sigma_s^{(2 \rightarrow 2)}(x) \phi^{(2)}(x) \right) \end{cases}$$

On a indiqué dans ce système avec les indices ⁽¹⁾ et ⁽²⁾ le groupe auquel se réfère les différentes grandeurs physiques. Comme en 7.1.1.2, on introduit une dépendance des sections efficaces à la température T du milieu uniquement. Finalement, on veut résoudre le problème couplé, pour tout

x dans \mathfrak{D} :

$$\left\{ \begin{array}{l} T(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{P}(x)) \\ \mu \frac{\psi^{(1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(1)}(x) \psi^{(1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s^{(1 \rightarrow 1)}(x) + \lambda \nu^{(1)} \Sigma_f^{(1)}(x) \right) \phi^{(1)}(x) + \frac{1}{2} \lambda \nu^{(2)} \Sigma_f^{(2)}(x) \phi^{(2)}(x) \\ \mu \frac{\psi^{(2)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(2)}(x) \psi^{(2)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s^{(1 \rightarrow 2)}(x) \phi^{(1)}(x) + \Sigma_s^{(2 \rightarrow 2)}(x) \phi^{(2)}(x) \right) \\ \mathbf{P}(x) = R \Sigma_f^{(1)}(x) \phi^{(1)}(x) + R \Sigma_f^{(2)}(x) \phi^{(2)}(x) \end{array} \right.$$

D.1.2 Schéma de résolution du problème multiphysique

On résout là encore ce problème de manière itérative avec un double niveau d'itérations, l'un multiphysique, donné par le nombre d'itérations n et l'autre neutronique, donné par le nombre d'itérations k de la méthode de la puissance itérée effectué pour résoudre le problème neutronique. On introduit par ailleurs comme dans le chapitre 7 un coefficient de relaxation multiphysique α agissant sur la nappe de puissance. Le schéma multiphysique complet est alors, pour une itération multiphysique $n+1$ donnée, pour un point x de \mathfrak{D} quelconque et à une itération $k < K_{(n+1)}$ de la méthode de la puissance itérée :

$$\left\{ \begin{array}{l} T^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}(\mathbf{P}^{(n)}(x)) \\ \mu \frac{\psi^{(1),(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(1),(n+1)}(x) \psi^{(1),(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \lambda^{(n+1,k)} \nu^{(1)} \Sigma_f^{(1),(n+1)}(x) \phi^{(1),(n+1,k)}(x) \\ \quad + \frac{1}{2} \Sigma_s^{(1 \rightarrow 1),(n+1)}(x) \phi^{(1),(n+1,k)}(x) + \frac{1}{2} \lambda^{(n+1,k)} \nu^{(2)} \Sigma_f^{(2),(n+1)}(x) \phi^{(2),(n+1,k)}(x) \\ \mu \frac{\psi^{(2),(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t^{(2),(n+1)}(x) \psi^{(2),(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \left(\Sigma_s^{(1 \rightarrow 2),(n+1)}(x) \phi^{(1),(n+1,k)}(x) \right. \\ \quad \left. + \Sigma_s^{(2 \rightarrow 2),(n+1)}(x) \phi^{(2),(n+1,k)}(x) \right) \\ p^{(n+1)}(x) = R \Sigma_f^{(1),(n+1)}(x) \phi^{(1),(n+1,K_{(n+1)})}(x) + R \Sigma_f^{(2),(n+1)}(x) \phi^{(2),(n+1,K_{(n+1)})}(x) \\ \mathbf{P}^{(n+1)}(x) = \alpha \times p^{(n+1)}(x) + (1 - \alpha) \times \mathbf{P}^{(n)}(x) \end{array} \right.$$

Détaillons rapidement ce système. Il s'agit là encore, à partir de la nappe de puissance $\mathbf{P}^{(n)}$ calculée à l'itération multiphysique n , de calculer la nouvelle nappe de température $T^{(n+1)}$. On met ensuite à jour les sections efficaces $\Sigma_i^{(j),(n+1)}$ pour chacun des groupes d'énergie $j = 1, 2$, et on résout le problème de neutronique. Finalement, avec le flux scalaire $(\phi^{(1),(n+1,K_{(n+1)})}, \phi^{(2),(n+1,K_{(n+1)})})$ final, on peut calculer la nouvelle nappe de puissance $p^{(n+1)}$ ainsi qu'une éventuelle puissance relaxée $\mathbf{P}^{(n+1)}$.

Dans le paragraphe suivant, on se propose de mener la même démarche d'analyse qu'en 7.1.2.1 et 7.2.2 pour déterminer un système d'équations rendant compte de l'évolution des différentes erreurs au cours du calcul multiphysique.

D.2 Mise en évidence du système linéarisé pour le problème à deux groupes d'énergie

D.2.1 Établissement du problème linéarisé

On se place dans tout ce paragraphe à un point x de \mathfrak{D} , à une itération multiphysique n et à une itération neutronique k de la méthode de la puissance itérée. Si on se place proche de la solution du problème global, la première étape de linéarisation aboutit à :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_1^{(n+1)}(x) = \mathbf{TH}_1(\mathbf{P}_1^{(n)}(x)) \\ \mu \frac{\psi_1^{(1),(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0}^{(1)} \psi_1^{(1),(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} (\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f0}^{(1)} + \Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 1)}) \phi_1^{(1),(n+1,k)}(x) \\ \quad + \frac{1}{2} \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f0}^{(2)} \phi_1^{(2),(n+1,k)}(x) + \frac{1}{2} T_1^{(n+1)}(x) \left((\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f1}^{(1)} + \Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 1)} - \Sigma_{t1}^{(1)}) \Phi_0^{(1)} + \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) \\ \mu \frac{\psi_1^{(2),(n+1,k+1)}(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t0}^{(2),(n+1)} \psi_1^{(2),(n+1,k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 2)} \phi_1^{(1),(n+1,k)}(x) \\ \quad + \frac{1}{2} \Sigma_{s0}^{(2 \rightarrow 2)} \phi_1^{(2),(n+1,k)}(x) + T_1^{(n+1)}(x) \left(\Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 2)} \Phi_0^{(1)} + (\Sigma_{s1}^{(2 \rightarrow 2)} - \Sigma_{t1}^{(2)}) \Phi_0^{(2)} \right) \\ \mathbf{P}_1^{(n+1)}(x) = \alpha R \Sigma_{f0}^{(1)} \phi_1^{(1),(n+1,k(n+1))}(x) + \alpha R \Sigma_{f0}^{(2)} \phi_1^{(2),(n+1,k(n+1))}(x) + (1 - \alpha) \mathbf{P}_1^{(n)}(x) \\ \quad + T_1^{(n+1)}(x) \left(\alpha R \Sigma_{f1}^{(1)} \Phi_0^{(1)} + \alpha R \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) \end{array} \right. \quad (\text{D.2.1})$$

D.2.2 Décomposition des erreurs en série de Fourier pour le problème à deux groupes d'énergie

On introduit les séries de Fourier pour les différentes grandeurs neutroniques, en reprenant les définitions des différents flux données en 7.2.2.1, le reste étant inchangé :

$$\text{Pour } g = 1, 2, \forall n \geq 1, \left\{ \begin{array}{l} \phi_1^{(g),(n)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} a_{(g)}^{(n)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}^{(g)}) \\ \tilde{\phi}_1^{(g),(n,k)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{a}_{(g)}^{(n,k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}^{(g)}) \\ \psi_1^{(g),(n)}(x, \mu) := \sum_{j=0}^{\infty} b_{(g)}^{(n)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}^{(g)}) \\ \tilde{\psi}_1^{(g),(n,k)}(x, \mu) := \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{b}_{(g)}^{(n,k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}^{(g)}) \\ \phi_1^{(g),(n,k)}(x) := \sum_{j=0}^{\infty} a_{(g)}^{(n,k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}^{(g)}) \\ \psi_1^{(g),(n,k)}(x, \mu) := \sum_{j=0}^{\infty} b_{(g)}^{(n,k)}(\omega_j, \alpha, K_{(n)}, \mu) \exp(i\omega_j x \Sigma_{t0}^{(g)}) \end{array} \right. .$$

Le système rendant compte des relations entre les différents coefficients amplificateurs de Fourier associés aux erreurs sur la température, les flux et la nappe de puissance est alors donné par :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{(1)}^{(n+1,k+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(1)}} \left((\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f0}^{(1)} + \Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 1)}) a_{(1)}^{(n+1,k)}(\omega) + \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f0}^{(2)} a_{(2)}^{(n+1,k)}(\omega) \right. \\ \left. \frac{1}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \times \left((\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f1}^{(1)} + \Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 1)} - \Sigma_{t1}^{(1)}) \Phi_0^{(1)} + \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) d^{(n)}(\omega) \right) \\ a_{(2)}^{(n+1,k+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(2)}} \left((\Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 2)} a_{(1)}^{(n+1,k)}(\omega) + \Sigma_{s0}^{(2 \rightarrow 2)} a_{(2)}^{(n+1,k)}(\omega)) \right. \\ \left. + \frac{1}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \times \left(\Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 2)} \Phi_0^{(1)} + (\Sigma_{s1}^{(2 \rightarrow 2)} - \Sigma_{t1}^{(2)}) \Phi_0^{(2)} \right) d^{(n)}(\omega) \right) \\ d^{(n+1)}(\omega) = \alpha R \Sigma_{f0}^{(1)} a_{(1)}^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) + \alpha R \Sigma_{f0}^{(2)} a_{(2)}^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) \\ \left. + \left(1 - \alpha + \frac{1}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \times \left(\alpha R \Sigma_{f1}^{(1)} \Phi_0^{(1)} + \alpha R \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) \right) d^{(n)}(\omega) \right\} \quad (\text{D.2.2})$$

Preuve. On a par définition directement :

$$\text{Pour } g = 1, 2, \forall n \geq 1, \forall k \leq K_{(n)}, \forall \omega \in (\omega_j)_j, \left\{ \begin{array}{l} a_{(g)}^{(n,k)}(\omega) = a_{(g)}^{(n)}(\omega) + \tilde{a}_{(g)}^{(n,k)}(\omega) \\ b_{(g)}^{(n,k)}(\omega, \mu) = b_{(g)}^{(n)}(\omega, \mu) + \tilde{b}_{(g)}^{(n,k)}(\omega, \mu) \end{array} \right. .$$

En se plaçant à une fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$ et à une itération neutronique $k < K_{(n+1)}$, on a alors directement, en substituant dans (D.2.1) les différentes grandeurs par le terme correspondant associé à leur décomposition en série de Fourier :

$$\left\{ \begin{array}{l} c^{(n+1)}(\omega) = \frac{1}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \times d^{(n)}(\omega) \\ a_{(1)}^{(n+1,k+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(1)}} \left((\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f0}^{(1)} + \Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 1)}) a_{(1)}^{(n+1,k)}(\omega) + \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f0}^{(2)} a_{(2)}^{(n+1,k)}(\omega) \right. \\ \left. + \left((\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f1}^{(1)} + \Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 1)} - \Sigma_{t1}^{(1)}) \Phi_0^{(1)} + \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) c^{(n+1)}(\omega) \right) \\ a_{(2)}^{(n+1,k+1)}(\omega) = \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(2)}} \left((\Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 2)} a_{(1)}^{(n+1,k)}(\omega) + \Sigma_{s0}^{(2 \rightarrow 2)} a_{(2)}^{(n+1,k)}(\omega)) \right. \\ \left. + \left(\Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 2)} \Phi_0^{(1)} + (\Sigma_{s1}^{(2 \rightarrow 2)} - \Sigma_{t1}^{(2)}) \Phi_0^{(2)} \right) c^{(n+1)}(\omega) \right) \\ d^{(n+1)}(\omega) = \alpha R \Sigma_{f0}^{(1)} a_{(1)}^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) + \alpha R \Sigma_{f0}^{(2)} a_{(2)}^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) + (1 - \alpha) d^{(n)}(\omega) \\ \left. + \left(\alpha R \Sigma_{f1}^{(1)} \Phi_0^{(1)} + \alpha R \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) c^{(n+1)}(\omega) \right\} .$$

Comme dans les sections 7.1 et 7.2, on a pu formuler un problème linéarisé sur l'erreur neutronique liée au flux scalaire et sur celle multiphysique liée à la nappe de puissance. On doit maintenant se ramener à un système de type $E^{(n+1)} = M \times E^{(n)}$, et selon la structure de la matrice

M , on pourra en déduire si les développements et remarques faits sur le problème mono-énergétique sont ou non encore valables pour ce cas à deux groupes d'énergies.

D.2.3 Mise en évidence du schéma itératif sur les erreurs et généralisation

Plaçons-nous au cours d'une itération multiphysique $n + 1$ donnée et à une fréquence de Fourier $\omega \in (\omega_j)_j$. De (D.2.2), on déduit que, lors de la résolution du problème de neutronique, pour une itération k de la méthode de la puissance itérée, la relation liant $(a_{(1)}^{(n+1,k+1)}(\omega), a_{(2)}^{(n+1,k+1)}(\omega))$ à $(a_{(1)}^{(n+1,k)}(\omega), a_{(2)}^{(n+1,k)}(\omega))$ est une suite arithmético-géométrique donnée par : $N^{(n+1,k+1)}(\omega) = M(\omega) \times N^{(n+1,k)}(\omega) + d^{(n)}(\omega) \times P(\omega)$, avec :

$$N^{(n+1,k+1)}(\omega) := \begin{pmatrix} a_{(1)}^{(n+1,k+1)}(\omega) \\ a_{(2)}^{(n+1,k+1)}(\omega) \end{pmatrix}$$

d'une part,

$$P(\omega) := \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \begin{pmatrix} \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(1)}} \frac{1}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \left((\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f1}^{(1)} + \Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 1)} - \Sigma_{t1}^{(1)}) \Phi_0^{(1)} + \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) \\ \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(2)}} \frac{1}{\text{th}_1^{-1}(\omega)} \left(\Sigma_{s1}^{(1 \rightarrow 2)} \Phi_0^{(1)} + (\Sigma_{s1}^{(2 \rightarrow 2)} - \Sigma_{t1}^{(2)}) \Phi_0^{(2)} \right) \end{pmatrix},$$

d'autre part et

$$M(\omega) := \frac{\tan^{-1}(\omega)}{\omega} \begin{pmatrix} \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(1)}} (\lambda_0 \nu^{(1)} \Sigma_{f0}^{(1)} + \Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 1)}) & \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(1)}} \lambda_0 \nu^{(2)} \Sigma_{f0}^{(2)} \\ \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(2)}} \Sigma_{s0}^{(1 \rightarrow 2)} & \frac{1}{\Sigma_{t0}^{(2)}} \Sigma_{s0}^{(2 \rightarrow 2)} \end{pmatrix}.$$

On note λ_+ et λ_- les valeurs propres de M , qu'on suppose ici différentes pour pouvoir diagonaliser M dans un premier temps, et T la matrice colonne composée de deux vecteurs propres associées respectivement à chacune d'entre elle. On peut donc écrire :

$$M(\omega) = T(\omega) \times \begin{pmatrix} \lambda_+(\omega) & 0 \\ 0 & \lambda_-(\omega) \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega).$$

Et on a alors :

$$\begin{aligned} N^{(n+1,k)}(\omega) &= T(\omega) \times \begin{pmatrix} \lambda_+^k(\omega) & 0 \\ 0 & \lambda_-^k(\omega) \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \times N^{(n+1,0)}(\omega) \\ &+ T(\omega) \times \begin{pmatrix} \sum_{\ell=0}^{k-1} \lambda_+^\ell(\omega) & 0 \\ 0 & \sum_{\ell=0}^{k-1} \lambda_-^\ell(\omega) \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \times P(\omega) \times d^{(n)}(\omega). \end{aligned}$$

Or, $N^{(n+1,0)}(\omega) = N^{(n,k(n))}(\omega)$ puisqu'on initialise les flux scalaires au début de l'itération multiphysique $n + 1$ par les valeurs des flux obtenues à l'itération multiphysique n . Finalement, on

obtient si on effectue $K_{(n+1)}$ itérations de la méthode de la puissance itérée :

$$\begin{aligned} N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) &= T(\omega) \times \begin{pmatrix} \lambda_+^{K_{(n+1)}}(\omega) & 0 \\ 0 & \lambda_-^{K_{(n+1)}}(\omega) \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \times N^{(n, K_{(n)})}(\omega) \\ &+ T(\omega) \times \begin{pmatrix} \frac{1-\lambda_+^{K_{(n+1)}}(\omega)}{1-\lambda_+(\omega)} & 0 \\ 0 & \frac{1-\lambda_-^{K_{(n+1)}}(\omega)}{1-\lambda_-(\omega)} \end{pmatrix} T^{-1}(\omega) \times P(\omega) \times d^{(n)}(\omega), \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} d^{(n+1)}(\omega) &= \begin{pmatrix} \alpha R\Sigma_{f0}^{(1)} & \alpha R\Sigma_{f0}^{(2)} \end{pmatrix} \times N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) \\ &+ \left(1 - \alpha + \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \times \left(\alpha R\Sigma_{f1}^{(1)} \Phi_0^{(1)} + \alpha R\Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right) \right) d^{(n)}(\omega). \end{aligned}$$

Et on retrouve bien une relation géométrique entre $N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega)$ et $d^{(n+1)}(\omega)$ d'une part et $N^{(n, K_{(n)})}(\omega)$ et $d^{(n)}(\omega)$ d'autre part pour décrire l'évolution des erreurs du problème multiphysique complet :

$$\begin{pmatrix} N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) \\ \hline d^{(n+1)}(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{00}^{(K_{(n+1)})}(\omega) & m_{01}^{(K_{(n+1)})}(\omega) \\ \hline m_{10}^{(K_{(n+1)})}(\omega) & m_{22}^{(K_{(n+1)})}(\omega) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} N^{(n, K_{(n)})}(\omega) \\ \hline d^{(n)}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (\text{D.2.3})$$

avec :

$$M_{00}^{(K_{(n+1)})}(\omega) := T(\omega) \times \begin{pmatrix} \lambda_+^{(K_{(n+1)})}(\omega) & 0 \\ 0 & \lambda_-^{(K_{(n+1)})}(\omega) \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \in \mathcal{M}_{2,2}(\mathbb{R});$$

$$m_{01}^{(K_{(n+1)})}(\omega) := T(\omega) \times \begin{pmatrix} \frac{1-\lambda_+^{K_{(n+1)}}(\omega)}{1-\lambda_+(\omega)} & 0 \\ 0 & \frac{1-\lambda_-^{K_{(n+1)}}(\omega)}{1-\lambda_-(\omega)} \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \times P(\omega) \in \mathcal{M}_{2,1}(\mathbb{R});$$

$$m_{10}^{(K_{(n+1)})}(\omega) := \begin{pmatrix} \alpha R\Sigma_{f0}^{(1)} & \alpha R\Sigma_{f0}^{(2)} \end{pmatrix} \times T(\omega) \times \begin{pmatrix} \lambda_+^{(K_{(n+1)})}(\omega) & 0 \\ 0 & \lambda_-^{(K_{(n+1)})}(\omega) \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \in \mathcal{M}_{1,2}(\mathbb{R});$$

et :

$$\begin{aligned} m_{22}^{(K_{(n+1)})}(\omega) &:= \begin{pmatrix} \alpha R\Sigma_{f0}^{(1)} & \alpha R\Sigma_{f0}^{(2)} \end{pmatrix} \times T(\omega) \times \begin{pmatrix} \frac{1-\lambda_+^{K_{(n+1)}}(\omega)}{1-\lambda_+(\omega)} & 0 \\ 0 & \frac{1-\lambda_-^{K_{(n+1)}}(\omega)}{1-\lambda_-(\omega)} \end{pmatrix} \times T^{-1}(\omega) \times P(\omega) \\ &+ 1 - \alpha + \frac{1}{\mathbf{th}_1^{-1}(\omega)} \times \left(\alpha R\Sigma_{f1}^{(1)} \Phi_0^{(1)} + \alpha R\Sigma_{f1}^{(2)} \Phi_0^{(2)} \right). \end{aligned}$$

Comme dans le système (7.2.7), on observe que la fréquence de Fourier ω et le nombre d'itérations neutroniques effectuées à chaque itération multiphysique $K_{(n)}$ apparaissent dans l'ensemble des termes de la matrice multiplicative reliant $N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega)$ à $N^{(n, K_{(n)})}(\omega)$ dans (D.2.3) alors que le facteur de relaxation α n'impacte que le calcul de $d^{(n+1)}(\omega)$. Les différentes remarques qu'on a faites durant la section 7.2 sur le lien entre convergence partielle et relaxation s'appliquent donc toujours ici.

Remarque : On a supposé ici que la matrice $M(\omega)$ pouvait être diagonalisée. Si ce n'est pas le cas, la conclusion portant sur la composition de la matrice reliant les erreurs successives, données par

$$\begin{pmatrix} N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) & d^{(n+1)}(\omega) \end{pmatrix}$$

reste correcte. En effet, le facteur de relaxation α n'intervient que dans le calcul de $d^{(n+1)}(\omega)$. Lorsqu'on écrira la relation itérative

$$\begin{pmatrix} N^{(n+1, K_{(n+1)})}(\omega) \\ \hline d^{(n+1)}(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{00}(\omega) & l_{10}(\omega) \\ \hline l_{01}(\omega) & l_{11}(\omega) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} N^{(n, K_{(n)})}(\omega) \\ \hline d^{(n)}(\omega) \end{pmatrix},$$

seuls les coefficients $l_{01}(\omega)$ et $l_{11}(\omega)$ dépendront de α . La difficulté réside alors dans la détermination effective de $L_{00}(\omega)$, $l_{10}(\omega)$, $l_{01}(\omega)$ et $l_{11}(\omega)$.

Généralisation à un problème à G groupes d'énergie : On peut généraliser la structure du système (D.2.3) obtenu à un cas à N groupes d'énergie, sans up-scattering toujours et en autorisant des fissions d'un groupe j quelconque vers les groupes plus énergétiques : si on ordonne les groupes tels que le groupe 1 corresponde au plus en boîtes noires d'énergie, on autorise ainsi les fissions d'un groupe $1 < j \leq N$ vers les groupes $i \in \llbracket 1; j-1 \rrbracket$. Le facteur de relaxation multiphysique sera alors toujours uniquement présent dans la dernière ligne du système régissant l'évolution des erreurs sur les flux scalaires et la puissance neutronique, permettant de calculer la nouvelle erreur multiphysique $d^{(n+1)}(\omega)$, tandis que le nombre d'itérations neutroniques $K_{(n+1)}$ apparaîtra lui également pour les termes liés aux erreurs neutroniques réalisées sur les flux scalaires des différents groupes.

Bilan de la section : On a donc pu dans cette annexe définir un problème couplé pour la plaque infinie avec une neutronique énergétique à deux groupes d'énergie et un couplage en boîtes noires tel que défini dans la partie II. On a pu vérifier que pour un tel problème, la structure du système linéarisé, rendant compte de l'évolution des erreurs effectuées au cours du calcul multiphysique sur le flux scalaire et la puissance, est conservée : ainsi, comme observé dans la section 7.2, la relaxation n'intervient à l'intérieur d'une itération multiphysique que dans l'expression de l'erreur commise sur la puissance tandis que le nombre d'itérations neutroniques effectuées apparaît lui dans l'ensemble des expressions des erreurs neutronique et multiphysique. On en a déduit que les remarques faites en 7.2.3.2 et 7.2.3.1 sur le lien entre convergence partielle et relaxation multiphysique et sur la possibilité de diminuer le nombre d'itérations multiphysiques à réaliser en introduisant une convergence

partielle pour l'opérateur neutronique sont maintenues. *A priori*, cette dernière remarque est également valable pour le cas général de la plaque infinie à G groupes d'énergie, sans *up-scattering* et avec diffusion isotrope.

Bibliographie

- [ABF⁺05] ANIEL, S., BERGERON, A., FILLION, P., GALLO, D., GAUDIER, F., GRÉGOIRE, O., MARTIN, M., RICHEBOIS, E., ROYER, E., SALVATORE, P., ET AL. FLICA4 : Status of numerical and physical models and overview of applications. In Proc. 11th Int. Top. Meeting on Nuclear Thermo-Hydraulics (NURETH-11), pages 2–6. 2005.
- [ABF15] ANGELI, P.-E., BIEDER, U., AND FAUCHET, G. Overview of the TrioCFD code : main features, V&V procedures and typical applications to nuclear engineering. In Proceedings of 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-16). 2015.
- [ABG19] ALLAIRE, G., BLANC, B., X.AND DESPRÉS, AND GOLSE, F. Transport et Diffusion. Editions de l'Ecole Polytechnique, Palaiseau, 2019.
- [Alk17] ALKU, T. Modelling of turbulent effects in LOCA conditions with CATHARE-3. Nuclear Engineering and Design, 321:258–265, 2017. Multi-scale multi-physics analysis of reactor transients in the NURES SAFE project.
- [AMW98] ANDERSON, D. M., MCFADDEN, G. B., AND WHEELER, A. A. Diffuse-Interface Methods In Fluid Mechanics. Annual Review of Fluid Mechanics, 30(1):139–165, 1998.
- [And65] ANDERSON, D. G. Iterative Procedures for Nonlinear Integral Equations. J. ACM, 12(4):547560, October 1965.
- [And18] ANDERSON, D. Comments on Anderson Acceleration, Mixing and Extrapolation. Numerical Algorithms, 80:1–100, 06 2018.
- [BBG⁺15] BAJOREK, S., BERNARD, M., GINGRICH, C., HOXIE, C., IRELAND, A., KELLY, J., MAHAFFY, J., MURRAY, C., SPORE, J., STAUDENMEIER, J., ET AL. Development, Validation and Assessment of the Trace Thermal Hydraulics System Code. In Proceedings of the 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Chicago, IL, USA, volume 14, pages 1–14. 2015.
- [BCD⁺81] BRAUER, H., COLLIER, J. G., DELHAYE, J. M., HEWITT, G. F., AND MAYINGER, F. Two-phase flow and heat transfer in the power and process industries. Chemie Ingenieur Technik, 53(9):706–706, 1981.
- [BCHP14] BERRILL, M., CLARNO, K., HAMILTON, S., AND PAWLOWSKI, R. Evaluation on Coupling Approaches. Technical report, Consortium for Advanced Simulation of LWRs, 2014.

- [BDM05] BAZIN, P., DOR, I., AND MOREL, C. Assessment of the CATHARE 3-D module for LBLOCA simulation, Jul 2005.
- [BG70] BELL, G. I. AND GLASSTONE, S. Nuclear Reactor Theory. Van Nostrand Reinhold Company, 1970.
- [BL07] BAUDRON, A.-M. AND LAUTARD, J.-J. MINOS : a simplified P_N solver for Core Calculation. Nuclear Science and Engineering, 155:250–263, 2007.
- [BL09] BAHADIR, T. AND LINDAHL, S.-O. Tudsviks Next Generation Nodal Code SIMULATE-5. In Advances in Nuclear Fuel Management IV (ANFM 2009); ANS Topical Meeting. 2009.
- [BL11] BAUDRON, A. AND LAUTARD, J. Simplified P_N Transport core calculations in the Apollo3 System. In International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering M&C2011. American Nuclear Society, 2011.
- [Bro65] BROYDEN, C. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. Mathematics of Computation, 19:577 – 593, 1965.
- [Bro87] BROWN, P. N. A Local Convergence Theory for Combined Inexact-Newton/Finite-Difference Projection Methods. SIAM Journal on Numerical Analysis, 24(2):407–434, 1987.
- [BS90] BROWN, P. AND SAAD, Y. Hybrid Krylov Methods for Nonlinear Systems of Equations. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 11(3):450–481, 1990.
- [BS94] BROWN, P. N. AND SAAD, Y. Convergence Theory of Nonlinear NewtonKrylov Algorithms. SIAM Journal on Optimization, 4(2):297–330, 1994.
- [BZB⁺21] BERNARD, A., ZEGHDAOUI, J., BARBIÉ, L., KEITH, T., RAUTENBERG, M., AND WAECKEL, N. Safety Requirements for Pellet-Clad Interaction in France - New Approach Developed by EDF. Technical report, 2021.
- [c3p] Collaborative Code Coupling PlatfOrm. <https://sourceforge.net/projects/cea-c3po/>. Consulté le : 31/05/2022.
- [CAC⁺15] CHANARON, B., AHNERT, C., CROUZET, N., SANCHEZ, V., KOLEV, N., MARCHAND, O., KLIEM, S., AND PAPUKCHIEV, A. Advanced multi-physics simulation for reactor safety in the framework of the NURES SAFE project. Annals of Nuclear Energy, 84:166–177, 2015. Multi-Physics Modelling of LWR Static and Transient Behaviour.
- [Cal14] CALLEJA, M. X-tream project : Task 1b survey of the state-of-art numerical techniques for solving coupled non-linear multi-physics equations. Technical report, Chalmers University of Technology, August 2014.
- [Cat20] CATTANEO, P. Development of a Methodology for the Multiphysic Best-Estimate Modelling of PWR Core along Irradiation. Ph.D. thesis, Université Grenoble Alpes, 2020.

- [CB03] CHANG, S. H. AND BAEK, W.-P. Understanding, predicting, and enhancing critical heat flux. In *The 10th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-10)*, Seoul, Korea. 2003.
- [CCF⁺14] CALLOO, A., COUYRAS, D., FÉVOTTE, F., GUILLO, M., BROSELARD, C., BOURIQUET, B., DUBOIS, A., GIRARDI, E., HOAREAU, F., FLISCOUNAKIS, M., LEROYER, H., NOBLAT, E., PORA, Y., PLAGNE, L., PONÇOT, A., AND SCHWARTZ, N. Core neutronics methodologies applied to the MOX-loaded KAIST 1A benchmark : reference to industrial calculations. In *PHYSOR 2014*. 10 2014.
- [CCF⁺17] CALLOO, A., COUYRAS, D., FÉVOTTE, F., GUILLO, M., BROSELARD, C., BOURIQUET, B., DUBOIS, A., GIRARDI, E., HOAREAU, F., FLISCOUNAKIS, M., LEROYER, H., NOBLAT, E., PORA, Y., PLAGNE, L., PONCOT, A., AND SCHWARTZ, N. COCAGNE : EDF new neutronic core code for ANDROMÈDE calculation chain. In *International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering M&C 2017*. 2017.
- [CFW⁺13] CALEF, M. T., FICHTL, E. D., WARSA, J. S., BERNDT, M., AND CARLSON, N. N. Nonlinear Krylov acceleration applied to a discrete ordinates formulation of the k-eigenvalue problem. *Journal of Computational Physics*, 238:188 – 209, 2013.
- [CJ84] CHAN, T. F. AND JACKSON, K. R. Nonlinearly Preconditioned Krylov Subspace Methods for Discrete Newton Algorithms. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 5(3):533–542, 1984.
- [CJI⁺08] CALLEJA, M., JIMENEZ, J., IMKE, U., SANCHEZ, V., STIEGLITZ, J., HERRERO, J., AND MACIÁN, R. Implementation of hybrid simulation schemes in COBAYA3/SUBCHANFLOW coupled codes for the efficient direct prediction of local safety parameters. *Annals of Nuclear Energy*, (70):216229, 2008.
- [CLM⁺21] CATTANEO, P., LENAIN, R., MERLE, E., PATRICOT, C., AND SCHNEIDER, D. Numerical optimization of a multiphysics calculation scheme based on partial convergence. *Annals of Nuclear Energy*, 151:107892, 2021.
- [CLTC21] CALLOO, A., LE TELLIER, R., AND COUYRAS, D. Comparison of Chebyshev and Anderson accelerations for the neutron transport equation. In *EPJ Web of Conferences*, volume 247, page 03001. EDP Sciences, 2021.
- [Com13] COMMISSARIAT À L'ÉNERGIE ATOMIQUE ET AUX ÉNERGIES ALTERNATIVES. *La neutronique. Une monographie de la direction de l'énergie nucléaire*, 2013.
- [CPE⁺15] CLARNO, K. T., PAWLOWSKI, R., EVANS, T. M., COLLINS, B. S., KOCHUNAS, B., GASTON, D., AND MONTGOMERY, R. High fidelity modeling of pellet-clad interaction using the CASL virtual environment for reactor applications. Technical report, Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States), 2015.
- [DBB05] DOR, I., BAZIN, P., AND BOUDIER, P. Assessment of the CATHARE 3-D module against LOFT tests L2-5 and LP02-6. In *13th International Conference on Nuclear Engineering*, page 468. 2005.

- [DGPAC17] DEMAZIÈRE, C., GONZÀLEZ-PINTOR, S., ALUND, A., AND CALLEJA, M. X-tream project : Tasks 3a and 3b - Elaboration of 1D test cases and comparisons of non-linear inconsistent/consistent methods; Task 4a - Recommendations for non-linear consistent reactor safety simulations. Technical report, Chalmers University of Technology, October 2017.
- [DGR81] DELHAYE, J., GIOT, M., AND RIETHMULLER, M. Thermohydraulics of Two-phase Systems for Industrial Design and Nuclear Engineering. McGraw-Hill Series on Computer Communications. Hemisphere Publishing Corporation, 1981. ISBN 9780070162686.
- [DM77] DENNIS, J. E., JR. AND MORÉ, J. J. Quasi-Newton Methods, Motivation and Theory. *SIAM Review*, 19(1):46–89, 1977.
- [DP12] DEVEILLE, E. AND PERDU, F. Documentation of the Interface for Code Coupling : ICoCo. Technical report, CEA - DEN/DANS/DM2S/STMF/LMES/RT/12-029/A, 2012.
- [Dro20] DROUET, V. Optimisation multi-objectifs du pilotage des réacteurs nucléaires à eau sous pression en suivi de charge dans le contexte de la transition énergétique à laide dalgorithmes évolutionnaires. Ph.D. thesis, Université Paris-Saclay, 2020.
- [EPRX20] EVANS, C., POLLOCK, S., REBHOLZ, L. G., AND XIAO, M. A Proof That Anderson Acceleration Improves the Convergence Rate in Linearly Converging Fixed-Point Methods (But Not in Those Converging Quadratically). *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 58(1):788–810, 2020.
- [ESGB11] EMONOT, P., SOUYRI, A., GANDRILLE, J., AND BARRÉ, F. CATHARE-3 : A new system code for thermal-hydraulics in the context of the NEPTUNE project. *Nuclear Engineering and Design*, 241(11):4476–4481, 2011. 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13).
- [EV13] ERN, A. AND VOHRALÍK, M. Adaptive inexact Newton methods with a posteriori stopping criteria for nonlinear diffusion PDEs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(4):A1761–A1791, 2013.
- [EW96] EISENSTAT, S. C. AND WALKER, H. F. Choosing the Forcing Terms in an Inexact Newton Method. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 17(1):16–32, 1996.
- [Eye96] EYERT, V. A Comparative Study on Methods for Convergence Acceleration of Iterative Vector Sequences. *Journal of Computational Physics*, 124(2):271 – 285, 1996.
- [FD77] FERGUSON, D. AND DERSTINE, K. Optimized iteration strategies and data management considerations for fast reactor finite difference diffusion theory codes. *Nuclear Science and Engineering*, 64(2):593–604, 1977.
- [FKA12] FACCANONI, G., KOKH, S., AND ALLAIRE, G. Modelling and Simulation of Liquid-Vapor Phase Transition in Compressible Flows Based on Thermodynamical Equilibrium. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 46(05):1029–1054, September 2012.

- [FLJ21] FACCHINI, A., LEE, J., AND JOO, H. G. Investigation of Anderson acceleration in neutronics-thermal hydraulics coupled direct whole core calculation. *Annals of Nuclear Energy*, 153:108042, 2021.
- [FS09] FANG, H. AND SAAD, Y. Two classes of multiseant methods for nonlinear acceleration. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 16(3):197–221, 2009.
- [Gel61] GELBARD, E. Simplified Spherical Harmonics Equations And Their Use In Shielding Problems. Technical report, Westinghouse Electric Corp. Bettis Atomic Power Lab., 1961.
- [GNHLG09] GASTON, D., NEWMAN, C., HANSEN, G., AND LEBRUN-GRANDIÉ, D. MOOSE : A parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations. *Nuclear Engineering and Design*, 239(10):1768 – 1778, 2009.
- [Gra15] GRARD, H. *Physique, fonctionnement et sûreté des REP*. EDP Sciences, 2015.
- [HBC⁺16] HAMILTON, S., BERRILL, M., CLARNO, K., PAWLOWSKI, R., TOTH, A., KELLEY, C., EVANS, T., AND PHILIP, B. An assessment of coupling algorithms for nuclear reactor core physics simulations. *Journal of Computational Physics*, 311:241 – 257, 2016.
- [Hea13] HAMILTON, S. AND ET AL. Multiphysics simulations for LWR analysis. In *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*. 2013.
- [HKB18] HÖHNE, T., KLIEM, S., AND BIEDER, U. IAEA CRP benchmark of ROCOM PTS test case for the use of CFD in reactor design using the CFD-Codes ANSYS CFX and TrioCFD. *Nuclear Engineering and Design*, 333:161–180, 2018.
- [HWN⁺13] HALES, J., WILLIAMSON, R., NOVASCONE, S., PEREZ, D., SPENCER, B., AND PASTORE, G. Multidimensional multiphysics simulation of TRISO particle fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 443(1-3):531–543, 2013.
- [Int21] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Progress on pelletcladding interaction and stress corrosion cracking : experimentation, modelling and methodologies applied to support the flexible operation of nuclear power plants (IAEA-TECDOC-1960). Technical report, International Atomic Energy Agency, 2021.
- [JCGB10] JIMÉNEZ, J., CARRASCOSA, J. J. H., GÓMEZ, D. C., AND BELTRÁN, J. M. A. Steady state and Transient Calculations using COBAYA3 code. In *SNM*, editor, 17th Pacific Basin Nuclear Conference 2010, Sociedad Nuclear Mexicana. Mexico, Puerto Vallarta, 2010.
- [JJ09] JUNG, Y. S. AND JOO, H. G. Decoupled Planar MOC Solution For Dynamic Group Constant Generation In Direct Three-Dimensional Core Calculations. 2009.
- [JSLJ13] JUNG, Y. S., SHIM, C. B., LIM, C. H., AND JOO, H. G. Practical numerical reactor employing direct whole core neutron transport and subchannel thermal/hydraulic solvers. *Annals of Nuclear Energy*, 62:357–374, 2013.
- [kai] KAIST benchmark Problem 1A. <https://github.com/nzcho/Nurapt-Archives/tree/master/KAIST-Benchmark-Problems>. Consulté le : 31/05/2022.

- [KCJ⁺15a] KOCHUNAS, B., COLLINS, B., JABAAY, D., KIM, K. S., GRAHAM, A., STIMPSON, S., WIESELQUIST, W., CLARNO, K., PALMTAG, S., DOWNAR, T., AND GEHIN, J. VERA Core Simulator Methodology for PWR Cycle Depletion. Technical report, CASL, 2015.
- [KCJ⁺15b] KOCHUNAS, B., COLLINS, B. S., JABAAY, D., KIM, K. S., GRAHAM, A., STIMPSON, S. G., WIESELQUIST, W. A., CLARNO, K. T., PALMTAG, S., DOWNAR, T. J., AND GEHIN, J. Vera core simulator methodology for PWR cycle depletion. 2015.
- [KCS⁺17] KOCHUNAS, B., COLLINS, B., STIMPSON, S., SALKO, R., JABAAY, D., GRAHAM, A., LIU, Y., KIM, K. S., WIESELQUIST, W., GODFREY, A., CLARNO, K., PALMTAG, S., DOWNAR, T., AND GEHIN, J. VERA Core Simulator Methodology for Pressurized Water Reactor Cycle Depletion. Nuclear Science and Engineering, 1(185):217–231, 2017.
- [KD06] KOZLOWSKI, T. AND DOWNAR, T. PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark Final report. Technical report, NEA/NSC/DOC, 2006.
- [Kel95] KELLEY, C. T. Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1995.
- [Kel18] KELLEY, C. T. Numerical methods for nonlinear equations. Acta Numerica, 27:207287, 2018.
- [KF96a] KRESSE, G. AND FURTHMÜLLER, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. Phys. Rev. B, 54:11169–11186, Oct 1996.
- [KF96b] KRESSE, G. AND FURTHMÜLLER, J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Computational Materials Science, 6(1):15 – 50, 1996.
- [KFL17] KOCHUNAS, B., FITZGERALD, A., AND LARSEN, E. Fourier analysis of iteration schemes for k-eigenvalue transport problems with flux-dependent cross sections. Journal of Computational Physics, 2017.
- [KK04] KNOLL, D. AND KEYES, D. Jacobian-free NewtonKrylov methods : a survey of approaches and applications. Journal of Computational Physics, 193(2):357 – 397, 2004.
- [KMS04] KOPEIKIN, V., MIKAELIAN, L., AND SINEV, V. Reactor as a source of anti-neutrinos : Thermal fission energy. Physics of Atomic Nuclei, 67(10):1892–1899, 2004.
- [LB05] LE BRIS, C. Computational chemistry from the perspective of numerical analysis. Acta Numerica, 14:363444, 2005.
- [LC09] LIU, X. AND CHENG, X. Thermal-hydraulic and neutron-physical characteristics of a new SCWR fuel assembly. Annals of Nuclear Energy, 36(1):28–36, 2009.

- [LC12] LIU, S. AND CAI, J. Studies of fuel loading pattern optimization for a typical pressurized water reactor (PWR) using improved pivot particle swarm method. *Annals of Nuclear Energy*, 50:117–125, 2012.
- [LGHAA08] LOZANO, J.-A., GARCÍA-HERRANZ, N., AHNERT, C., AND ARAGONÉS, J.-M. The analytic nodal diffusion solver ANDES in multigroups for 3D rectangular geometry: Development and Performance analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 12(35):2365–2374, 2008.
- [LJ22] LEE, J. AND JOO, H. G. Convergence analysis of fixed-point iteration with Anderson Acceleration on a simplified neutronics/thermal-hydraulics system. *Nuclear Engineering and Technology*, 54(2):532–545, 2022.
- [LLFM92] LAUTARD, J., LOUBIÈRE, S., AND FEDON-MAGNAUD, C. CRONOS : a modular computational system for neutronic core calculations (IAEA-TECDOC-678). Technical report, IAEA, 1992.
- [LMM93a] LARSEN, E., MOREL, J., AND MCGHEE, J. Asymptotic derivation of the simplified P_N equations. In *International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering M&C and SNA 1993*. American Nuclear Society, 1993.
- [LMM93b] LARSEN, E., MORLE, J., AND MCGHEE, J. Asymptotic derivation of the simplified PN equations. In *Proceedings of the Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*. In the *Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*, volume 1, page 718. 1993.
- [LMM13] LAUTARD, J.-J., MADAY, Y., AND MULA, O. MINARET or the quest towards the use of time-dependent neutron transport solvers for nuclear core calculations on a regular basis. In *SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo*. 2013.
- [LSV13] LIPNIKOV, K., SVYATSKIY, D., AND VASSILEVSKI, Y. Anderson Acceleration for Nonlinear Finite Volume Scheme for Advection-Diffusion Problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(2):A1120–A1136, 2013.
- [Mah79] MAHAFFY, J. H. A stability enhancing two-step method for one-dimensional two-phase flow. Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-7951-MS, US Nuclear Regulatory Commission Report NUREG/CR-0971, 1979.
- [Mah82] MAHAFFY, J. H. A stability-enhancing two-step method for fluid flow calculations. *Journal of Computational Physics*, 46(3):329–341, 1982.
- [MGB⁺16] MARELLE, V., GOLDBRONN, P., BERNAUD, S., CASTELIER, É., JULIEN, J., NKONGA, K., NOIROT, L., AND RAMIÈRE, I. New developments in ALCYONE 2.0 fuel performance code. Technical report, American Nuclear Society, 2016.
- [MHR00] MARLEAU, G., HÉBERT, A., AND ROY, R. A user’s guide for DRAGON, Report IGE-174 Rev. 5. Technical report, Institut de génie nucléaire, École Polytechnique de Montréal, 2000.

- [MK94] MCHUGH, P. R. AND KNOLL, D. A. Fully coupled finite volume solutions of the incompressible NavierStokes and energy equations using an inexact Newton method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 19(5):439–455, 1994.
- [MKR00] MOUSSEAU, V., KNOLL, D., AND RIDER, W. Physics-Based Preconditioning and the NewtonKrylov Method for Non-equilibrium Radiation Diffusion. *Journal of Computational Physics*, 160(2):743 – 765, 2000.
- [ML08] MARKS, L. D. AND LUKE, D. R. Robust mixing for ab initio quantum mechanical calculations. *Phys. Rev. B*, 78:075114, Aug 2008.
- [MNS⁺13] MICHEL, B., NONON, C., SERCOMBE, J., MICHEL, F., AND MARELLE, V. Simulation of pellet-cladding interaction with the pleiades fuel performance software environment. *Nuclear Technology*, 182(2):124–137, 2013.
- [Mou06] MOUSSEAU, V. A Fully Implicit, Second Order in Time, Simulation of a Nuclear Reactor Core. volume 4. 01 2006.
- [MRM12] MAHADEVAN, V. S., RAGUSA, J. C., AND MOUSSEAU, V. A. A verification exercise in multiphysics simulations for coupled reactor physics calculations. *Progress in Nuclear Energy*, 55:12 – 32, 2012.
- [MS09] MONTI, L. AND SCHULENBERG, T. Coupled ERANOS / TRACE System for HPLWR 3 Pass Core Analyses. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods and Reactor Physics*, pages 1–14. Saratoga Springs, 2009.
- [MSV18] MOORTHI, A., SHARMA, A. K., AND VELUSAMY, K. A review of sub-channel thermal hydraulic codes for nuclear reactor core and future directions. *Nuclear Engineering and Design*, 332:329–344, 2018.
- [MVC⁺14] MYLONAKIS, A., VARVAYANNI, M., CATSAROS, N., SAVVA, P., AND GRIGORIADIS, D. Multi-physics and multi-scale methods used in nuclear reactor analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 72:104 – 119, 2014.
- [Néd86] NÉDÉLEC, J.-C. A new family of mixed finite elements in $R3$. *Numerische Mathematik*, 50(1):57–81, 1986.
- [Ni09] NI, P. Anderson Acceleration of Fixed-Point Iteration with Applications to Electronic Structure Computations. Ph.D. thesis, Worcester Polytechnic Institute, 2009.
- [NW10] NI, P. AND WALKER, D. A linearly constrained least-squares problem in electronic strucre computations. Technical report, Worcester Polytechnic Institute, 2010.
- [OR70] ORTEGA, J. AND RHEINBOLDT, W. *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variable*. page v. Academic Press, 1970. ISBN 978-0-12-528550-6.
- [Pal13] PALMTAG, S. Coupled single assembly solution with VERA (problem 6). Technical report, Consortium for Advanced Simulation of LWRs, 2013.

- [Pat16] PATRICOT, C. Couplages multi-physiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de simulations de couplages neutronique/thermique/mécanique. Ph.D. thesis, Université Paris-Saclay, 2016.
- [Pat19] PATRICOT, C. Thedi : a multi-1d two-phase flow solver for neutronic codes. In Proceedings of the International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP). 2019.
- [Pat20a] PATRICOT, C. THEDI V3.0.0 : modèles et corrélations. Technical report, CEA - DES/ISAS/DM2S/SERMA/LPEC/NT/2020-67069/A, 2020.
- [Pat20b] PATRICOT, C. THEDI V3.0.0 : résolution numérique. Technical report, DES/ISAS/DM2S/SERMA/LPEC/NT/2020-67070/A, 2020.
- [PE11] POTRA, F. AND ENGLER, H. A characterization of the behavior of the Anderson acceleration on linear problems. *Linear Algebra and its Applications*, 438, 02 2011.
- [PFMR17] PREA, R., FIGEROU, V., MEKKAS, A., AND RUBY, A. CATHARE-3 : A first computation of a 3-inch break Loss-Of-Coolant Accident using both Cartesian and cylindrical 3D-meshes modeling of a PWR Vessel. In NURETH-17. 2017.
- [Pla95] PLANCHARD, J. Méthodes mathématiques en neutronique. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d'Electricité de France, 1995.
- [PLC19] PATRICOT, C., LENAIN, R., AND CARON, D. Upgrade of APOLLO3 δ internal thermohydraulic feedback model with THEDI, and application to a control-rod ejection accident. In M&C2019. American Nuclear Society, Portland, United States, August 2019.
- [Pom] POMRANING, G. Asymptotic and variational derivations of the simplified P_N equations. *Annals of nuclear energy*.
- [Pom93] POMRANING, G. Asymptotic and variational derivations of the simplified PN equations. *Annals of Nuclear Energy*, 20(9):623–637, 1993.
- [PR21] POLLOCK, S. AND REBHOLZ, L. G. Anderson acceleration for contractive and noncontractive operators. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 41(4):2841–2872, 2021.
- [PRX19] POLLOCK, S., REBHOLZ, L. G., AND XIAO, M. Anderson-Accelerated Convergence of Picard Iterations for Incompressible Navier-Stokes Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 57(2):615–637, 2019.
- [Pul80] PULAY, P. Convergence acceleration of iterative sequences. the case of scf iteration. *Chemical Physics Letters*, 73(2):393 – 398, 1980.
- [Pul82] PULAY, P. Improved SCF convergence acceleration. *Journal of Computational Chemistry*, 3(4):556–560, 1982.
- [PV93] PÉRIN, Y. AND VELKOV, K. CTF/DYN3D multi-scale coupled simulation of a rod ejection transient on the NURESIM platform. Special Issue on International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering 2017 (M&C 2017), 1993.

- [PW98] PERNICE, M. AND WALKER, H. F. NITSOL : A Newton iterative solver for nonlinear systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19(1), 12 1998.
- [QMMGCJ15] QUERAL, C., MONTERO-MAYORGA, J., GONZALEZ-CADELO, J., AND JIMENEZ, G. AP10006 Large-Break LOCA BEPU analysis with TRACE code. *Annals of Nuclear Energy*, 85:576–589, 2015.
- [RB85] REUSS, P. AND BUSSAC, J. *Traité de neutronique*. Collection enseignement des sciences, 1985.
- [RC07] RIBES, A. AND CAREMOLI, C. Salome platform component model for numerical simulation. In *31st annual international computer software and applications conference (COMPSAC 2007)*, volume 2, pages 553–564. IEEE, 2007.
- [Reu03] REUSS, P. *Précis de neutronique*. EDP Sciences - INSTN - Collection Génie Atomique, 2003.
- [RH15] RAMIÈRE, I. AND HELFER, T. Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(9):2210–2226, 2015.
- [RL95] REYNOLDS, O. AND LAUNDER, B. E. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences*, 451(1941):5–47, 1995.
- [RM09] RAGUSA, J. C. AND MAHADEVAN, V. S. Consistent and accurate schemes for coupled neutronics thermal-hydraulics reactor analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 239(3):566 – 579, 2009.
- [RP20] REYNOLDS, A. J. AND PALMER, T. S. A Multilevel Nonlinear Projective Method for Circulating Fuel Reactor Kinetics. In *International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering M&C2021*. American Nuclear Society, 2020.
- [RS11] ROHWEDDER, T. AND SCHNEIDER, R. An analysis for the DIIS acceleration method used in quantum chemistry calculations. *Journal of Mathematical Chemistry*, 49, 2011.
- [Sag01] SAGAUT, P. Large Eddy Simulation for Incompressible Flows. An Introduction. *Measurement Science and Technology*, 12(10):1745–1746, 2001.
- [SBB⁺09] SANTAMARINA, A., BERNARD, D., BLAISE, P., COSTE, M., COURCELLE, A., HUYNH, T., JOUANNE, C., LECONTE, P., LITAIZE, O., MENGELLE, S., ET AL. The JEFF-3.1. 1 nuclear data library. *JEFF report*, 22(10.2):2, 2009.
- [SCK21] SHEN, Q., CHOI, S., AND KOCHUNAS, B. A robust, relaxation free multiphysics iteration scheme for CMFD accelerated neutron transport k eigenvalue calculations II : Results. *Nuclear Science and Engineering*, 195(11):1202–1235, 2021.
- [Sen18] SENECA, J. Efficient Coupling Algorithms and reduced-order methods for high-fidelity multiphysics simulations of nuclear reactor. Ph.D. thesis, Polytechnic Institute Troy, New-York, 2018.

- [SJ18] SENECA, J. P. AND JI, W. Development of an efficient tightly coupled method for multiphysics reactor transient analysis. *Progress in Nuclear Energy*, 103:33–44, 2018.
- [SK21] SHEN, Q. AND KOCHUNAS, B. A robust, relaxation free multiphysics iteration scheme for CMFD accelerated neutron transport k eigenvalue calculations I : Theory. *Nuclear Science and Engineering*, 2021.
- [SK22] SHEN, Q. AND KOCHUNAS, B. Anderson Acceleration Stability in NDA-accelerated k -Eigenvalue Problems. In *PHYSOR 2022*, Pittsburgh, Pennsylvania, USA. American Nuclear Society, 2022.
- [SLW⁺16] SONG, H., LUO, R., WAN, J., LI, S., AND ZHAO, F. Development of a novel 1D coupled neutronics/thermal-hydraulics code and its verification on PWR rod ejection accident benchmark. *Progress in Nuclear Energy*, 92:197 – 210, 2016.
- [SMS⁺88] SANCHEZ, R., MONDOT, J., STANKOVSKI, Ž., COSSIC, A., AND ZMIJAREVIC, I. APOLLO II : A user-oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 100(3):352–362, 1988.
- [Sto09] STOKES, G. G. On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion, and of the Equilibrium and Motion of Elastic Solids, volume 1 of Cambridge Library Collection - Mathematics, page 75129. Cambridge University Press, 2009.
- [STW97] SHADID, J. N., TUMINARO, R. S., AND WALKER, H. F. An Inexact Newton Method for Fully Coupled Solution of the NavierStokes Equations with Heat and Mass Transport. *Journal of Computational Physics*, 137(1):155 – 185, 1997.
- [SZCD⁺10] SANCHEZ, R., ZMIJAREVI, I., COSTE-DELCLAUX, M., MASIELLO, E., SANTANDREA, S., MARTINOLLI, E., VILLATE, L., SCHWARTZ, N., AND GULER, N. APOLLO2 year 2010. *Nuclear engineering and technology*, 42(5):474–499, 2010.
- [SZKT11] SZILARD, R., ZHANG, H., KOTHE, D., AND TURINSKY, P. The Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors. Technical report, Idaho National Laboratory (INL), 2011.
- [TBE⁺01] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., AND JAN, Y.-J. A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):708–759, 2001.
- [TBG⁺00] TOUMI, I., BERGERON, A., GALLO, D., ROYER, E., AND CARUGE, D. FLICA-4 : a three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications. *Nuclear Engineering and Design*, 200(1):139–155, 2000.
- [TCS⁺16] TURNER, J. A., CLARNO, K., SIEGER, M., BARTLETT, R., COLLINS, B., PAWLOWSKI, R., SCHMIDT, R., AND SUMMERS, R. The virtual environment for reactor applications (VERA) : design and architecture. *Journal of Computational Physics*, (326):544–568, 2016.

- [TEE⁺17] TOTH, A., ELLIS, J. A., EVANS, T., HAMILTON, S., KELLEY, C. T., PAWLOWSKI, R., AND SLATTERY, S. Local Improvement Results for Anderson Acceleration with Inaccurate Function Evaluations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 39(5):S47–S65, 2017.
- [TELB06] TRYGGVASON, G., ESMAEELI, A., LU, J., AND BISWAS, S. Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows. *Fluid Dynamics Research*, 38(9):660–681, 2006. *Recent Topics in Computational Fluid Dynamics*.
- [Thu83] THURGOOD, M. COBRA/TRAC-A thermal-hydraulic code for transient analysis of nuclear reactor vessels and primary coolant systems. Pacific Northwest Lab., Rept, pages NUREG–CR, 1983.
- [TJLS14] TROST, N., JIMÉNEZ, J., LUKARSKI, D., AND SANCHEZ, V. Accelerating COBAYA3 on multi-core CPU and GPU systems using PARALUTION. *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo*, 2014.
- [TK15] TOTH, A. AND KELLEY, C. T. Convergence Analysis for Anderson Acceleration. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 53(2):805–819, 2015.
- [TKS⁺15] TOTH, A., KELLEY, C., SLATTERY, S., HAMILTON, S., CLARNO, K., AND PAWLOWSKI, R. Analysis of Anderson Acceleration on a simplified neutronics/thermal hydraulics system. In *Proceedings of ANS MC2015*. American Nuclear Society, April 2015.
- [TLPLT⁺16] TARGA, A., LE PALLEC, J., LE TALLEC, P., NKONGA, K., CROUZET, N., AND CHEMIN, S. Thermohydraulics-Thermomechanics Best Estimate coupled approach in a Rod Ejection Accident core calculation. In *ICAPP2016*, San Francisco, CA,(USA). 2016.
- [tPEEM78] TO PART 50 ECCS EVALUATION MODELS, A. K. Acceptance criteria for emergency core cooling systems (ECCS) in light water nuclear reactors (10CFR 50.46). 235(43), 1978.
- [TWS02] TUMINARO, R. S., WALKER, H. F., AND SHADID, J. N. On Backtracking Failure in NewtonGMRES Methods with a Demonstration for the NavierStokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 180(2):549 – 558, 2002.
- [VMC03] VARIN, E., MARLEAU, G., AND CHAMBON, R. Transport-diffusion coupling for Candu reactor core follow-up. In *International conference on supercomputing in nuclear applications (SNA)*. 2003.
- [WA21] WANG, D. AND ABDULLATIF, F. Neutron transport problems with nonlinear temperature feedback. In *International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering M&C2021*. American Nuclear Society, 2021.
- [Wal11] WALKER, D. Anderson Acceleration : Algorithms and Implementations. Technical report, Worcester Polytechnic Institute, 2011.

- [WGP⁺16] WILLIAMSON, R., GAMBLE, K., PEREZ, D., NOVASCONE, S., PASTORE, G., GARDNER, R., HALES, J., LIU, W., AND MAI, A. Validating the BISON fuel performance code to integral LWR experiments. *Nuclear Engineering and Design*, 301:232–244, 2016.
- [WHN⁺12] WILLIAMSON, R. L., HALES, J., NOVASCONE, S., TONKS, M., GASTON, D., PERMANN, C., ANDRS, D., AND MARTINEAU, R. Multidimensional multiphysics simulation of nuclear fuel behavior. *Journal of Nuclear Materials*, 423(1-3):149–163, 2012.
- [Wil88] WILCOX, D. C. Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models. *AIAA Journal*, 26(11):1299–1310, 1988.
- [Wil91] WILCOX, D. A half century historical review of the k-omega model. In *29th Aerospace Sciences Meeting*, page 615. 1991.
- [WN11] WALKER, H. F. AND NI, P. Anderson Acceleration for Fixed-Point Iterations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 49(4):1715–1735, 2011.
- [WPK14] WILLERT, J., PARK, H., AND KNOLL, D. A comparison of acceleration methods for solving the neutron transport k-eigenvalue problem. *Journal of Computational Physics*, 274:681 – 694, 2014.
- [WPT15] WILLERT, J., PARK, H., AND TAITANO, W. Using Anderson Acceleration to Accelerate the Convergence of Neutron Transport Calculations with Anisotropic Scattering. *Nuclear Science and Engineering*, 181(3):342–350, 2015.
- [WSP⁺04] WEBER, D. P., SOFU, T., PFEIFFER, P., YANG, W., TAIWO, T., JOO, H., CHO, J., KIM, K., CHUN, T., DOWNAR, T., ET AL. The Numerical Nuclear Reactor for High Fidelity Integrated Simulation of Neutronic, Thermal-Hydraulic and Thermo Mechanical Phenomena Project Overview. *Proc. Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Global Developments (PHYSOR-2004)*, pages 25–29, 2004.
- [WWD20] WANG, J., WANG, Q., AND DING, M. Review on neutronic/thermal-hydraulic coupling simulation methods for nuclear reactor analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 137:107165, 2020.
- [YG11] YADAV, R. AND GUPTA, H. Optimization studies of fuel loading pattern for a typical Pressurized Water Reactor (PWR) using particle swarm method. *Annals of Nuclear Energy*, 38(9):2086–2095, 2011.
- [YMLW09] YANG, C., MEZA, J., LEE, B., AND WANG, L.-W. KSSOLV a Matlab toolbox for solving the Kohn-Sham equations. *ACM Trans. Math. Softw.*, 36, 03 2009.
- [ZF65] ZUBER, N. AND FINDLAY, J. A. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. *J. Heat Transfer*, 87(4):453–468, 1965.
- [ZGL⁺19] ZHANG, H., GUO, J., LU, J., NIU, J., LI, F., AND XU, Y. The comparison between nonlinear and linear preconditioning jfnk method for transient neutronics/thermal-hydraulics coupling problem. *Annals of Nuclear Energy*, 132:357 – 368, 2019.

Titre : Algorithmes de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique

Mots clés : APOLLO3®, THEDI, Accélération d'Anderson, multiphysique, méthode dynamique du Residual Balance

Résumé : Cette thèse s'inscrit dans le domaine de la modélisation multiphysique des réacteurs à eau pressurisée. Elle vise à proposer un ensemble de stratégies de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique, ayant pour objectif de limiter le temps de calcul total et maximiser les vitesses de convergence mono et multiphysiques. Pour cela, on a étudié le couplage entre APOLLO3® et THEDI.

La première étape a été de déterminer les méthodes de couplage en boîtes noires les plus efficaces en termes de temps de calcul total. Cela nous a permis de mettre en évidence l'intérêt de la convergence partielle et de la méthode du *Dynamic Residual Balance*, proposée dans le cadre de cette thèse, pour limiter la sur-résolution entre les solveurs.

On a ensuite implémenté l'accélération d'Anderson pour accélérer la résolution interne du problème neutronique. On a montré que cette approche permettait de réaliser des couplages stables, sans paramètre à optimiser, et avec un nombre acceptable d'itérations neutroniques.

Enfin, on a exploré des couplages dits hybrides, pour lesquels on accélère directement le flux neutronique d'un point de vue multiphysique. On a pu mettre en avant l'intérêt de garantir la cohérence des champs physiques au cours du couplage grâce à cette approche. Cela se traduit notamment par un gain en termes de vitesses de convergence multiphysique et neutronique.

Par ailleurs, un cadre théorique a été développé pour étudier l'ensemble de ces stratégies de couplage. On a ainsi pu rendre compte et justifier les différences observées en termes de performances entre ces méthodes de couplage, ainsi que du lien entre convergence partielle et relaxation.

Cette thèse permet donc d'avoir à disposition un ensemble d'outils de couplage entre neutronique, thermohydraulique et thermique, sans avoir de paramètres à optimiser pour garantir la stabilité du schéma de calcul ou une vitesse de convergence satisfaisante.

Title : Coupling algorithms between neutronics, thermalhydraulics and thermics

Keywords : Apollo3®, THEDI, Anderson acceleration, multiphysics, Dynamic Residual Balance Method

Abstract : This research work is related to the multiphysics description of pressurized water reactor. It aims at studying different coupling strategies between neutronics, thermal-hydraulics and fuel heat transfer, in order to minimize the total computational time, and accelerate the mono- and multiphysics convergence rates. It relies on the coupling between APOLLO3® and THEDI.

The first step was to determine the most effective and efficient black-box coupling methods, in terms of total computational time. It was shown that partial convergence and the *Dynamic Residual Balance Method*, developed during this PhD work, both effectively mitigated the *over-solving* between the solvers. *Anderson acceleration* was then implemented in order to accelerate the Minos solver of Apollo3. It was shown that fully converged and stable coupling simulations could be achieved, without any case-dependent parameters

to optimize and with an acceptable total number of neutronic iterations performed.

Finally, hybrid coupling schemes were investigated, for which the acceleration from a multiphysics point of view is directly performed on the neutronic flux. These schemes ensured the consistency between the physics fields during the coupling, resulting in a better multiphysics convergence speed.

In parallel, a theoretical framework was proposed to study the variety of coupling approaches that were set up. We were able to justify the differences of performances observed between these coupling strategies. This PhD provides numerical tools and defines strategies to set up couplings between neutronics, thermal-hydraulics and fuel heat transfer, the optimization of case-dependant parameters are not required to ensure the stability of the coupling scheme or a decent convergence speed.