

Les codes de calcul de la neutronique et le calcul haute performance

Les études réalisées par les physiciens des réacteurs nécessitent d'accéder aux grandeurs physiques d'intérêt telles que la puissance du réacteur, les flux de particules, les concentrations des nucléides... Pour cela, il faut résoudre les équations qui gouvernent la propagation des neutrons dans l'espace et dans le temps (*équation de Boltzmann*) et celles qui régissent l'évolution temporelle des concentrations des nucléides présents et formés dans les différents matériaux composant le combustible et l'ensemble des structures du réacteur (*équations de Bateman généralisées*) (voir *supra*, p. 45-49).

La *simulation* numérique met en œuvre des outils de calcul qui résolvent les équations précitées. Ces outils reposent sur :

- Des *formalismes physico-mathématiques* qui décrivent les phénomènes physiques étudiés ;
- des *modélisations*, c'est-à-dire des descriptions du système physique et des phénomènes qui s'y déroulent à partir d'hypothèses pertinentes qui rendent les calculs et leur optimisation possibles ;
- des *techniques numériques* qui traitent les formalismes physico-mathématiques dans le cadre des modélisations définies ;
- l'*informatique* qui permet de mettre en œuvre sur les ordinateurs les algorithmes associés aux techniques numériques choisies.

Deux grandes classes d'approches algorithmiques existent pour résoudre l'équation de Boltzmann : les approches dites « déterministes » et les approches dites « stochastiques » ou « probabilistes ». Deux familles correspondantes de codes de calcul ont donc été développées.

- Les *codes déterministes* sont les outils qui sont usuellement employés pour réaliser les calculs de réacteurs en fonctionnement, en les couplant, quand nécessaire, aux codes de calculs de thermohydraulique ou de thermomécanique. L'équation de Boltzmann est résolue soit sous sa forme intégrale, soit sous sa forme intégral-différentielle. Les principales méthodes de résolution et les modèles utilisés sont détaillés *supra*, p. 61-86.

- Les codes fondés sur la *méthode de Monte-Carlo* qui résout l'équation de Boltzmann en partant de sa forme intégrale (voir *supra*, p. 89-106). Cette méthode est considérée comme la voie de calcul de référence.

À une modélisation donnée pour calculer un réacteur nucléaire (flux de particules, concentrations isotopiques, facteur de multiplication effectif, taux de réaction divers...), avec un compromis temps de calcul / précision fixé, correspond un choix portant sur différentes options offertes concernant :

- La représentation des données nucléaires ;
- la finesse de la discrétisation en espace, en énergie et en temps ;

- les découplages de phénomènes physiques ;
- la voie de calcul : déterministe ou stochastique ;
- pour la voie déterministe, la méthode de résolution adoptée (méthode des caractéristiques, des possibilités de collision, méthodes nodales...) ;
- la description de l'anisotropie ;
- l'enchaînement de séquences de calcul ;
- ...

Cet ensemble d'options dédiées au calcul d'un type de réacteur donné, avec un (ou des) objectif(s) précis (conception, validation d'outils, analyse de situations accidentelles...) est nommé « **schéma de calcul** » dont la notion est illustrée dans le chapitre intitulé « Le calcul neutronique des réacteurs », p. 193-213. Dans la pratique, un schéma de calcul est exécuté *via* des instructions spécifiques écrites dans un langage informatique de haut niveau appelé « **langage de commande** ». Ces instructions particulières qui spécifient les options de calcul choisies et les séquences de calcul à appliquer sont « encapsulées » dans des ensembles aisément maniables par les utilisateurs appelés « **procédures de calcul** ».

En règle générale, les **outils de calcul** utilisés pour une étude donnée se réfèrent à un ensemble cohérent, souvent appelé « **formulaire de calcul** », qui comporte :

- Le (ou les) **logiciel(s) [ou codes] de calcul** ;
- les **données physiques de base** (bibliothèques de sections efficaces...) requises pour l'exécution du ou des logiciels ;
- les **schémas de calcul** et les **procédures de calcul** correspondantes ;
- le **dossier de vérification, validation et qualification** (expériences, *benchmarks*...), élément de démonstration de la capacité des outils de calcul utilisés à bien calculer ;

- la **documentation** associée aux logiciels, procédures, bibliothèques utilisés (notice d'utilisation, notice de principe, notice d'identification, notice descriptive du contenu des bibliothèques...).

Les limites d'utilisation, les biais et incertitudes du formulaire sont évalués et transmis à l'utilisateur. Par exemple, les formulaires NARVAL et HORUS 3D, décrits plus loin (p. 143-147), sont dédiés respectivement au calcul des réacteurs de propulsion nucléaire et au calcul du réacteur Jules Horowitz (RJH). Ils sont constitués : des codes de calcul APOLLO2 pour le calcul des bibliothèques de sections efficaces multiparamétrées, CRONOS2 pour le calcul de cœur 3D, TRI-POLI-4® pour le calcul de référence, DARWIN2 pour le calcul d'évolution, de bibliothèques de données nucléaires de base référencées, d'options de calcul validées et documentées, l'ensemble étant utilisable sur un domaine de qualification donné (voir *infra*, p. 165-182).

Les principaux codes de calcul

Le chapitre consacré à la démarche du neutronicien a montré que pour des raisons de taille mémoire et de temps de calcul, des discrétisations adaptées et des découplages de phénomènes physiques sont mis en place pour la modélisation des réacteurs. Il a été indiqué que le calcul déterministe d'un réacteur était scindé en deux parties : la première traite la résolution détaillée de l'équation de Boltzmann, tant en espace qu'en énergie, sur une petite zone du cœur (un assemblage, un motif de quelques assemblages...). Cette étape permet de disposer de constantes homogénéisées en espace et condensées en énergie qui sont utilisées comme coefficients de l'équation de Boltzmann ou de la diffusion, pour la seconde partie du calcul. Cette dernière consiste à résoudre ces équations sur le cœur complet du réacteur, habituellement à trois dimensions, en retenant des maillages spatiaux et énergétiques moins détaillés que dans la première étape.

À l'origine, les codes de calcul étaient dédiés à l'une ou l'autre de ces étapes. Les codes actuellement utilisés portent encore la marque de cette division. La première étape des calculs est habituellement appelée « **calcul spectral*** » ou « **calcul de réseau*** », alors que la seconde porte le nom de « **calcul de cœur*** » (voir *supra*, p. 51-54 et *infra*, p. 193-213). Dans les deux cas, les équations de Boltzmann (et de la diffusion) et de Bateman sont résolues en faisant appel à des techniques différentes liées aux problèmes à résoudre (voir chapitres précédents).

Les codes de calculs succinctement décrits ici sont :

- Le code de réseau **APOLLO2*** et le code de cœur **CRO-NOS2*** (utilisés essentiellement pour les réacteurs thermiques) ;
- le code d'évolution **DARWIN2*** ;
- le formulaire **ERANOS*** (dédié aux réacteurs à neutrons rapides) ;
- la nouvelle plate-forme multifilière : **APOLLO3®*** et **MENDEL*** ;
- le code de transport Monte-Carlo **TRIPOLI-4®***.

Quelques codes de calcul dits « simplifiés » sont également évoqués à la fin de cette revue.

Ces codes de calcul sont développés dans un cadre de partenariat avec les acteurs français du nucléaire. Ils bénéficient d'améliorations continues *via* les programmes de R&D et les diverses thèses de doctorat réalisées dans ce cadre.

APOLLO2

APOLLO2 [1, 2] est un code de calcul spectral multigroupe à deux dimensions résolvant l'équation du transport des neutrons en faisant appel à différentes méthodes :

- La méthode des *probabilités de collision* (exactes et selon une formulation approchée dite « multicellule ») [voir *supra*, p. 84] ;
- les *méthodes nodales en espace et S_N en angle*, pour des géométries cartésiennes (voir *supra*, p. 72-74) ;
- la *méthode des caractéristiques* (MOC), cette dernière étant disponible (voir *supra*, p. 82-85), pour des géométries quelconques, qui sont décrites par l'intermédiaire d'une interface homme-machine (IHM) appelée « SILÈNE » [3].

Il est possible de combiner les différentes méthodes de calcul de flux entre elles pour aboutir à une solution de qualité en un temps de calcul raisonnable.

Le développement de la méthode des caractéristiques, joint à des avancées algorithmiques et numériques, a permis de faire avec APOLLO2 des progrès notables en **physique des cœurs***, par la réalisation de calculs de cœur complet à deux dimensions (2D) avec une description géométrique exacte, sans passer par des phases d'homogénéisation.

APOLLO2 peut être utilisé avec n'importe quel découpage en énergie des sections efficaces : il existe une bibliothèque à environ 12 000 groupes d'énergie qui permet de réaliser des calculs de référence ; les calculs usuels sont effectués à environ 300 groupes d'énergie. La méthode de calcul de l'autoprotection des noyaux qui y est implémentée (voir *infra*, p. 65-72) est à la fois précise et originale ; c'est l'un des points forts du code. Elle est, en effet, fondée sur une *double équivalence en espace et en énergie* et sur l'utilisation de sections efficaces représentées sous forme de **tables de probabilité***. Le traitement exact des mélanges de noyaux est à souligner.

APOLLO2 effectue également des calculs d'évolution du combustible.

Le code est essentiellement utilisé pour calculer les réacteurs à spectre thermique ou épithermique ; il a été validé sur un grand nombre d'expériences critiques, dont celles réalisées

dans le réacteur ÉOLE. Son domaine de validation couvre l'utilisation du combustible MOx et UOx, l'emploi de divers absorbants et poisons neutroniques (**B₄C**, **gadolinium**, **AIC**...). Après avoir été largement utilisé avec une **bibliothèque*** de sections efficaces issue de l'évaluation de données nucléaires JEF-2.2, il est maintenant associé à la nouvelle bibliothèque issue de l'évaluation de données nucléaires JEFF-3 (voir *supra*, p. 21-37). L'emploi de l'interface SILÈNE permet à l'utilisateur de produire des données de modélisation géométrique cohérentes pour APOLLO2 et pour le code de Monte-Carlo TRIPOLI-4®, ce qui conduit à réaliser de façon sûre, la validation des calculs.

La majeure partie des utilisations d'APOLLO2 vise à réaliser des bibliothèques multiparamétrées de sections efficaces homogénéisées en espace et condensées en énergie qui sont utilisées comme données d'entrée pour des calculs de cœur. APOLLO2 est le code spectral de tous les acteurs du nucléaire français (EDF, AREVA-NP, CEA). Il est aussi le code de réseau du projet européen NURISP (www.nurisp.eu/www/nurisp/index.php). Il fait, enfin, partie du *formulaire de criticité*

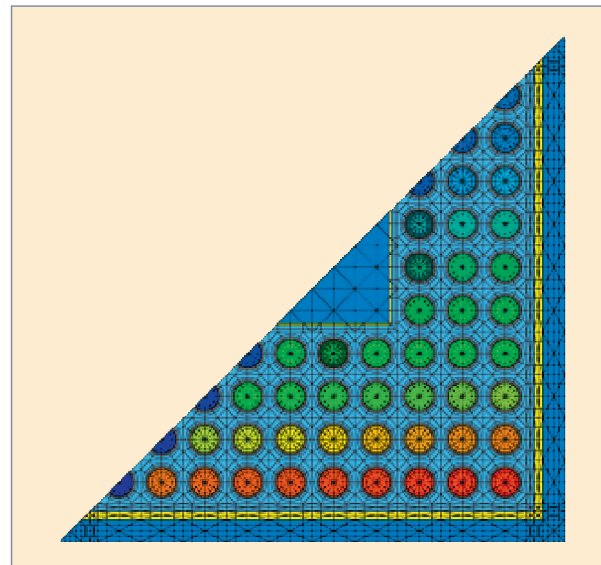


Fig. 55. APOLLO2, *benchmark* pour un assemblage BWR de type ATRIUM, demi-assemblage [4].

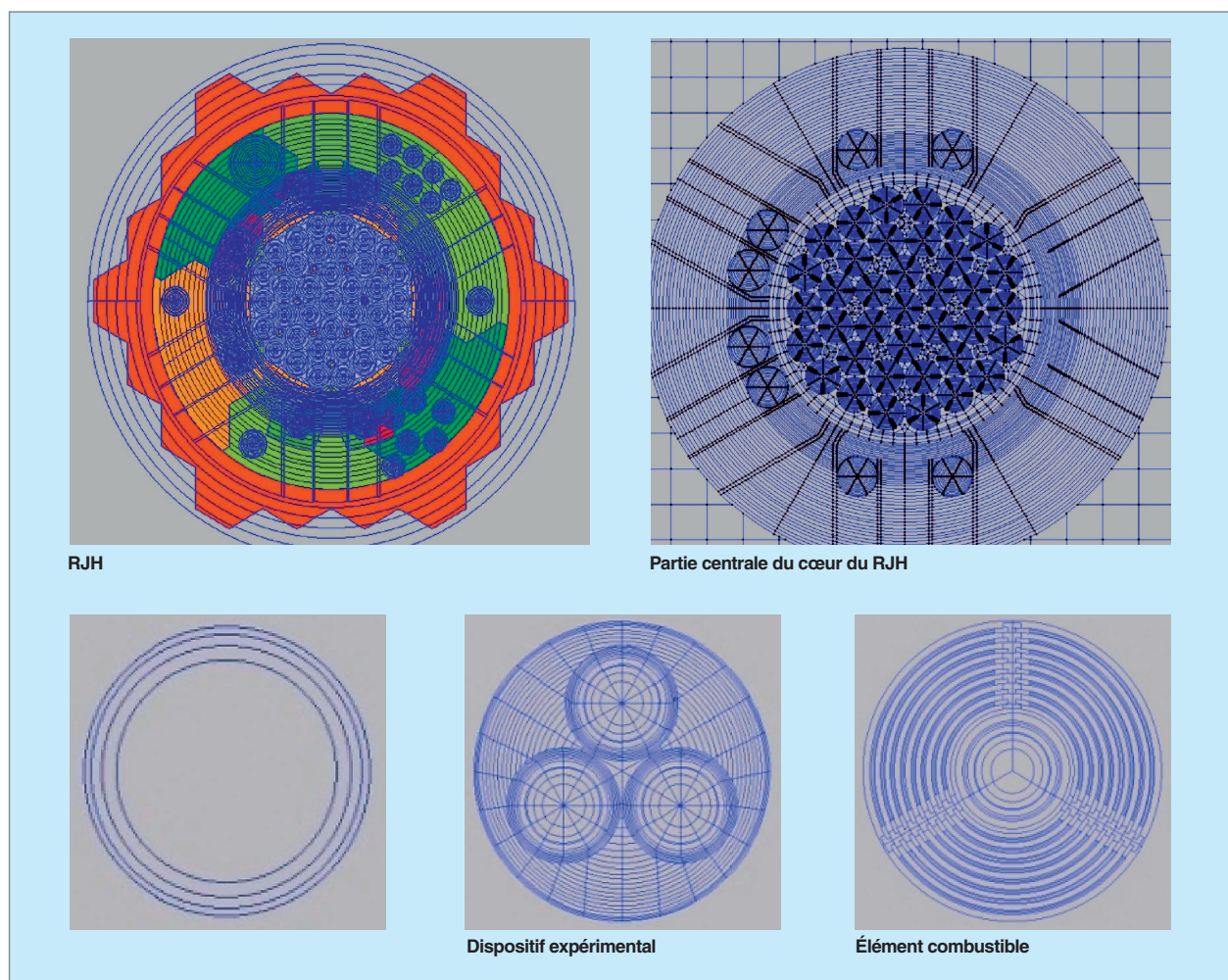


Fig. 56. APOLLO2, calculs pour le réacteur Jules Horowitz (RJH).

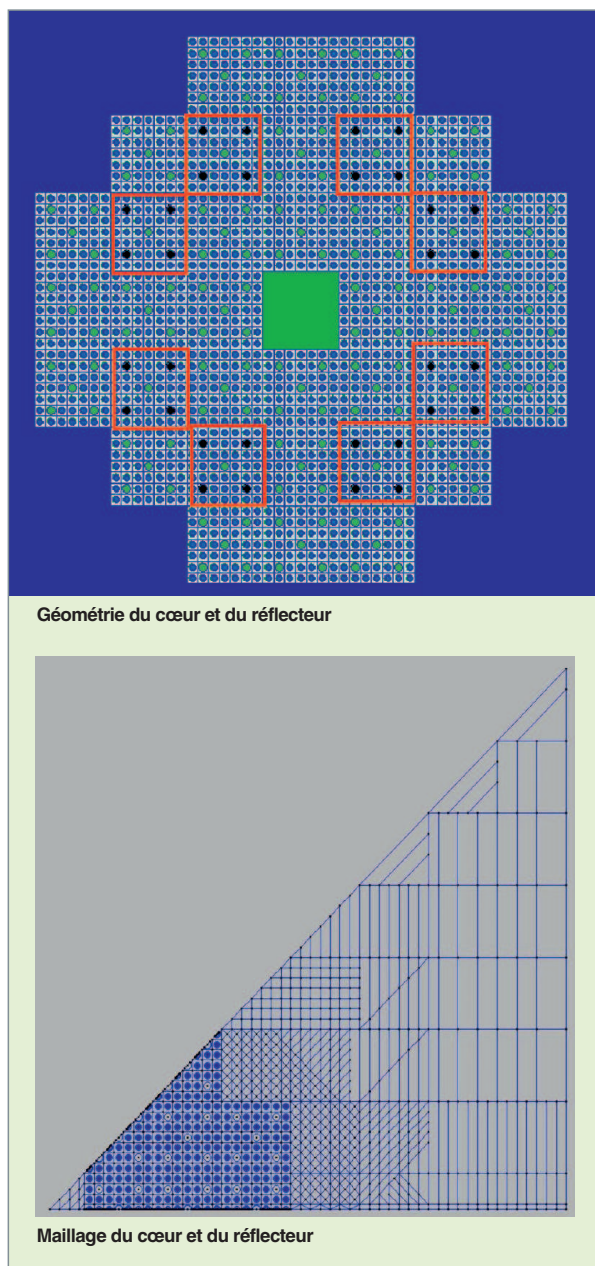


Fig. 57. APOLLO2, conception d'un réacteur expérimental.

CRISTAL (voir *infra*, p. 242) et du *formulaire de calcul de cycle* DARWIN (voir page suivante). Des modules d'édition, de condensation, d'homogénéisation, des fonctionnalités de reprise de calcul, d'archivage de résultats existent en grand nombre dans APOLLO2.

Les illustrations (fig. 55, 56 et 57) sont issues de calculs APOLLO2 réalisés dans différents cadres d'études. Elles montrent, sur l'exemple de réacteurs expérimentaux, les capacités de modélisation géométrique et les possibilités de raffinement de maillage offertes par le code APOLLO2.

CRONOS2

L'objectif du code CRONOS2 [5] [6] est le calcul des cœurs de réacteurs à **3D***, pour obtenir la réactivité, les nappes de puissance, les efficacités des absorbants, le comportement du cœur en évolution, en situation normale ou accidentelle...

CRONOS2 est un code multifilière : rien dans son organisation ou sa structure ne préjuge du type de réacteur à calculer. De ce fait, des schémas de calcul utilisant CRONOS2 ont été réalisés pour de très nombreux réacteurs : cœurs de réacteurs à plaques, cœurs de réacteurs à haute température (RHT), réacteurs à eau sous pression (REP, VVER), réacteurs à eau bouillante (REB), réacteur expérimental Jules Horowitz (RJH), réacteurs de recherche divers.

Alimenté par des *données neutroniques* provenant, par exemple, du code spectral APOLLO2, il résout soit l'équation du transport des neutrons, soit une version de cette équation dite de « *transport simplifié SP_N* (voir *supra*, p. 74) », soit l'équation de la diffusion. Ces *données neutroniques* sont des sections efficaces homogénéisées en espace et condensées en énergie, selon des maillages choisis par l'utilisateur. CRONOS2 permet de traiter l'évolution du combustible et, si nécessaire, des absorbants. Les chaînes d'évolution décrites sont quelconques et dépendent uniquement des bibliothèques, initialement réalisées dans APOLLO2, qui contiennent les sections efficaces des nucléides à traiter explicitement en évolution (noyaux lourds, produits de fission ou absorbants...).

Les méthodes de calcul de flux disponibles dans CRONOS2 sont les méthodes nodales, les **éléments finis*** de Lagrange, **mixtes*** et **isoparamétriques***, les différences finies, décrites *supra*, p. 61-86.

CRONOS2 possède un modèle de thermohydraulique simplifié permettant de calculer les situations de fonctionnement normal et éventuellement incidentel.

Les types de géométries utilisables dans le code CRONOS2 sont les géométries cartésiennes ou hexagonales, qui correspondent à l'immense majorité des réacteurs existants. La description usuelle des cœurs par assemblages homogénéisés peut se révéler insuffisante. De récents développements donnant au code la capacité de traiter des éléments finis isoparamétriques ont ouvert des possibilités de raffinement de maillage pour modéliser des cœurs complexes, comme illustré ci-après pour un sixième de cœur RHT (en anglais HTR : *High Temperature Reactor*), et pour le cœur du RJH.

CRONOS2 est utilisé pour réaliser un grand nombre d'études (tant pour l'analyse que pour la conception) et d'expertises. En situations incidentelles ou accidentelles, il peut être couplé avec des codes de thermohydraulique et des codes systèmes (voir *infra*, p. 215-226). Il fait partie, au même titre

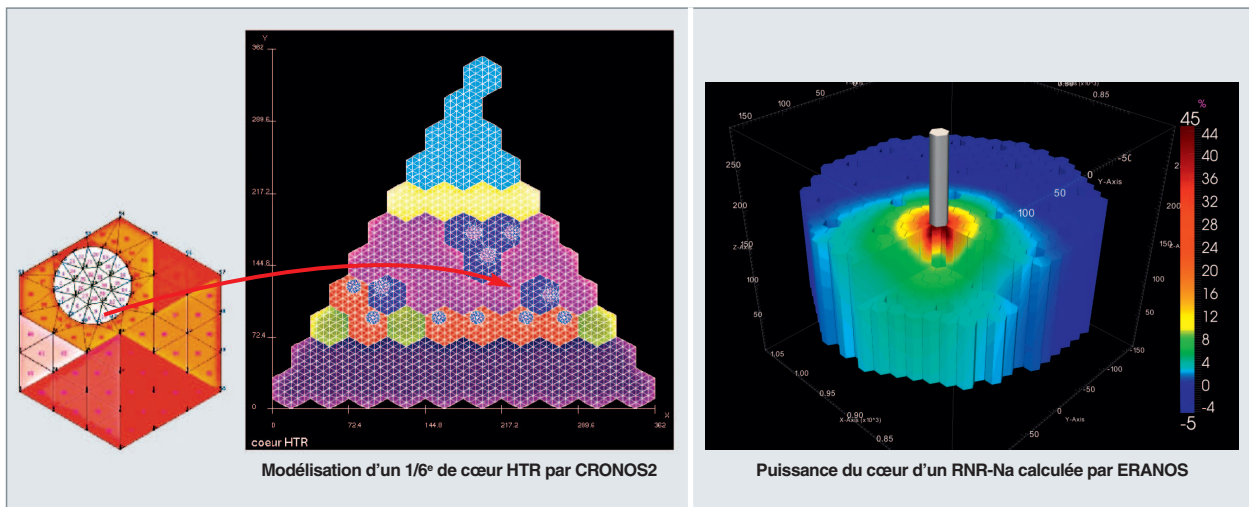


Fig. 58. Deux modélisations de cœurs de réacteur (à gauche, maillage d'1/6^e de cœur HTR, à droite, remontée d'une barre de contrôle excentrée d'un cœur à faible vidange (CFV) induisant une augmentation locale de puissance de 45%).

qu'APOLLO2, de formulaires de calcul des réacteurs nucléaires, parmi lesquels on peut citer :

- NARVAL, pour la propulsion navale ;
- HORUS3D, pour le réacteur Jules Horowitz ;
- ANUBIS, destiné aux calculs d'exploitation du réacteur OSIRIS ;
- NEPTIS, pour le calcul des réacteurs à haute température.

ERANOS

Le domaine d'application du système ERANOS [7] est celui des réacteurs à neutrons rapides, depuis les RNR « classiques » jusqu'aux réacteurs innovants de Génération IV.

Les bibliothèques de données nucléaires d'ERANOS sont actuellement fondées sur les données évaluées JEF-2.2, ainsi que sur celles issues de JEFF-3.1.1. Une bibliothèque à maillage fin en énergie (1 968 groupes) contient les noyaux principaux. Deux autres bibliothèques comportent l'ensemble des corps disponibles dans des maillages plus larges. Cet ensemble dépend de l'application envisagée (calcul de la partie rapide du spectre, de la partie thermique, calculs de protection). À la bibliothèque JEFF-2.2 correspond également une version ajustée dite ERALIB1 qui prend en compte le retour d'expérience à travers un processus d'ajustement statistique. Ce retour d'expérience est fondé sur près de 400 valeurs mesurées en maquettes critiques.

Les calculs de cellule ou de réseau sont réalisés par le code ECCO [8], inclus dans ERANOS, dans lequel l'équation du transport des neutrons est résolue au moyen de la méthode

des probabilités de collision. L'autoprotection des résonances est fondée sur une méthode dite « des sous-groupes », avec la possibilité de traiter le ralentissement des neutrons avec un maillage fin en énergie (1 968 groupes), ce qui permet de réaliser des calculs de référence.

Le calcul de cœur est réalisé en résolvant l'équation de la diffusion ou du transport par différentes méthodes (uniquement S_N pour le transport) et avec différentes descriptions géométriques : 2D, 3D, géométries RZ, rectangulaire ou hexagonale.

ERANOS réalise aussi des calculs d'évolution.

Le calcul de sensibilités, d'incertitudes, de paramètres cinétiques est facilité par un grand nombre de fonctionnalités fondées sur la théorie des perturbations. Enfin, il existe des modules de calcul destinés à décrire le fonctionnement du réacteur (chargement, déchargement, gestion...), ainsi que de nombreuses possibilités d'édition des grandeurs manipulées dans le code.

DARWIN

DARWIN [9, 10] est le formulaire de calcul de la radioactivité dédié aux études portant sur l'ensemble du cycle du combustible, en cœur et hors cœur (fabrication, séjour en réacteur, stockage en piscine, transport, recyclage, stockage géologique...), ainsi qu'aux études de sûreté, toutes filières considérées. Il répond aux principaux problèmes posés par le cycle du combustible (comme par exemple, le contrôle des quantités de matières radioactives, l'évacuation de la puissance résiduelle, la protection contre les rayonnements, la détermination du niveau de contamination), par le calcul d'un ensemble de grandeurs physiques associées aux phénomènes de la radioactivité.

La grandeur fondamentale calculée est la concentration de chaque nucléide obtenue par la résolution des équations différentielles de Bateman généralisées (voir *supra*, p. 49 et p. 107-113).

Les autres grandeurs physiques déterminées par DARWIN sont les masses (bilan matière), les activités, les puissances résiduelles partielles (α , β , γ , neutrons) et totale, les sources des rayonnements émis, les radiotoxicités ; elles sont déduites des concentrations calculées.

DARWIN identifie et quantifie toutes les voies de formation d'un nucléide donné.

Les chaînes de filiations traitées correspondent principalement aux grandes familles de nucléides intéressant la physique des réacteurs nucléaires : les produits de fission, les noyaux lourds, les produits d'activation et, accessoirement, des produits de spallation. En fonction des applications, elles peuvent être complètes ou simplifiées.

Selon les études effectuées, les données d'entrée neutroniques sont issues de calculs de transport exécutés en amont, au moyen notamment d'APOLLO2, d'ÉRANOS ou de TRI-POLI-4®.

La nouvelle plate-forme : APOLLO3® et MENDEL

Le cycle de vie des codes de calcul pour les réacteurs nucléaires est d'une quarantaine d'années dont une période de pleine utilisation d'environ vingt ans : APOLLO2 et CRO-NOS2 ont été développés, en partant de la génération précédente (APOLLO1 et CRONOS1), depuis 1985. Or, si des déve-

loppements nouveaux et novateurs ont été intégrés de façon continue dans ces outils, force est de constater que leur organisation interne (désignée par le terme d'« architecture logicielle ») devient, au fil du temps, inadaptée à traiter de façon aisée des configurations plus complexes. De surcroît, l'architecture des ordinateurs et la puissance des processeurs progressent considérablement, ce qui rend possible des calculs qui pouvaient être considérés comme utopiques au moment de la mise en chantier de ces codes.

Des raisons autres que celles-ci conduisent aussi les équipes en charge du développement des codes à passer à une nouvelle génération : les défis associés à la modélisation de nouvelles filières de réacteurs nucléaires, avec des cœurs très hétérogènes, des combustibles innovants, des géométries très diverses. Ainsi, les exigences formulées par les concepteurs des réacteurs de la 4^e génération sont très stimulantes et structurantes, donnant des objectifs nouveaux à la R&D. Bien entendu, les concepteurs et physiciens des réacteurs nucléaires ne sont pas les seuls à être créatifs : les numériciens et physiciens produisent des modèles et des algorithmes innovants. Certains ont pu être mis en œuvre dans la génération actuelle de codes de calcul : par exemple, les nombreuses méthodes d'accélération des calculs de flux, le modèle d'autoprotection permettant le traitement rigoureux de mélanges de noyaux résonnants. D'autres, comme le passage à trois dimensions du code spectral, ou les échanges simples et naturels avec les calculs de Monte-Carlo, nécessitent de redéfinir l'architecture des codes pour être aisément réalisés. Les outils destinés aux activités d'évaluation et de traitement des données nucléaires, qui sont les données d'entrée clés des codes de neutronique, sont également soumis à des impératifs similaires de rénovation et d'innovation.

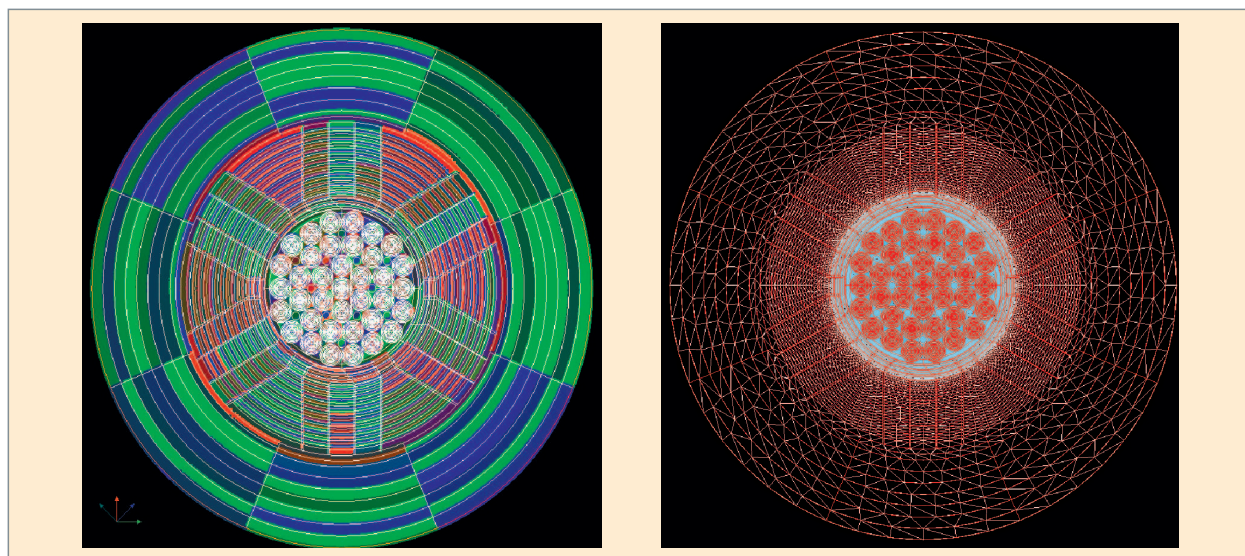


Fig. 59. APOLLO3®. Réacteur Jules Horowitz : calculs avec le solveur MINOS (solveur SP_N en maillage cartésien, figure de gauche) et le solveur MINARET (solveur diffusion en maillage « déstructuré », figure de droite) [11]

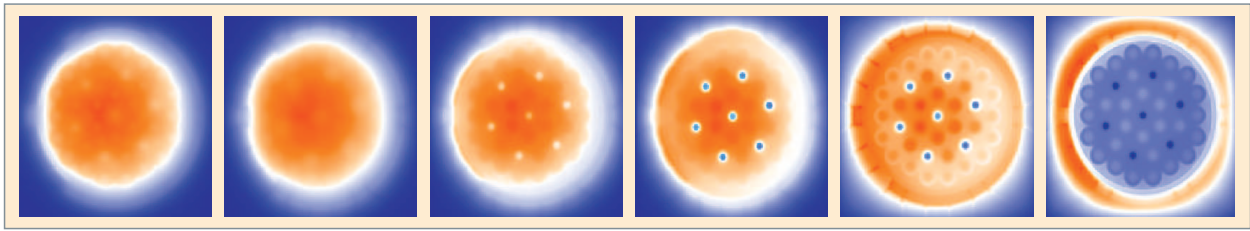


Fig. 60. APOLLO3®, distribution de flux, en fonction de l'énergie des neutrons dans le réacteur Jules Horowitz (par ordre d'énergies de neutrons décroissantes) [11].

Dans une démarche de rationalisation, la volonté d'unifier les outils dédiés au calcul des différentes filières de réacteurs nucléaires guide également l'élaboration de nouveaux codes de neutronique. C'est ainsi qu'APOLLO3® est le nouveau logiciel multi-filière en développement, offrant la particularité d'une organisation unique pour les parties « cœur » et « code spectral ». De nouvelles fonctionnalités s'y ajoutent, comme le calcul sur des maillages spatiaux déstructurés. Une première version d'APOLLO3® a été livrée aux utilisateurs en décembre 2012.

Un autre challenge pour APOLLO3® est la réalisation de calculs 3D généralisés avec une description exacte de la géométrie. Cela passe donc par l'exploitation de manière optimale des nouvelles architectures informatiques (calculateurs parallèles, co-processeurs... voir *infra*, p. 149-161) permettant de diminuer significativement les temps de calcul et d'utiliser les tailles mémoires nécessaires. Cela conduit à la réalisation des calculs en une seule étape, ce qui constitue un des objectifs « clés » du développement des codes de neutronique.

Le code APOLLO3® a été exécuté sur le calculateur **TERA100** du CEA, en mode parallèle, sur 33 000 cœurs de calcul, pour réaliser des calculs d'un cœur de réacteur refroidi au sodium. La démonstration a ainsi été faite de la possibilité d'effectuer en quelques heures des études qui auraient requis plusieurs mois sur les architectures conventionnelles.

L'évolution du combustible, que ce soit pour les calculs de cœur ou pour d'autres finalités (calculs de puissance résiduelle et d'activation, par exemple), est traitée par le code **MENDEL***. Celui-ci peut être utilisé de façon autonome ou être partagé par APOLLO3® et TRIPOLI-4®. Comparativement à son prédécesseur DARWIN, MENDEL a été restructuré, en particulier en ce qui concerne l'organisation des entrées (données nucléaires). Une des avancées de MENDEL réside aussi dans sa capacité à déterminer des incertitudes, le cas échéant en lien avec les modèles d'analyse statistique, en particulier via la plateforme URANIE [13].

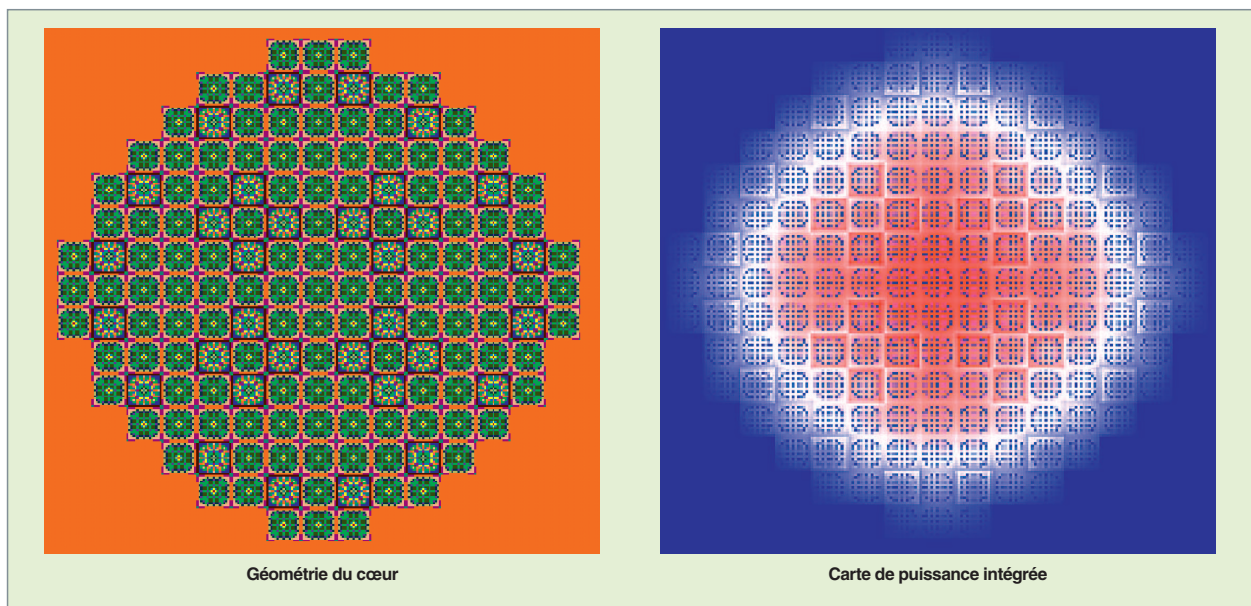


Fig. 61. APOLLO3®, réacteur à eau sous pression : calcul 3D hétérogène en transport SP_N . À gauche : géométrie du cœur. À droite : carte de puissance intégrée [12].

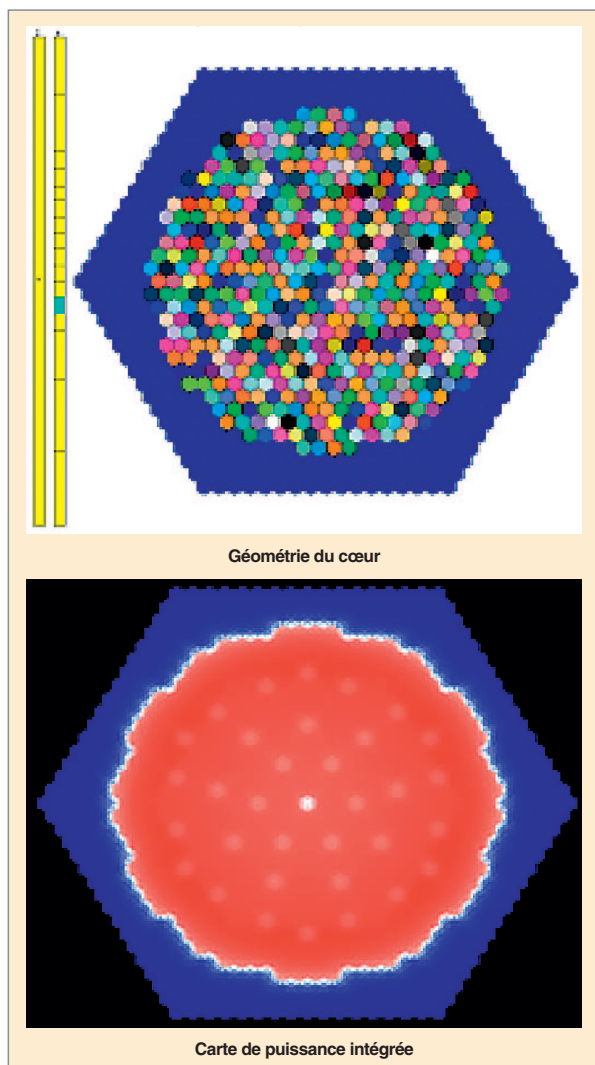


Fig. 62. APOLLO3®, réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium : calcul 3D hétérogène en transport S_N .
En haut : géométrie du cœur. En bas : carte de puissance intégrée.

Le code Monte-Carlo TRIPOLI-4®

Le CEA développe la famille de codes TRIPOLI (TRIdimensionnel POLYcinétique) depuis les années 60. TRIPOLI-4® en représente la quatrième génération dont le développement novateur en langage C++ remonte au début des années 90 [14, 15].

TRIPOLI-4® résout l'équation du transport des neutrons et des photons par la méthode de Monte-Carlo (voir *infra*, p. 89-106) dans des géométries 3D, avec la représentation ponctuelle – ou « continue » – en énergie des sections efficaces des réactions nucléaires justifiant l'appellation « code à énergie continue ». Ses domaines d'application privilégiés sont la **physique du cœur*** (résolution du problème critique, détermination de la distribution de puissance), la **criticité*** (résolution du problème critique, sous critique à source), la **radioprotection*** (résolution d'un problème à source fixe). TRIPOLI-4® effectue

le transport couplé des neutrons et des photons, ceux-ci résultant des réactions nucléaires induites par les neutrons.

Des fonctionnalités spécifiques, comme le traitement de la cascade électromagnétique (transport couplé électron-positon-photon), ont été implémentées, visant à étendre son champ d'utilisation à l'instrumentation nucléaire et aux applications médicales.

Il dispose de l'ensemble des fonctionnalités qu'un code généraliste à l'état de l'art propose à ses utilisateurs [16]. Il est disponible depuis 2004 auprès de la banque de données de l'OCDE/AEN* [17] et est utilisé par les industriels du nucléaire.

Les types de particules couramment simulées sont les neutrons et les photons d'énergie inférieure à 20 MeV. Les sections efficaces employées sont issues d'évaluations internationales au format ENDF-6 : JEF-2.2, JEFF-3, ENDF/B-VI et B-VII, JENDL-3.3, etc. Les sections efficaces ponctuelles en énergie sont utilisées au format « PENDF » directement issu du traitement de l'évaluation considérée (voir *supra*, p. 31-37).

Dans le code, les descriptions géométriques se font de façon native, aussi bien par définition de surfaces qu'en mode combinatoire de volumes. D'autres modes de description existent, en particulier par la « librairie » ROOT [18]. L'outil ROOT, développé et utilisé pour le dépouillement des expériences du CERN, peut être, en effet, couplé à TRIPOLI-4®, offrant ainsi à l'utilisateur de nouvelles formes géométriques et de puissantes fonctionnalités de pré- et post-traitement.

Les sources neutroniques et photoniques peuvent être décrites de manière quelconque, en espace, énergie, angle, mais aussi temps. Les scores possibles sont les flux de particules et les taux de réactions qui en dérivent, les courants, les dépôts d'énergie, les **dpa***, les **pka***, les productions de gaz, les débits de dose, ainsi que le k_{eff} et le β_{eff} . Des tests statistiques sont réalisés pour garantir à l'utilisateur une convergence correcte.

Plusieurs méthodes de réduction de variance existent pour optimiser les codes Monte-Carlo. Comme leur nom l'indique, à temps de calcul fixé et à résultat final (moyenne des **scores***) identique, elles permettent d'atteindre des variances des scores plus faibles, gage d'une meilleure précision. Dans les simulations de radioprotection, ces méthodes sont souvent indispensables pour amener les particules dans les zones d'intérêt.

Afin de répondre à ces problèmes de radioprotection, TRIPOLI-4® dispose de techniques performantes et automatiques de réduction de la variance (par exemple, attracteurs de particules vers les parties d'intérêt dans l'espace des phases). Il est également doté d'une fonctionnalité de calcul de perturbation mettant en œuvre la méthode des échantillons corrélés et celle fondée sur un développement de Taylor de la grandeur physique d'intérêt.

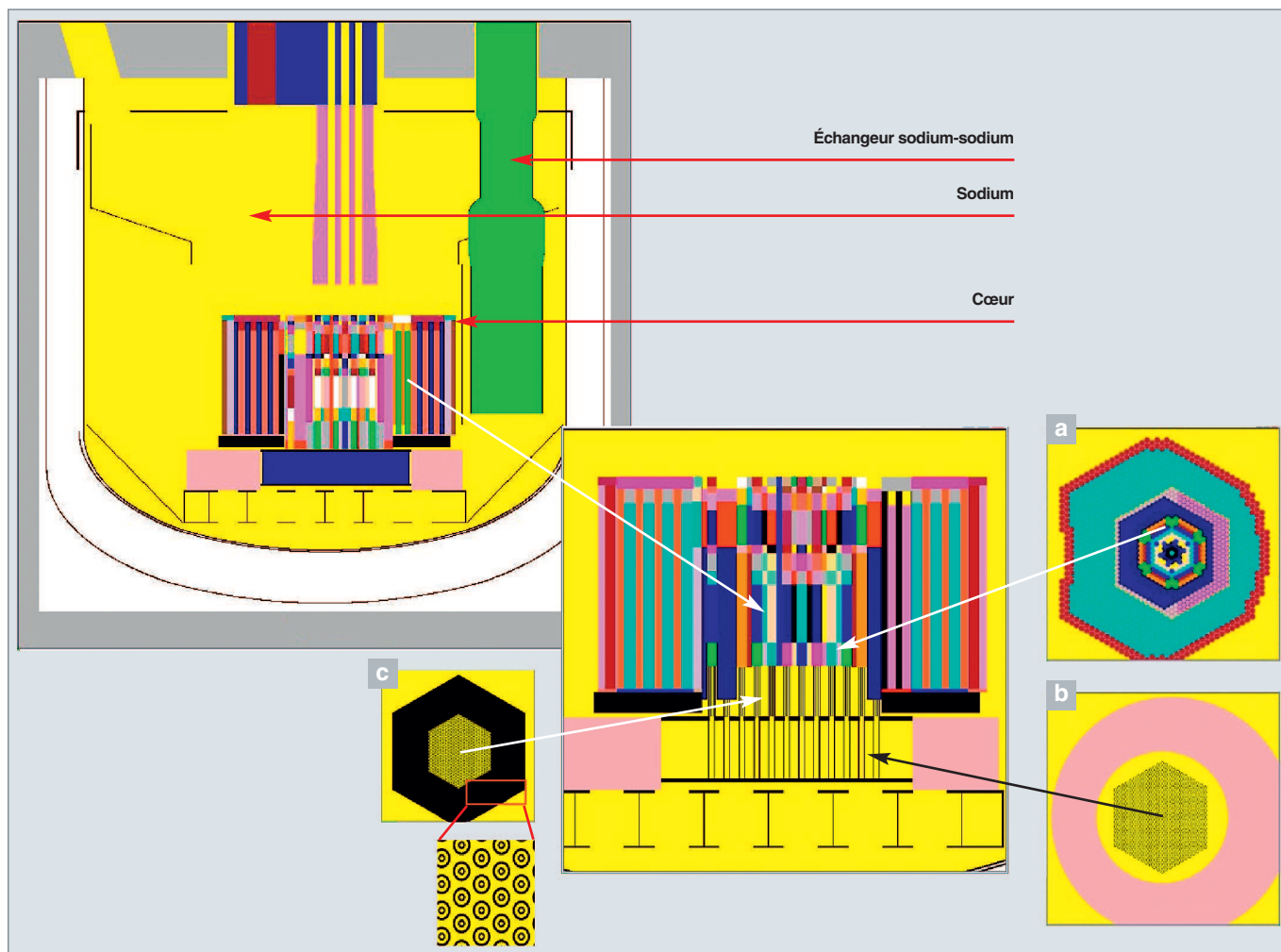


Fig. 63. TRIPOLI-4®, modélisation détaillée du réacteur PHÉNIX pour les calculs de démantèlement. (a), (b), (c) : coupes horizontales du cœur à différentes altitudes.

TRIPOLI-4® fonctionne en mode monoprocesseur, comme en mode parallèle, sur une architecture multiprocesseur. Des calculs TRIPOLI-4® en mode parallèle (voir fig. 65) ont permis de réaliser en 2010, des simulations de plus de 150 milliards de neutrons [20].

Le couplage du transport Monte-Carlo des neutrons à d'autres phénomènes physiques tels que l'évolution des nucléides dans un cœur de réacteur ou les phénomènes thermohydrauliques constitue un enjeu important et soulève des problèmes liés au caractère stochastique de ce couplage. Ceux-ci suscitent une R&D qui ambitionne, à plus ou moins long terme, de réaliser avec succès ce type de couplage en situation accidentelle. L'encadré ci-après (p. 136-137) décrit brièvement le couplage réalisé et opérationnel entre TRIPOLI-4® et MENDEL.

Le couplage du transport de neutrons par la méthode de Monte-Carlo avec le calcul de l'évolution isotopique du combustible ouvre des voies prometteuses pour la physique des réacteurs et le cycle du combustible. C'est ainsi que TRIPOLI-4® a déjà été utilisé parallèlement avec APOLLO2 pour examiner l'im-

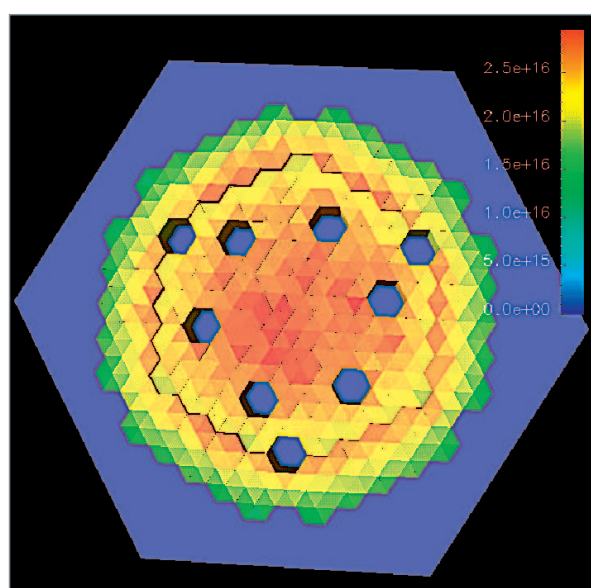


Fig. 64. TRIPOLI-4®, calcul du réacteur PHÉNIX : distribution de puissance par assemblage [19].

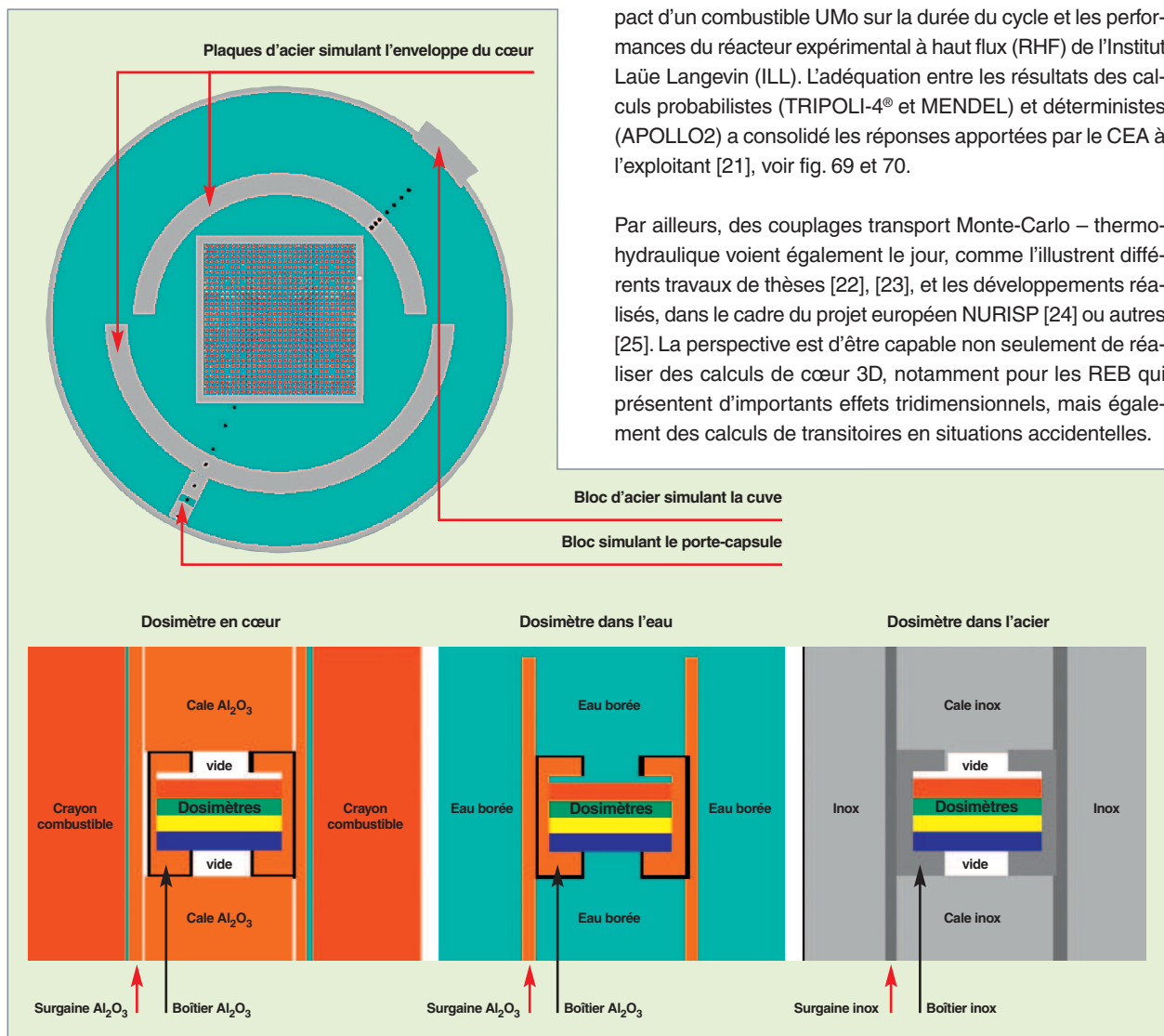


Fig. 65. TRIPOLI-4®, modélisation de l'expérience FLUOLE dans le réacteur expérimental ÉOLE (expérience visant à valider la détermination de la fluence neutronique reçue par la cuve d'un REP) et description des dosimètres retenus [20].

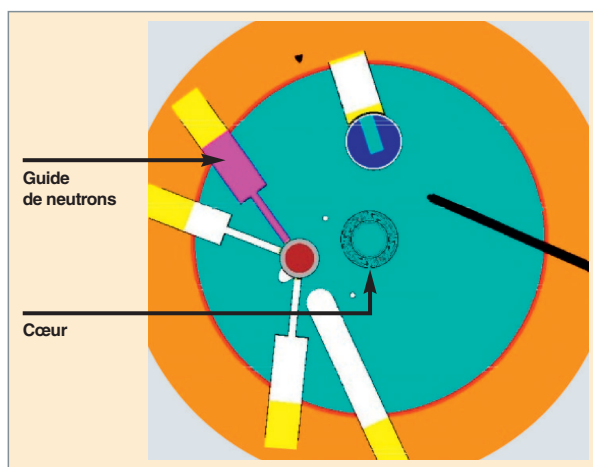


Fig. 69. Coupe horizontale du Réacteur à Haut Flux (RHF) de l'Institut Laue Langevin [21].

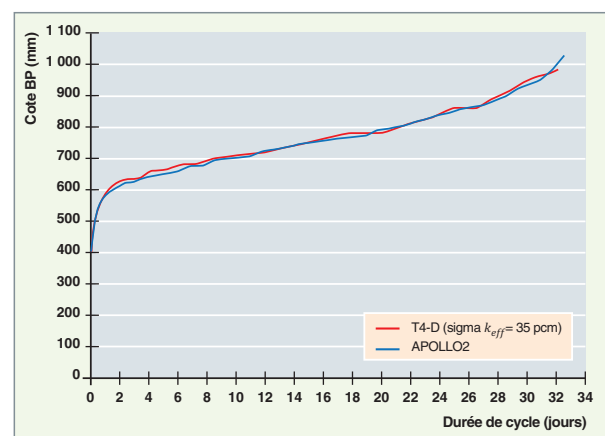


Fig. 70. Comparaison calcul-calcul TRIPOLI-4® / MENDEL avec le code déterministe APOLLO2 sur le calcul de la cote de barre de pilotage du RHF, au cours d'un cycle d'irradiation [21].

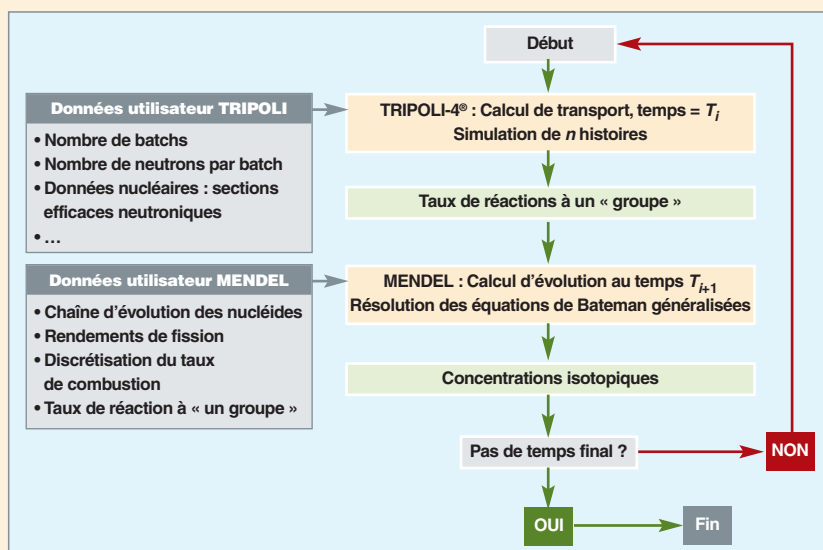
Jusqu'au début des années 2000, les calculs de cœur, à l'aide des codes de transport Monte-Carlo, se faisaient pour un nombre limité de configurations figées, à des fins de validation de calculs déterministes. La puissance accrue des ordinateurs permet désormais d'envisager de tels calculs « en évolution » – ainsi que cela se fait dans un calcul de cœur déterministe – en couplant le solveur de transport des neutrons à celui résolvant les équations d'évolution temporelle des concentrations des nucléides (équations de Bateman) du combustible nucléaire. La terminologie anglaise utilisée pour désigner les codes de calcul effectuant ce type de couplage est « *Monte-Carlo burnup codes* » souvent reprise en français avec l'expression « **Monte-Carlo évoluant** ». Le tableau situé à la fin de cet encadré indique le nom donné à certains de ces codes en usage. Le couplage entre le code de Monte-Carlo **TRIPOLI-4®** et le solveur d'évolution de **MENDEL** est brièvement décrit ci-après.

Ces deux logiciels sont associés *via* des interfaces informatiques permettant de construire des schémas de couplages entre le calcul de transport et le calcul d'évolution, pilotées par ROOT [1]. Le couplage consiste à calculer, dans un premier temps, les flux et les taux de réaction avec le code de transport Monte-Carlo (en supposant les concentrations des milieux fixées), puis à utiliser ces résultats pour estimer les concentrations après irradiation pendant une durée donnée, à l'aide du code d'évolution (en supposant, cette fois, les flux fixés). En itérant sur cette séquence de calcul, on construit alors des schémas temporels d'évolution (par exemple de type « prédicteur-correcteur »). **TRIPOLI-4®** permet également de modifier la géométrie ou la composition des objets en cours de calcul, ainsi que de définir les conditions d'irradiation selon différents modes possibles (*via* les données du flux ou des taux de réaction, ou encore en mélangeant les deux approches). L'exécution peut être commandée de manière interactive ou

non, en fonction du choix de l'utilisateur. Celui-ci peut également choisir un pilotage par mots-clés, ou en programmant lui-même ses séquences de calcul dans le jeu de données C++.

Le développement des schémas de calcul de type Monte-Carlo évoluant fait l'objet d'une forte activité de R&D, du fait de questions spécifiques soulevées par l'approche probabiliste comme, par exemple, la convergence statistique, la propagation des incertitudes. À cet égard, une attention particulière doit être apportée à l'étude de l'exactitude du résultat obtenu, car celui-ci peut être entaché de différentes erreurs systématiques (dites « biais ») qu'il convient de quantifier. Celles-ci peuvent être liées :

- À la discrétisation spatiale (hypothèse d'uniformité des concentrations dans les volumes élémentaires) et temporelle (hypothèse de stationnarité du flux dans chacun des intervalles de temps de la discrétisation en temps – ou en fluence ou en taux de combustion –, comme pour les calculs déterministes).
- au caractère aléatoire des taux de réaction estimés, propre au transport Monte-Carlo, qui induit un biais sur les concentrations calculées par les équations déterministes d'évolution [2]. Ce biais est dû au caractère non linéaire des équations d'évolution vis-à-vis des taux de réaction (ou du flux de neutrons) et se propage au fur et à mesure des différentes étapes de la procédure itérative. La figure 68, extraite de [3], met en évidence l'existence d'un tel biais sur un calcul de crayon combustible. Le comportement de ce biais a été étudié avec le code **TRIPOLI-4®** en effectuant plusieurs types de simulations : 1×1 , 5×5 , 10×10 , 20×20 , 100×100 , et $1\,000 \times 1\,000$ où le premier nombre représente le nombre de batchs et le second le nombre de neutrons par batch. Cette étude met en relief l'importance du nombre des neutrons échantillonnés qui permet de diminuer arbitrairement cette source d'erreur.



Références

- [1] <http://root.cern.ch/drupal/>
- [2] E. DUMONTEIL, C.M. DIOP, « Biases and statistical error bars in Monte Carlo burnup calculations : an unbiased stochastic scheme to solve Boltzmann/Bateman coupled equations », *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, N2, pp. 165-170, 2011.
- [3] E. BRUN, E. DUMONTEIL and F. MALVAGI, « Systematic Uncertainty Due to Statistics in Monte-Carlo Burnup Codes: Application to a Simple Benchmark with TRIPOLI-4-D », *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, pp. 879-885, 2011.

Fig. 67. Principe du couplage Boltzmann / Bateman avec le code de Monte-Carlo **TRIPOLI-4®** et le solveur d'évolution **MENDEL**.

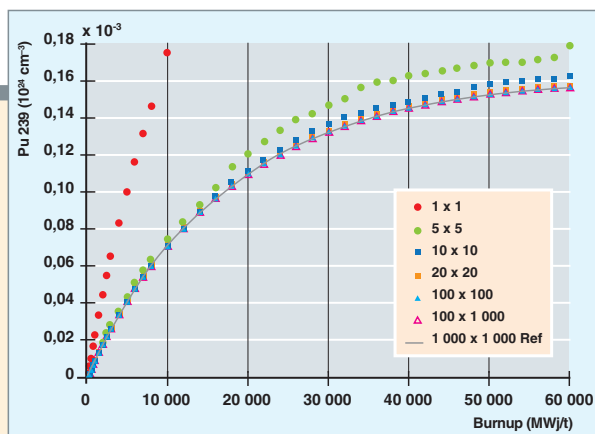


Fig. 68. Mise en évidence du biais de calcul sur la concentration de Pu 239 dans un calcul Monte-Carlo évoluant.

Le tableau suivant donne d'autres exemples de systèmes logiciels couplant un code de transport Monte-Carlo et un code d'évolution :

Exemples de systèmes logiciels couplant un code de transport Monte-Carlo et un code d'évolution

Nom du système logiciel couplé	Codes couplés	
	Code de transport Monte-Carlo	Code d'évolution
MOCUP (Idaho National Engineering Laboratory, USA), 1995.	MCNP	ORIGEN2
MCB (Royal Institute of Technology, Suède), 1999.	MCNP	CINDER
MCWO , (Idaho National Engineering & Environmental Laboratory, USA), 1999.	MCNP	ORIGEN2
MONTEBURNS (Los Alamos National Laboratory, USA), 1999.	MCNP	ORIGEN2
MURE (Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie de Grenoble, Institut de Physique Nucleaire d'Orsay, France), 2000.	MCNP(X)	module d'évolution propre
MCODE (MIT, USA), 2002.	MCNP	ORIGEN2
ALEPH (SCK -CEN, Belgique), 2005.	MCNP(X)	ORIGEN2
MCNP-ACAB (Universidad Politecnica de Madrid, UPM, Espagne), 2005.	MCNP	ACAB
MCNPX (Los Alamos National Laboratory, USA), 2006.	MCNPX	CINDER90
MCOR (Pennsylvania State University, USA, AREVA, Erlangen, Allemagne), 2006.	MCNP	ORIGEN-S, puis KORIGEN
VESTA (IRSN, France) interface générique, 2008.	MCNP, MORET...	ORIGEN2, PHOENIX...

Les codes « simplifiés »

Dans certains cas, les exigences de simplicité et de rapidité de réalisation des calculs, la connaissance précise des situations à modéliser, leur systématique, ont conduit à développer des codes de calculs dits « simplifiés ».

On peut citer :

- Le code **NARMER** (successeur des codes MERCURE et NARCISSE), destiné à la radioprotection *gamma*, et qui permet de réaliser des calculs de débit de dose et d'échauffements par une méthode dite « d'atténuation en ligne droite ». Il est indispensable, pour l'utiliser, de disposer de bibliothèques d'entrées spécifiques (sections efficaces, facteurs d'accumulation) ; il est validé essentiellement par des comparaisons à des calculs de référence réalisés avec le code TRIPOLI-4® ;

- le code **CÉSAR*** [26], qui permet de faire des calculs de bilan matière de manière rapide ; il utilise des bibliothèques d'entrée issues majoritairement d'APOLLO2, et il est validé par comparaison à DARWIN ;

- le code **FAKIR**, qui détermine la puissance résiduelle des combustibles irradiés [27, 28].

Principaux codes de physique des réacteurs

Les codes de neutronique développés et utilisés dans la communauté mondiale de la physique des réacteurs nucléaires sont présentés dans les tableaux 19 à 20 ci-après, successivement relatifs au transport déterministe, au transport probabiliste par la méthode de Monte-Carlo et à l'évolution temporelle isotopique. Ce recensement n'est cependant pas exhaustif. Quelques-unes des principales caractéristiques de ces codes y sont indiquées. On peut noter que généralement, les industriels ont développé leur propre code de cœur.

Codes de transport déterministes

Tableau 18

Codes de neutronique déterministes

Ceux marqués d'une étoile comportent un solveur d'évolution isotopique.

Nom	Institution	Applications Équation	Bibliothèque de sections efficaces	Géométrie	Autoprotection	Solveur de flux
AEGIS*	Nuclear Engineering, Limited - Nuclear Fuel Industries - Nagoya University (Japon)	Réseau/cœur Transport	172 groupes	3D quelconque	Équivalence (URR) et maillage ultrafin (RRR)	2D : MOC
AGENT	Purdue University (États-Unis)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D quelconque (par R-fonctions)	–	3D : couplage 2D (MOC)/1D(FDM)
ANC	Westinghouse (États-Unis)	Cœur Diffusion	PARAGON (2 groupes)	3D XYZ	–	3D : NEM
APOLLO2*	CEA (France)	Réseau/cœur Transport	172/281 groupes et plus	2D quelconque (MOC), réseau de cellules (Pij et S_N)	Équivalence (RRR) sous-groupes (URR)	2D : Pij, MOC, S_N
APOLLO3* (TH)	CEA (France)	Réseau/cœur Transport	Réseau : 172/281 groupes et plus Cœur : sections efficaces microscopiques autoprotégées APOLLO2, ECCO, APOLLO3	2D quelconque (MOC), réseau de cellules (Pij et S_N) 3D quelconque	Équivalence, (RRR) sous-groupes (URR)	2D : Pij, MOC, S_N 3D : diffusion, transport SP_N , transport S_N , MOC
ATTILA*	LANL, puis Transpire Inc. (États-Unis)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D quelconque (maillage tétraédrique)	–	3D : S_N
CASMO*	Studsvik Scandpower (États-Unis)	Réseau/cœur Transport	586 groupes	Réseau 2D LWR	Équivalence	2D : MOC
CHAPLET 3D	TEPCO - Osaka University (Japon)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D quelconque	–	3D : couplage 2D (MOC)/1D(FDM ou MOC ou NEM)
CRONOS2* (TH)	CEA (France)	Cœur, Diffusion transport, transport simplifié	APOLLO2, ECCO (multigroupe)	3D XYZ, HEX-Z et triangulaire d'axe Z	–	3D : Diffusion, transport SP_N , transport S_N
DeCART (TH)	KAERI (Corée) - ANL (États-Unis)	Cœur transport	sections efficaces microscopiques	3D XYZ	sous-groupes	3D : CMFD : homogénéisation 2D par MOC ; solution 1D axiale par NEM
DENOVO (dans SCALE)	ORNL (États-Unis)	Cœur transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	3D XYZ structurée	–	3D : S_N
TRIVAC	École Polytechnique Montréal (Canada)	Cœur Diffusion, transport simplifié	DRAGON	3D XYZ et HEX-Z	–	3D : diffusion, transport SP_N

CMFD : Méthode aux différences finies surmaillage grossier (*Coarse Mesh Finite Difference*)

FDM : Méthode aux différences finies (*Finite Difference Method*)

NEM : Méthode nodale (*Nodal Expansion Method*)

(TH) : Prise en compte des contre-réactions thermo-hydrauliques

XYZ : Géométrie 3D cartésienne

HEX-Z : Géométrie 3D hexagonale d'axe Z

RZ : Géométrie 2D cylindrique

RO : Géométrie 2D cylindrique

ROZ : Géométrie 3D cylindrique

Nom	Institution	Applications Équation	Bibliothèque de sections efficaces	Géométrie	Autoprotection	Solveur de flux
DRAGON*	École Polytechnique Montréal (Canada)	Réseau Transport	172 groupes	Réseau cartésien ou hexagonal	Équivalence (Stammler), sous-groupes	2D et 3D : Pij, MOC
ERANOS*	CEA (France)	Cœur Diffusion, transport	ECCO	RZ, XYZ, HEX-Z	–	2D : $S_N(R-Z)$, 3D : $P_N(XYZ$ ou $HEX-Z)$
ERANOS/ ECCO	CEA (France)	Réseau Transport	1968, 175, 172, 33 groupes	Réseau cartésien ou hexagonal	Sous-groupes	2D : Pij
HELIOS2*	Studsvik Scandpower (États-Unis)	Réseau Transport	177(n)/48(γ) ou 49(n)/18(γ) groupes	Réseau 2D quelconque	Sous-groupes (facteur Dancoff calcul en MOC)	2D : Pij, MOC («longues» et «courtes»)
Lancer 02*	Global Nuclear Fuel - GE Energy, Nuclear (États-Unis)	Réseau Transport	118/190 groupes	Réseau BWR	Modèles approchés (Wigner, Bell, Dancoff, Williams)	2D : MOC (après condensation des sections à 19 groupes)
PARAGON*	Westinghouse (États-Unis)	Réseau Transport	70 (n)/48(γ) groupes	Réseau cartésien de cellules	Équivalence (Stammler)	2D : Pij (cellules couplées par courants d'interface)
PARCS	Purdue University (États-Unis)	Cœur Diffusion	TRITON (multigroupe)	3D XYZ, HEX-Z, ROZ	–	3D : diffusion nodale
TRITON* (dans SCALE)	ORNL (États-Unis)	Réseau Transport	238/44 groupes et 27(n)/18(γ) groupes	2D quelconque	Transport S_n ou Pij à énergie ponctuelle (50 000 à 70 000 points)	2D : MOC (caractéristiques «courtes»)
SCOPE2*	Nuclear Engineering, Limited - Nuclear Fuel Industries - Nagoya University (Japon)	Cœur Transport	AEGIS (9 groupes)	3D XYZ crayon par crayon	–	Transport SP_3
SHARP/UNIC	ANL (États-Unis)	Réseau/cœur transport	>10 000 groupes	3D quelconque	Pas nécessaire	3D : P_N + éléments finis, MOC
SIMULATE*	Studsvik Scandpower (États-Unis)	Cœur Diffusion	CASMO	3D LWR	–	3D : diffusion nodale par synthèse 2D/10
PARTISN	LANL (États-Unis)	Cœur Transport	Sections efficaces macroscopiques autoprotégées	1D, 2D (XY, RZ, ou RO), 3D (XYZ ou ROZ)	–	3D : S_N
WIMS*	Serco (Royaume-Uni)	Réseau Transport	172 groupes	Réseau LWR, HWR, GCR	Équivalence (RRR), sous-groupes (URR)	2D : Pij, S_N , MOC 3D : MOC, Diffusion, Hybride Monte-Carlo

Codes de transport Monte-Carlo

Des codes de transport Monte-Carlo autres que ceux répertoriés dans le tableau 19 existent comme par exemple McCARD (Corée), COG11, TART2005 (États-Unis), MONACO dans SCALE, SPMC (Chine). On peut mentionner aussi les codes

utilisés dans le domaine médical, celui de la physique des particules et, parfois, dans le domaine de la physique des réacteurs nucléaires : EGS4 (USA), FLUKA (Italie, CERN), GEANT4 (CERN), MCNPX (USA), PENELOPE (Espagne)... Ils concernent des domaines d'énergie beaucoup plus vastes que celui du tableau 19, allant jusqu'à plusieurs GeV et au-

Tableau 19

Exemples de codes de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo : domaine d'énergie de 0 à 20 MeV

Quelques-unes de leurs spécificités sont précisées. Ceux marqués d'un * comportent ou peuvent utiliser un solveur d'évolution isotopique.

Nom	Institution	Particules	Types de problèmes	Représentation des sections efficaces	Géométrie 3D	Principales techniques de réduction de la variance	Parallélisme
KENO-6*	Oak Ridge National Laboratory, États-Unis	Neutrons	Valeur propre (k_{eff})	Ponctuelle ; multigroupe	Surfacique	–	Oui
MCBEND	AMEC, ANSWERS Software Service, Royaume-Uni	Neutrons photons couplés (n, γ)	Source fixe	Ponctuelle	Combinatoire ; trous	« Splitting/roulette » « Woodcock tracking »	–
MAVRIC	Oak Ridge National Laboratory, États-Unis	Neutrons photons couplés (n, γ)	Source fixe	Multigroupe	Surfacique	Importance (calcul adjoint avec code S_N)	Oui
MCNP-5*	Los Alamos National Laboratory, États-Unis	Neutrons photons couplés (n, γ) électrons positons	Valeur propre (k_{eff}) source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité	Surfacique, hiérarchique	« Splitting/roulette » (fenêtre de poids) Transformation exponentielle	Oui
MCU*	Kurchatov Institute, Russie	Neutrons photons électrons positons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle	Combinatoire, hiérarchique	« Woodcock tracking »	Oui
MC21*	Knolls Atomic Power Laboratory and the Bettis Atomic Power Laboratory, États-Unis	Neutrons Photons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ;	Ponctuelle, tables de probabilité	Combinatoire, hiérarchique	–	Oui
MONK*	AMEC, ANSWERS Software Service, Royaume-Uni	Neutrons	Valeur propre (k_{eff})	Ponctuelle ; multigroupe	Combinatoire ; trous ; import CAO	« Woodcock tracking »	Oui
MORET-4, 5	IRSN, France	Neutrons	Valeur propre (k_{eff}) et combinatoire	Multigroupe (APOLLO2, DRAGON) ponctuelle et tables de probabilité (URR)	Combinatoire	« Woodcock tracking »	–
MVP*	JAEA, Japon	Neutrons photons couplés (n, γ)	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité (URR)	Combinatoire	« Splitting/roulette »	Oui
PRIZMA*	RFNC – Zababakhin Institute of Technical Physics, Russie	Neutrons photons particules chargées	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité	–	Importance Transformation exponentielle	
SERPENT*	VTT Technical Research Centre of Finland	Neutrons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe	Ponctuelle	Surfacique	« Woodcock tracking »	Oui
TRIPOLI-4**	CEA, France	Neutrons photons couplé (n, γ) électrons positons	Valeur propre (k_{eff}) ; source fixe ; dépendant du temps	Ponctuelle, tables de probabilité (URR, possible RR) ; multigroupe autoprotégée (APOLLO-2)	Combinatoire et surfacique (panachage possible) Géométrie ROOT	Transformation exponentielle « Splitting/roulette »	Oui

delà, ainsi que de nombreux types de particules autres que les neutrons et les *gammas*, en particulier les particules chargées (protons, deutons, α , ions). Ils sont aptes à traiter les réactions de spallation (voir *supra*, p. 39 et réf. [29]) importantes dans le cadre de la problématique de la transmutation des déchets nucléaires.

Codes d'évolution

Tableau 20

Codes d'évolution temporelle des concentrations des radionucléides			
Nom	Institution	Méthode de résolution	Nucléides
CINDER	Bettis Atomic Power Laboratory, Los Alamos National Laboratory, États-Unis	Analytique (chaînes d'évolution linéaires)	Noyaux lourds, produits de fission, produits d'activation, produits de spallation.
DARWIN MENDEL	CEA, France	Analytique Numérique Runge-Kutta (appartient à la famille des « <i>time step methods</i> » ou méthodes de discrétisation en pas de temps élémentaires)	Noyaux lourds, produits de fission, produits d'activation, produits de spallation
FISPACT	UKAEA, Culham Science Centre, Royaume-Uni	Formulation matricielle, résolution numérique	Produits d'activation (orienté études de radioprotection, comme celles relatives à l'activation neutronique des structures d'une machine à fusion thermonucléaire). Complémentaire du code FISPIN.
FISPIN	AMEC, ANSWERS Software Service, Royaume-Uni	Numérique, approximation du terme dérivée (appartient à la famille des « <i>time step method</i> » ou « méthode de discrétisation en pas de temps élémentaires »)	Noyaux lourds, produits de fission, quelques produits d'activation (matériaux de structure)
ORIGEN	Oak Ridge National Laboratory, États-Unis	Exponentielle de matrice	Noyaux lourds, produits de fission, produits d'activation, produits de spallation.

► Références

[1] R. SANCHEZ, J. MONDOT, Z. STANKOVSKI, A. COSSIC, I. ZMIJAREVIC, « APOLLO2: a user oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations », *Nuclear Science and Engineering*, 100, pp. 352-362, 1988.

[2] R. SANCHEZ, I. ZMIJAREVIC, M. COSTE-DELCLAU, E. MASIELLO, S. SANTANDREA, E. MARTINOLLI, L. VILLATTE, N. SCHWARTZ, N. GULER, « APOLLO2 Year 2010 », *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 42, n° 5, pp. 474-499, October 2010.

[3] Z. STANKOVSKI, « Implementation of the component concept in SILENE 2D/3D Pre & Post Processing GUI », M&C+SNA 2007, April 15-19, Monterey, USA, 2007.

[4] Igor ZMIJAREVIC *et al.*, « Industrial application of APOLLO2 to Boiling Water Reactors », PHYSOR 2006, Vancouver, BC, Canada, September 10-14, 2006.

[5] J.J. LAUTARD, S. LOUBIÈRE and C. FEDON-MAGNAUD, « CRONOS a Modular Computational System for Neutronic Core Calculations », *Specialist IAEA meeting, Advanced Computational Methods for Power Reactors*, Cadarache, France, 1990.

[6] J.J. LAUTARD, C. MAGNAUD, F. MOREAU, A.M. BAUDRON, *CRONOS2 : un logiciel de simulation neutronique des cœurs de réacteur*, Rapport scientifique DRN, SERMA/LENR/PU/00/2746/A, 2000.

[7] G. RIMPAULT *et al.*, « The ERANOS Code and Data System for Fast Reactor Neutronic Analyses », PHYSOR 2002, Seoul, Korea, 2002.

[8] G. RIMPAULT *et al.*, « Algorithmic Features of the ECCO Cell Code for Treating Heterogeneous Fast Reactor Subassemblies », *International Topical Meeting on Reactor Physics and Computations*, Portland, Oregon, May 1-5, 1995.

[9] A. TSILANIZARA, C.M. DIOP, B. NIMAL, M. DETOC, L. LUNÉVILLE, M. CHIRON, T.D. HUYNH, I. BRÉSARD, M. EID, J.C. KLEIN, B. ROQUE, P. MARIMBEAU, C. GARZENNE, J.M. PARIZE, C. VERGNE, « DARWIN : An Evolution Code System for a Large Range Application », *Journal of nuclear Science and Technology*, Supplement 1, pp. 845-849, March 2000.

[10] L. SAN-FELICE, R. ESCHBACH, P. BOURDOT, A. TSILANIZARA, T.D. HUYNH, « Experimental Validation of The Darwin2.3 Package for Fuel Cycle Applications », PHYSOR 2012 – *Advances in Reactor Physics – Linking Research, Industry, and Education*, Knoxville, Tennessee, USA, April 15-20, 2012.

[11] P. GUÉRIN, A. M. BAUDRON, J. J. LAUTARD, « Domain Decomposition Methods for Core Calculations Using The MINOS Solver », M&C+SNA 2007, Monterey, USA, April 15-19, 2007.

- [12] P. GUÉRIN, A.M. BAUDRON, J.J. LAUTARD, « A component mode synthesis method for 3D cell by cell SPn core calculation using the mixed dual finite element solver MINOS », M&C 2005, Avignon, France, September 12-15, 2005.
- [13] A. BOULORE, Ch. STRUZIK, F. GAUDIER, « Modelling of the Uncertainty of Nuclear Fuel Thermal behaviour using the URANIE framework », *The First International Conference on Advances in System Simulation*, SIMUL 2009, Porto, Portugal, September 20-25, 2009.
- [14] J.P. BOTH, H. DERRIENNIC, B. MORILLON, J.C. NIMAL, « A Survey of TRIPOLI-4 », *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, Arlington, Texas, USA, pp. 373-380, April 24-28, 1994.
- [15] J.P. BOTH, A. MAZZOLO, Y. PÉNÉLIAU, O. PETIT, B. ROESSLINGER, *Notice d'utilisation du code TRIPOLI-4.3 : code de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo*, rapport CEA-R-6043, 2003 ; TRIPOLI-4® Project Team, *TRIPOLI-4 User Guide*, CEA-R-6316, 2013.
- [16] E. BRUN, E. DUMONTEIL, F. X. HUGOT, N. HUOT, C. JOUANNE, Y. K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT, J. C. TRAMA, A. ZOIA, « Overview of TRIPOLI-4® version 7 Continuous-Energy Monte Carlo Transport Code », ICAPP 2011, Nice, France, May 2-5, 2011.
- [17] <http://www.nea.fr/abs/html/nea-1716.html>
- [18] <http://root.cern.ch/root/html>
- [19] F. X. HUGOT, Y. K. LEE, F. MALVAGI, « Recent R&D around the Monte-Carlo code TRIPOLI-4® for criticality calculation », *Proceedings of International Conference*, PHYSOR 2008, CD-ROM, Interlaken Switzerland, 2008.
- [20] D. BERETZ, S. BOURGANEL, P. BLAISE, C. DESTOUCHES, N. HUOT, J.M. GIRARD, C. DOUMERGUE, H. PHILIBERT, R. BRISSOT, M. DUMONT, « FLUOLE : A new relevant experiment for PWR pressure vessel surveillance », *Reactor Dosimetry State of Art 2008, Proceedings of the 13th International Symposium*, Akersloot, May 25-30, 2008.
- [21] G. CAMPIONI, B. DESBRIÈRE, « HFR Advanced Computation's Models », *Proceedings of International Conference*, PHYSOR 2008, CD-ROM Interlaken, Switzerland, 2008.
- [22] N. CAPELLAN, *Couplage 3D neutronique thermohydraulique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants*, Université Paris Sud XI, Orsay, France, 2009.
- [23] F. VAÏANA, *Couplage Neutronique- Thermohydraulique. Application au Réacteur à Neutrons Rapides refroidi à l'Hélium*, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, France, 2009.
- [24] J. E. HOOGENBOOM, A. IVANOV, V. SANCHEZ and C. DIOP, « A Flexible Coupling Scheme for Monte Carlo and Thermal-hydraulics Codes », *The 2011 International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011.
- [25] David P. GRIESHEIMER, « Common Monte-Carlo Design Tool (CMCDT) for Reactor Design and Analysis », http://www.ornl.gov/sci/nsd/outreach/presentation/2008/Griesheimer_seminar.pdf, *Knolls Atomic Power Laboratory and the Bettis Atomic Power Laboratory seminar*, April 9, 2008.
- [26] J.M. VIDAL, J.P. GROULLIER, A. LAUNAY, Y. BERTHION, A. MARC, SGN, H. TOUBON, « CÉSAR: A Code for Nuclear Fuel and Waste Characterisation », *Proceedings of International Symposium Waste Management 2006*, February 26 – March 2, Tucson, Arizona, USA, 2006.
- [27] T.D. HUYNH, J.C. NIMAL, M. ZACHAR, « FAKIR 5.0 A PC Code for Residual Decay Heat Power and Activity Calculation (Fuel After Heat Keyboard Instant Result) », *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, April 24-28, 1998, pp. 113-120, Arlington, USA, 1994.
- [28] T.D. HUYNH, *Développement et mise au point de la bibliothèque physique du système PEPABAC (progiciel FAKIR) à l'aide des codes PEPIN et APOLLO 1*, Thèse, Université Paris 11, Orsay, 1995, Note CEA-N-2815, 1996.
- [29] J.-C. DAVID, *Spallation : comprendre pour prédire !?*, Thèse HDR, Université de Strasbourg, France 2012.

**Cheikh M. DIOP, Éric DUMONTEIL, Anne NICOLAS,
Odile PETIT, Michel SOLDEVILA, Jean-Christophe TRAMA,
Aimé TSILANIZARA,**
Département de modélisation des systèmes et des structures.
Cyrille DE SAINT-JEAN et Yannick PÉNÉLIAU
Département d'études des réacteurs.

Les formulaires de calcul : deux exemples

NARVAL : formulaire neutronique appliqué aux réacteurs de propulsion navale

Malgré une grande similitude de comportement physique avec les réacteurs à eau sous pression, les réacteurs de propulsion nucléaire (P_N) présentent les caractéristiques suivantes : un cœur de petite taille, qui provoque des fuites importantes, une géométrie particulière, l'utilisation de **poisons consommables*** spécifiques et, enfin, le pilotage par des barres absorbantes mobiles hétérogènes. Tout cela en fait des objets qui s'éloignent des « standards » électrogènes terrestres et conduit à les modéliser de façon quelque peu différente.

NARVAL, formulaire Neutronique Appliqué aux Réacteurs de propulsion naVAle dont les prémices datent du début des années 90 et dont la première version a été livrée dès 1999 à AREVA-TA, est aujourd'hui arrivé à maturité avec sa quatrième version livrée en décembre 2009 et régulièrement améliorée.

Initialement fondé sur l'utilisation des bibliothèques de données nucléaires JEF-2.2 et l'enchaînement des codes APOLLO2 et CRONOS2 utilisés dans les filières **REL*** civiles, NARVAL comporte un grand nombre de procédures additionnelles spécifiques à la modélisation neutronique des cœurs de P_N . La première étape de ce formulaire consiste à résoudre le problème en énergie sur un motif élémentaire 2D correspondant à un assemblage du cœur, puis à effectuer un calcul de flux avec une méthode précise (méthode S_{P_N}) en utilisant pour la variable énergie un maillage fin (172 groupes d'énergie), cela associé à un calcul d'évolution des concentrations isotopiques. Cette étape permet de disposer de données précises constituant une bibliothèque d'entrée pour les calculs de cœur proprement dits. Dans une seconde étape, le calcul à l'échelle cœur, à trois dimensions, prenant en compte l'usure du cœur au cours de son irradiation, est effectué en utilisant la méthode de la diffusion après condensation des sections efficaces sur quatre macrogroupes d'énergie, homogénéisation spatiale des constantes neutroniques, et étape d'équivalence (voir *supra*, La démarche du neutronicien, p. 51-54) liée au changement d'équation (passage de l'équation du transport – exacte – à l'équation de la diffusion – simplifiée).

La démarche de mise au point, de validation et de qualification de NARVAL est synthétisée dans ce qui suit. En premier lieu, l'étape de *validation numérique* réalisée au temps zéro à

l'aide du code de référence Monte-Carlo à énergie continue TRIPOLI-4® permet, outre le choix des options de calcul déterministe optimales, de quantifier les biais de modélisation aux trois niveaux d'échelle : cellule élémentaire, assemblage et cœur.

La *phase de qualification (ou validation expérimentale)* repose, quant à elle, sur l'utilisation du retour d'expérience des cœurs embarqués sur les navires, des prototypes à terre RNG et RES, et de la maquette critique AZUR. NARVAL simule alors l'irradiation de ces cœurs, les expériences les plus significatives, et calcule l'évolution de l'inventaire isotopique du combustible à une échelle très fine. Ses résultats peuvent alors être confrontés aux analyses isotopiques réalisées après dissolution soit de combustible, soit de poisons neutroniques irradiés.

Le calcul d'un cœur de P_N à trois dimensions en évolution en géométrie hétérogène correspond à quelques dizaines de millions de mailles de calcul et prend actuellement de l'ordre de cent heures sur un ordinateur LINUX 2.3 GHz – 16 Go de RAM. Ce formulaire est ainsi utilisé par AREVA-TA pour les études de conception et les études de sûreté.

Le formulaire NARVAL traite ces cœurs dans toute leur complexité actuelle avec des incertitudes associées aux paramètres clés pour la sûreté jugées satisfaisantes. Toutefois, étant donné les performances accrues visées par la maîtrise d'ouvrage CEA/DAM/DPN, en termes de durée de vie de ces cœurs, le formulaire doit évoluer pour améliorer encore le calcul des grandeurs intégrales telles que la réactivité globale du cœur ou l'efficacité intégrale des barres absorbantes et le calcul des grandeurs locales telles que les facteurs de puissance, les taux de combustion ou les concentrations isotopiques dans des configurations de plus en plus hétérogènes. L'utilisation de données nucléaires plus récentes issues de l'évaluation JEFF-3, de modèles physiques et de solveurs de flux plus performants, comme la méthode des caractéristiques implémentée dans le code APOLLO2, ou même des schémas hybrides associant NARVAL au code Monte-Carlo TRIPOLI-4®, est prévue pour la deuxième version majeure du formulaire (NARVAL2) envisagée à l'horizon 2014.

De surcroît, en réponse aux spécifications techniques de besoin émises par AREVA-TA, NARVAL s'adapte aux évolutions et innovations envisagées sur les cœurs de propulsion nucléaire, par ajout de fonctionnalités de calcul (nouvelles

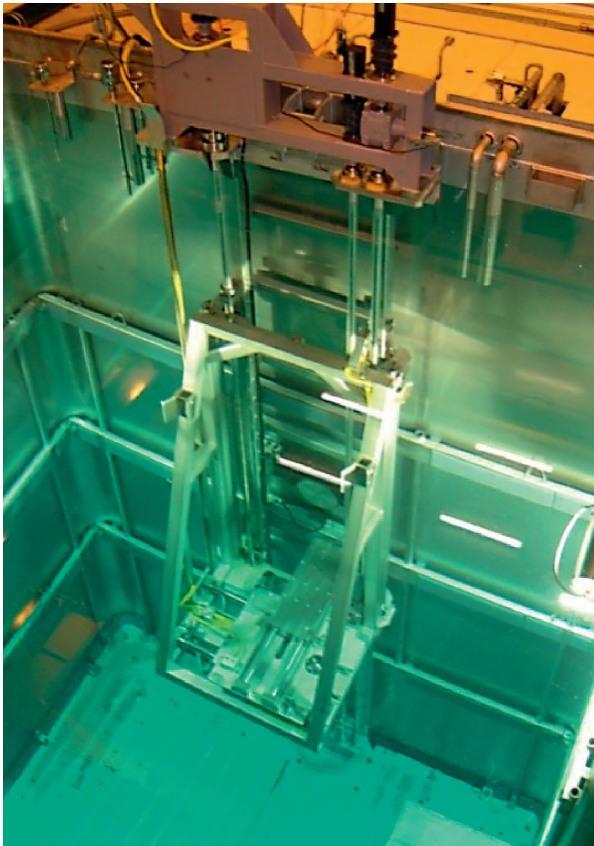


Fig. 71. Banc de gammamétrie immergé pour mesurer la distribution fine de taux de combustion sur les plaques combustibles du réacteur RES.

méthodes et procédures permettant de traiter les problèmes de transitoires à l'aide de couplages entre disciplines telles que la thermo-hydraulique et la cinétique spatiale). Une attention particulière est également portée à l'amélioration de la souplesse d'utilisation et de la portabilité du formulaire, en réponse aux différentes contraintes d'utilisation d'AREVA-TA au cours des phases d'études de faisabilité, conception et sûreté.

En support à la démarche de qualification de NARVAL une réflexion est engagée sur la conception de nouveaux programmes expérimentaux ayant deux volets :

- Le premier concernant l'expertise de combustibles et de poisons irradiés ;
- le second concernant l'instrumentation des cœurs et les incertitudes cibles, en cohérence avec l'accroissement de la précision recherchée dans les formulaires.

À terme, il est prévu que NARVAL s'appuie sur le nouveau code de neutronique APOLLO3®.

HORUS3D : un nouvel outil de simulation neutronique pour le Réacteur Jules Horowitz

Afin de pouvoir répondre aux besoins de dimensionnement du futur **réacteur de recherche Jules Horowitz (RJH)**, il a été nécessaire de développer un modèle de calcul permettant au maître d'œuvre AREVA-TA, sous la responsabilité du maître d'ouvrage CEA/DEN, de mener les études en support à la conception et à la rédaction des rapports de sûreté.

La chaîne complète d'outils de simulation dédiée aux études de conception s'appelle HORUS3D (*Horowitz Reactor simulation Unified System*). Elle a été développée dans différentes unités du CEA, et elle concerne la neutronique, la photonique, le calcul de cycle, ainsi que la thermohydraulique du cœur et des systèmes. Pour les composants neutroniques rassemblés dans HORUS3D/N (N pour neutronique), cette chaîne est essentiellement fondée sur les codes APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4®, et sur la bibliothèque de données nucléaires européenne JEFF-3.

Le cœur du RJH a subi de nombreuses évolutions au cours des études de faisabilité et de définition. Afin d'optimiser les performances du cœur en terme de flux, l'ingénierie a opté pour un arrangement irrégulier des assemblages dit « Pâquerette ». En outre, afin d'offrir la possibilité de faire varier la position des expériences placées hors cœur en cours d'irradiation, le réflecteur a été pourvu d'éléments mobiles placés dans des « rues d'eau », ce qui s'est fait au détriment de la symétrie et de la simplicité de la modélisation. Le résultat de ces choix technologiques est la nouvelle géométrie du réacteur, présentée sur la figure 72, ci-dessous.

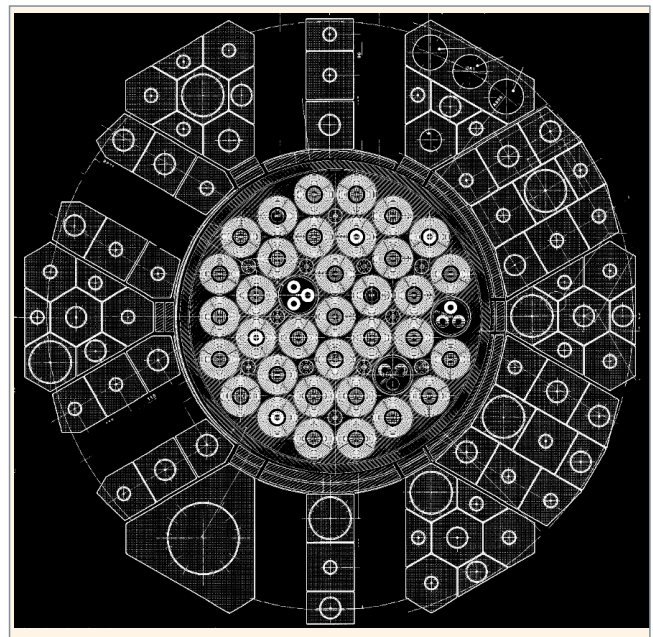


Fig. 72. Géométrie du cœur et du réflecteur du RJH «Pâquerette».

Pour les calculs neutroniques, la solution la plus exacte eût été d'utiliser la méthode des caractéristiques, qui est actuellement la voie de référence pour les calculs déterministes en évolution, puisqu'elle favorise une description hétérogène de la géométrie. Elle permet de limiter les biais de modélisation, entre autres grâce à une description géométrique très précise, y compris dans le cas de géométries non structurées (voir *supra*, p. 82). Toutefois, le code APOLLO2 ne traite actuellement que des géométries à deux dimensions, ce qui n'autorise pas le traitement de l'ensemble des besoins liés à la conception d'un réacteur et des dispositifs expérimentaux, dans le cas du RJH. De ce fait, l'utilisation conjointe d'APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4® a permis de satisfaire les exigences des concepteurs auxquelles APOLLO3® répondra à terme en traitant les géométries 3D en hétérogène.

À partir de 2007, HORUS3D/N a permis la prise en compte de la géométrie irrégulière dite « Pâquerette » du RJH à 3D avec CRONOS2 par la mise en œuvre de la méthode des « éléments finis isoparamétriques » spécialement adaptée pour les besoins en place mémoire liés à la complexité du maillage du RJH.

Les *éléments finis isoparamétriques conformes à pas triangulaire non régulier* permettent de représenter le cœur « Pâquerette » en mailles homogènes. L'élément clé est alors la modélisation des éléments combustibles par des dodéca-gones, conservant ainsi la symétrie de rotation par la prise en compte des raidisseurs support des plaques combustibles. La figure 73, ci-dessous, montre le découpage du cœur « Pâquerette » en « super-éléments finis » (SFE) hexagonaux, maillés avec l'outil SILÈNE (mailleur des codes APOLLO2, CRONOS2 et TRIPOLI-4®). Le maillage triangulaire spécifique à chaque hexagone permet de prendre en compte l'irrégularité du réseau et la complexité géométrique de l'interface réseau-caisson-réflecteur.

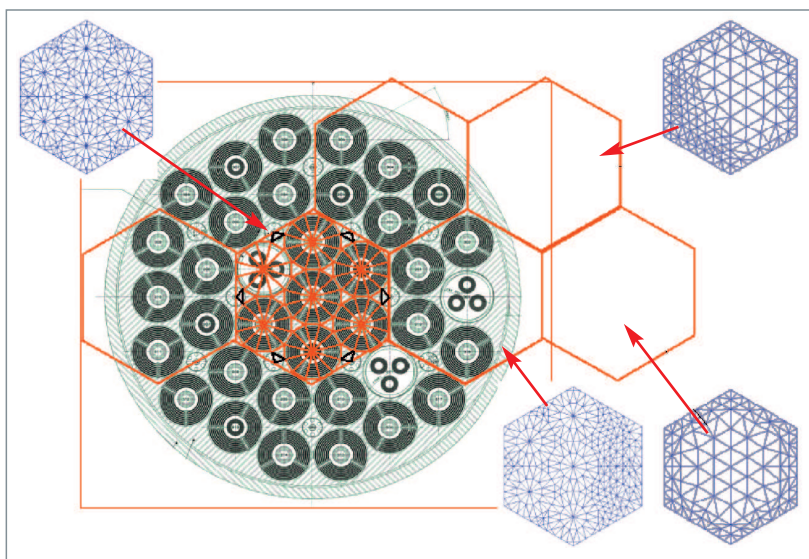


Fig. 73. Découpage du cœur RJH «Pâquerette» en macro éléments hexagonaux.

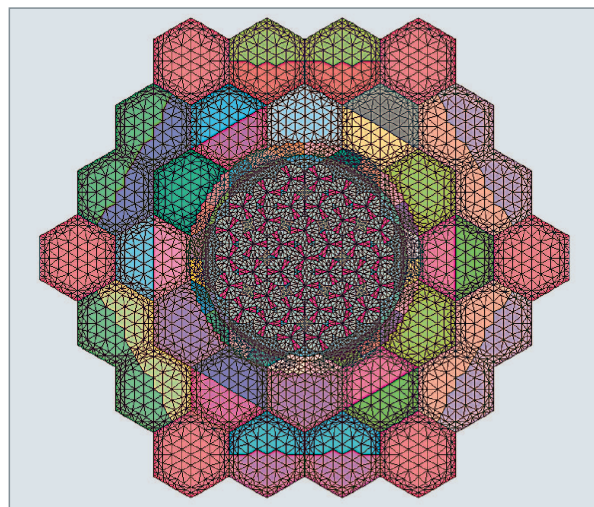


Fig. 74. Maillage CRONOS2 avec éléments finis isoparamétriques, généré par GAÏA.

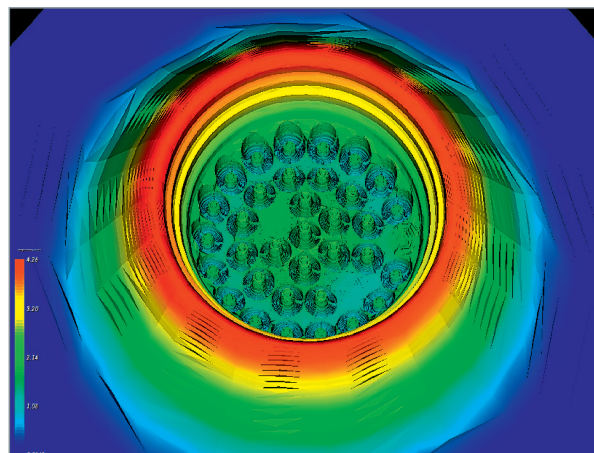


Fig. 75. Distribution 3D de flux thermique dans RJH calculée avec HORUS3D/N.

Une IHM dédiée, appelée « GAÏA », permet d'automatiser et de fiabiliser la modélisation du RJH. La première version du formulaire a été utilisée par la maîtrise d'œuvre AREVA-TA pour la fin des études de développement (fig. 74, 75).

Dans HORUS3D/N, la modélisation 3D homogène optimisée retenue nécessite de différencier 70 000 mailles en espace pour le calcul du flux et celui de l'évolution du combustible (modification au cours du temps de sa composition, en raison de l'irradiation). Le découpage énergétique pour le calcul du flux est à six groupes d'énergie (à titre d'exemple, le calcul des cœurs des réacteurs à eau sous pression est habi-

tuellement réalisé à deux groupes d'énergie, ceux des cœurs de propulsion navale à quatre groupes). Pour aboutir à une modélisation 3D du cœur homogène suffisamment précise, il est nécessaire de constituer des bibliothèques de données nucléaires homogénéisées en espace et condensées en énergie pour chaque composant du cœur (combustible, réflecteur et structures). Ces bibliothèques sont obtenues par des modélisations hétérogènes fines à 172 groupes d'énergie, en portant une attention particulière à la mise en forme des données de sections efficaces, du fait du phénomène d'autoprotection (voir *supra*, p. 65-72).

Les performances actuelles du schéma de calcul représentent le meilleur compromis entre précision et temps de calcul, et respectent les exigences de précision formulées par le maître d'œuvre. Sur une machine de type Pentium Linux séquentielle à 3 GHz, un calcul en évolution requiert environ sept heures de temps CPU, selon la configuration.

Par rapport aux calculs de référence TRIPOLI-4®, la réactivité est prédite à mieux que 200 pcm dans une configuration peu perturbée et 400 pcm dans une configuration perturbée comportant des dispositifs expérimentaux et des absorbants de contrôle. L'écart sur la puissance par assemblage est inférieur à 2 %. Une illustration de la modélisation en géométrie hétérogène et à trois dimensions du RJH avec le code TRIPOLI-4® est donnée ci-dessous (fig. 76).

En évolution, HORUS3D/N est validé par rapport à un calcul de transport à vingt groupes d'énergie et à deux dimensions

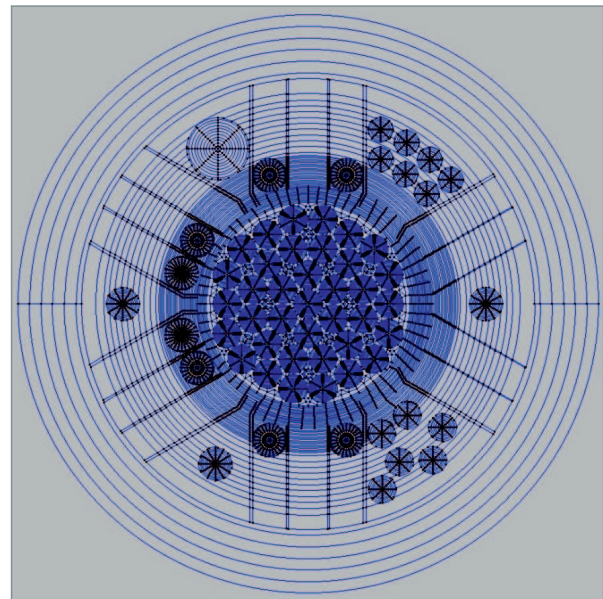


Fig. 78. Géométrie de calcul APOLLO2 du cœur RJH nu à deux dimensions.

utilisant le solveur TDT-MOC (méthode des caractéristiques) du code APOLLO2 (voir fig. 78). Entre les calculs APOLLO2 TDT-MOC et les calculs de référence TRIPOLI-4®, l'écart observé sur la réactivité est de 120 pcm. Les écarts par rapport aux valeurs TRIPOLI-4® sont de 1,6 % et 1,9 %, respectivement sur les distributions de puissances par assemblage et par plaque.

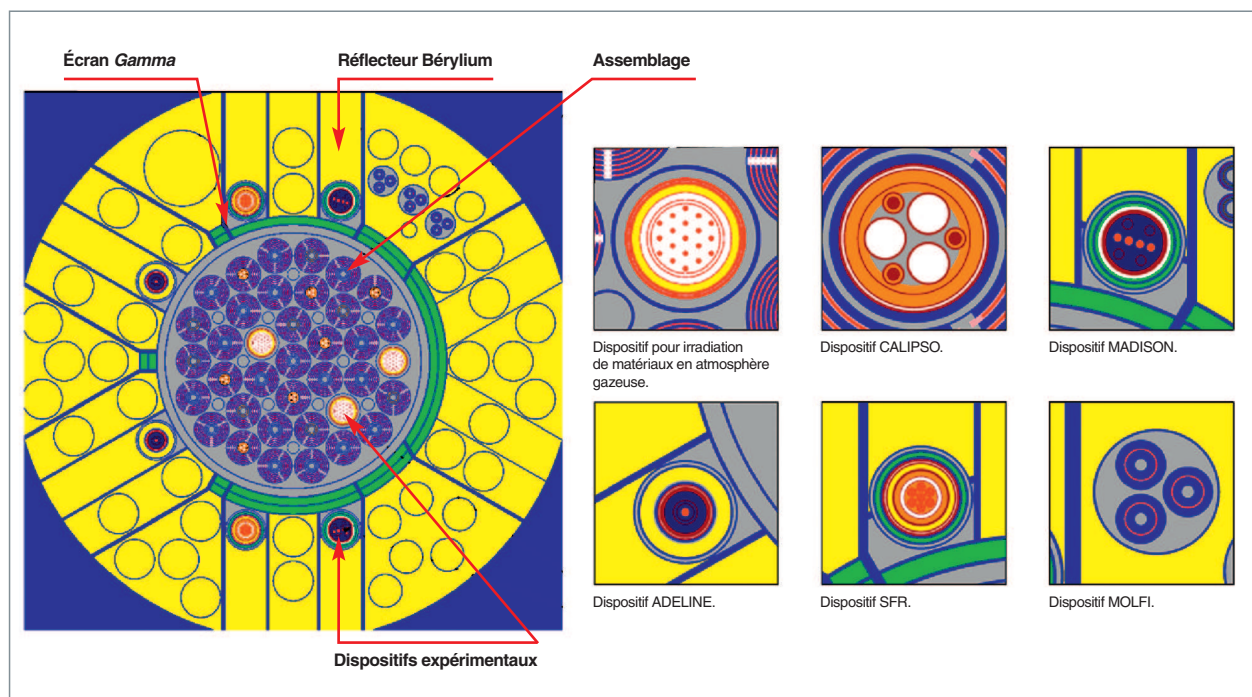


Fig. 76. Modélisation TRIPOLI-4® hétérogène du RJH, avec chargement expérimental maximum (dispositifs gaz, CALIPSO, MOLFI, MADISON, SFR et ADELIN).

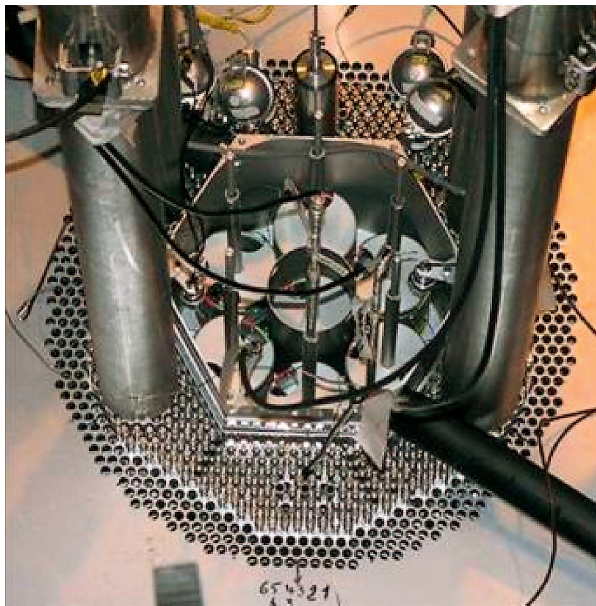


Fig. 71. Cœur AMMON en configuration de référence, chargé dans ÉOLE.

Les performances en termes de biais et d'incertitudes applicables aux études menées avec HORUS3D/N sont définies, suite à la qualification du formulaire, sur la base d'expériences conçues et réalisées par le CEA/DEN.

En particulier, des programmes expérimentaux élémentaires nommés VALMONT et ADAPh ont tout d'abord été réalisés, respectivement dans les réacteurs MINERVE, puis ÉOLE et MINERVE.

- Le programme VALMONT (Validation du combustible Aluminium Molybdène Uranium pour la NeuTronique), réalisé en 2004, a qualifié le calcul neutronique cœur avec combustible UMoAl hautement enrichi en uranium (HEU) permettant de réduire et de maîtriser les incertitudes associées ;
- le programme ADAPh (Amélioration des Données de bAse Photoniques), réalisé en 2005, a conduit à une première qualification du calcul des échauffements photoniques prompts et retardés dans les matériaux.

Le programme expérimental spécifique **AMMON*** – contenant sept assemblages RJH – dans le réacteur ÉOLE a débuté en 2010 et s'est poursuivi jusqu'en 2013. Il permettra *in fine* la qualification d'HORUS3D/N et P (P pour photonique) vis-à-vis de la majorité des grandeurs intégrales neutroniques et photoniques du RJH et des effets en réactivité.

Les outils logiciels actuels permettent de traiter un large spectre d'applications qui va au-delà de la physique des réacteurs proprement dite. Si la qualité intrinsèque de ces logiciels de calcul satisfait dans de nombreux cas l'utilisateur final, ce dernier manifeste toujours des attentes fortes, notamment en

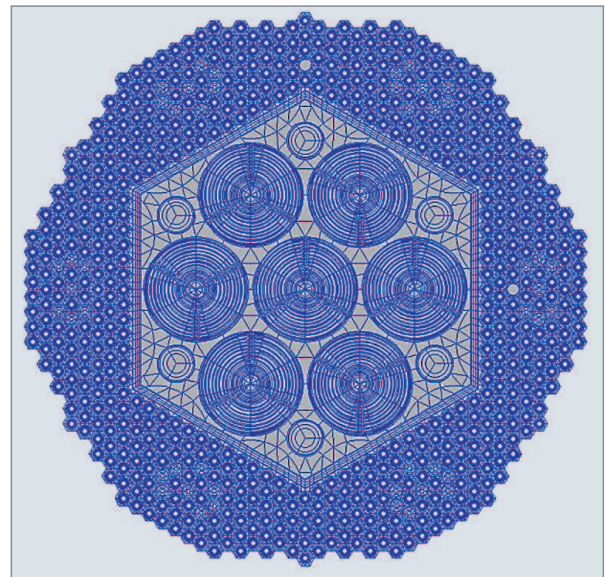


Fig. 79. Modélisation du cœur AMMON en configuration de référence, avec APOLLO2.

ce qui concerne leur souplesse d'emploi, leur automaticité, leur fiabilité, leur aptitude à des couplages, leur capacité à fournir des incertitudes sur les grandeurs calculées.

Le progrès des méthodes de calcul, la puissance croissante des ordinateurs, le perfectionnement des logiciels de modélisation géométrique, le développement de puissants logiciels de traitement de grands volumes de données, laissent augurer une transformation significative de la pratique de l'ingénieur d'études.

Le système de calcul de nouvelle génération en cours de développement APOLLO3® vise à répondre avec une efficacité accrue à ces enjeux.

Anne NICOLAS,

Département de modélisation des systèmes et des structures

Jean-Pascal HUDELLOT et Jean-Marc PALAU

Département d'études des réacteurs

Le calcul haute performance

Introduction

Dans le domaine de la physique des réacteurs nucléaires, le **Calcul Haute Performance** ouvre la voie à des évolutions et des changements dans la manière d'effectuer une simulation numérique et de l'utiliser. Le Calcul Haute Performance – *High Performance Computing* : **HPC**, en anglais – désigne l'ensemble des méthodes de traitement d'applications complexes par des machines puissantes capables de gérer d'importants volumes d'informations numériques.

Les évolutions des codes de calcul (algorithmes, méthodes numériques...) et l'utilisation efficace de puissances de calculs croissantes font continuellement progresser la précision et la finesse des modélisations [1].

Les informations ainsi obtenues par la simulation numérique sont également plus complètes, grâce à la généralisation des **calculs tridimensionnels**, la prise en compte d'une part des **phénomènes multi-physiques*** et d'autre part d'un plus grand nombre de composants des centrales simulés de manière simultanée (traitement en trois dimensions du cœur du réacteur et de la chaudière, avec couplage des phénomènes neutroniques et thermohydrauliques). On atteint ainsi des précisions *a priori* bien meilleures dans des temps du même ordre de grandeur que ceux correspondant à des modèles simplifiés utilisés de manière courante.

Ces progrès constants dans le domaine de la modélisation et de la simulation numérique sont indispensables pour :

- Réduire les incertitudes ;
- optimiser les conceptions des installations et donc les coûts afférents ;
- améliorer la sûreté ;
- optimiser le fonctionnement des installations ;
- améliorer la connaissance de la physique.

En fonction des objectifs que l'on cherche à atteindre à l'aide du HPC, différentes techniques peuvent être utilisées. On peut classer en quatre grandes catégories les objectifs qui mobilisent le HPC :

- **Les calculs multi-paramétrés** : c'est la technique de base pour l'optimisation. Le HPC est un excellent outil pour prendre en compte plus de paramètres et réduire le « *time to market* » de la solution optimisée. Cela permet également l'utilisation de techniques d'apprentissage, comme les

réseaux de neurones*, afin de trouver automatiquement un ensemble optimisé de paramètres ;

- **une physique à très haute résolution** : c'est celle qui s'approche au plus près de la réalité physique en tentant de simuler au mieux l'ensemble des phénomènes physiques aux différentes échelles de temps, d'espace et d'énergie, ce qui nécessite inmanquablement une plus grande capacité mémoire et une puissance de calcul accrue.

- **une physique plus réaliste** en utilisant systématiquement le modèle physique le plus réaliste possible à la place d'un modèle simplifié ou de valeurs pré-établies. Cela implique, non seulement une plus grande puissance de calcul, mais également des systèmes couplés robustes et faciles d'utilisation.

- **la simulation en temps réel** : qui existe déjà, mais on peut imaginer améliorer la modélisation afin d'obtenir des simulateurs plus réalistes et de diminuer le nombre d'hypothèses.

Désormais, le HPC est assimilé à l'utilisation des **superordinateurs***. Même si l'on peut considérer cela comme quelque peu réducteur, il est clair que de la station de travail de l'ingénieur au supercalculateur, le calcul intensif réside en la capacité à utiliser un grand nombre de **cœurs de calcul***, et ce de manière simultanée (ou en parallèle). Sans prétention à l'exhaustivité, les paragraphes qui suivent présentent les grandes lignes de l'utilisation du HPC dans les codes de transport neutronique Monte-Carlo et déterministe, ainsi que ses perspectives de développement, incluant l'évolution des architectures matérielles.

Le HPC pour les simulations en Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo pour résoudre l'équation du transport des neutrons est un excellent candidat, naturel, pour exploiter le parallélisme. Comme le processus de simulation est fondé sur un traitement statique des trajectoires indépendantes des particules, chaque particule peut être simulée par un processeur différent. Les méthodes de Monte-Carlo sont dites « *embarrassingly parallel* ».

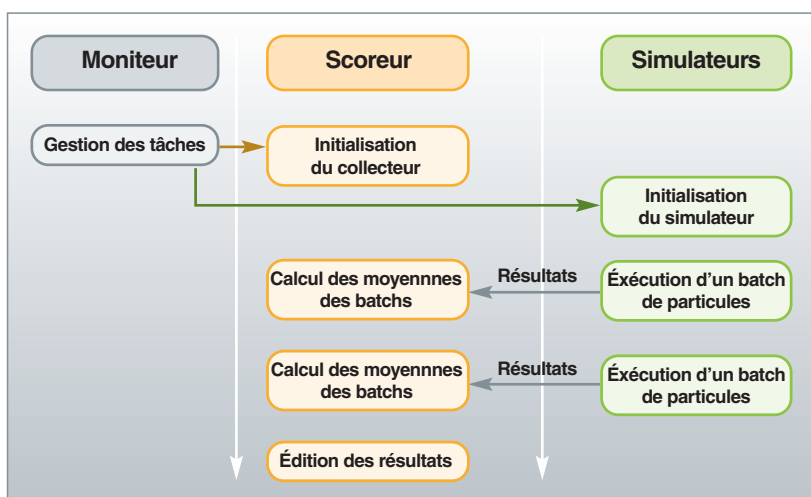


Fig. 80. Principe de mise en œuvre du parallélisme dans une simulation Monte-Carlo de propagation de particules – Cas du code TRIPOLI-4®.

Principes pour une mise en œuvre parallèle

Afin de contrôler le déroulement de la simulation, il faut un processus (moniteur) qui soit en charge de contrôler l'ensemble de la simulation et un autre processus (scoreur) qui soit en charge de recueillir les résultats des simulations. Ces deux processus peuvent être exécutés sur un même processeur ou sur des processeurs différents.

Pour cette partie mise en œuvre, le modèle utilisé est une approche **MPMD** (pour *Multiple Program Multiple Data* : des programmes différents s'exécutent en parallèle utilisant des données différentes) sur la base d'un modèle « maître / esclave » avec l'identification d'un maître en charge du contrôle de la simulation et la séparation des processus de simulation et des processus de récupération [2, 3, 4, 5].

Ce principe, appliqué dans le code TRIPOLI-4® [5, 6, 7, 8] est schématiquement décrit dans la figure 80.

Les principaux avantages de ce modèle sont sa facilité d'implémentation et de portage (échange d'informations entre les processus), son aptitude à la simulation de particules indépendantes, et, enfin, sa tolérance aux pannes. Concernant ce dernier aspect, si l'un des simulateurs devient inopérant, que cela soit dû à un défaut matériel ou à un problème numérique (non convergence), le moniteur permet de relancer les **batches*** de particules correspondants sur un autre simulateur. Grâce à ces caractéristiques, même si plus de la moitié des simulateurs est perdue, la simulation peut encore se poursuivre.

D'autres dispositifs ont également été mis en place, lors de l'exécution de TRIPOLI-4®, comme des procédures de sauvegarde/reprise : l'état courant de la simulation TRIPOLI-4® est stocké dans des fichiers différents qui permettent la reprise de la simulation à tout moment.

Du point de vue mathématique et algorithmique, le principal problème concerne la version parallèle du **générateur de nombres aléatoires*** [9] (voir *supra*, p. 94 et 95) dont on rappelle que celui-ci doit répondre aux propriétés suivantes :

- Indépendance par rapport au nombre de processeurs ;
- pas de corrélation entre les suites pour différents processeurs ;
- sur chaque processeur, le générateur peut être initialisé de façon indépendante (pas de communication entre processus).

Un exemple de ce générateur aléatoire parallèle est celui fondé sur l'algorithme GFSR (*Generalized Feedback Shift Register*) [10]. Les principaux avantages de ce générateur de nombres aléatoires sont sa rapidité d'exécution et sa très longue période (2^{607}) [voir *supra*, p. 94 et 95].

Performances

La façon d'évaluer les performances parallèles de simulations Monte-Carlo est tout à fait différente de la mesure classique d'efficacité : elle est fondée sur un facteur mesurant la qualité de la simulation appelé « *figure of merit* » (FOM) et défini comme suit :

$$FOM = \frac{1}{\sigma^2 \times \tau}$$

où σ^2 est la variance associée à la grandeur calculée et τ la durée de la simulation (voir *supra*, p. 89-106).

On s'attend à une accélération du calcul (et donc à une augmentation de la FOM) linéaire avec le nombre de processeurs, ce qui est généralement vérifié, comme l'illustre la figure 81.

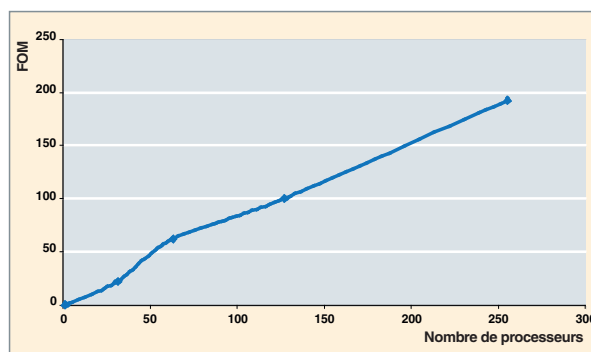


Fig. 81. Comportement typique de la « *Figure of Merit* » d'une simulation Monte-Carlo, à l'aide du code TRIPOLI-4®.

Ce type de comportement est régulièrement vérifié pour des simulations allant jusqu'à 1 000 processeurs où l'efficacité reste de l'ordre de 90 %.

Un des avantages de la mise en œuvre parallèle du code TRI-POLI-4® est que le moniteur permet de contrôler de façon dynamique l'équilibre de la charge de chaque simulateur. Ainsi le nombre et la taille des batchs peuvent être ajustés afin de minimiser l'attente entre processeurs, ce qui maximise l'efficacité globale de la simulation.

Cependant, il existe tout de même des goulots d'étranglement pour obtenir un rendement idéal. Même si la performance peut être ajustée, le collecteur peut constituer un frein à une accélération optimale du calcul pour un très grand nombre de simulateurs (> 1 000). Des solutions sont à étudier, comme la mise en œuvre d'un arbre de collecteurs, afin de partager la charge de la collecte des résultats, ou encore l'accumulation des résultats après la simulation pour éviter leur collecte en ligne. Cependant, il faut porter une attention particulière à la quantité de données à stocker.

Les défis à venir

Toutefois, même si des simulations Monte-Carlo sont naturellement parallèles, comme nous l'avons vu, l'accès à l'échelle du **pétaflop** et au-delà (au-dessus de 10 000 cœurs) reste un défi, comme pour beaucoup d'autres applications. On aura à faire face à une quantité colossale de données, soit sur le réseau, soit sur le système de fichiers, afin de stocker les résultats des simulations.

Si l'on accroît encore la complexité de la géométrie, ainsi que le nombre de grandeurs à calculer (e.g. taux de réaction sur un cœur complet de réacteur, à l'échelle du crayon ou de la pastille), le stockage de toutes ces informations en mémoire pose problème. En effet, dans le modèle de parallélisme utilisé, toutes les données d'entrée (géométrie, compositions, données nucléaires...), ainsi que les données de sortie sont dupliquées sur chaque processeur (fig. 82).

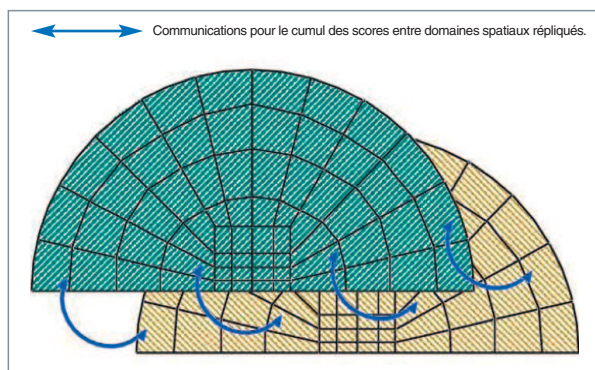


Fig. 82. Réplication de domaines (parallélisme suivant les particules).

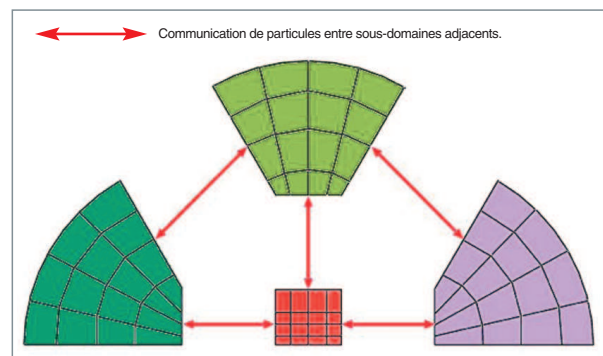


Fig. 83. Décomposition de domaines (parallélisme spatial).

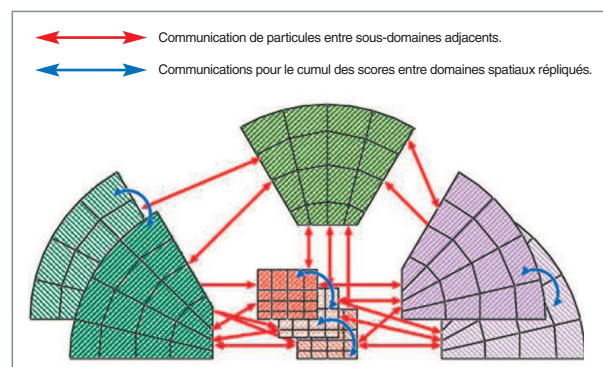


Fig. 84. Décomposition de domaines et réplication de domaines (parallélisme spatial et suivant les particules).

Par conséquent, la limite n'est pas seulement relative au temps de calcul, comme aujourd'hui, mais aussi à la taille mémoire. Une solution serait de mixer le parallélisme de tâches avec un *parallélisme de données*, et de subdiviser le domaine de calcul afin de le répartir entre les différents processeurs (fig. 83).

Mais ce parallélisme est « contre-nature » pour des simulations Monte-Carlo et conduit à des problèmes délicats tels que le déséquilibre de charge ou des pertes d'efficacité, en raison du trafic de communications entre les processeurs.

Dans le code MERCURY, les deux modèles sont mis en œuvre [11], afin de profiter des avantages des deux modèles de parallélisme, spatial et des particules (fig. 84).

Ce type d'approche est également envisagé pour le code MCNP où des paradigmes innovants de transferts de données sont à l'étude pour s'attaquer au problème du mixage du parallélisme de tâches au parallélisme de données pour une simulation Monte-Carlo [12].

Ces approches ne font pas réellement d'hypothèse particulière sur l'architecture des machines. Une autre solution, permettant de résoudre le problème de la duplication des données en mémoire, consiste à tenir compte de l'évolution des architectures où le nombre d'unités de calcul partageant une mémoire

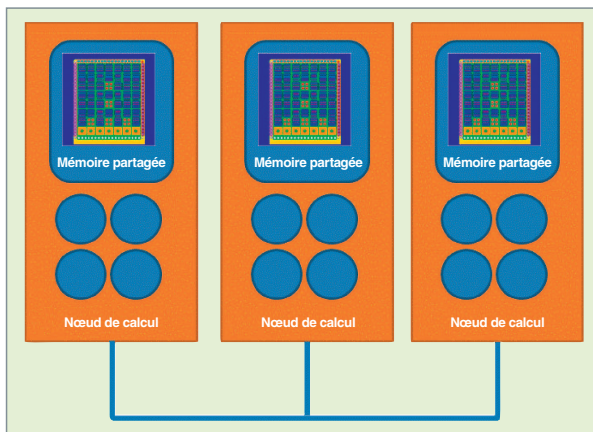


Fig. 85. Principe de partage des données au sein d'un même nœud de calcul et de duplication entre nœuds de calculs.

commune est en constante augmentation. L'idée est ici de n'avoir qu'une seule copie des données au sein d'un nœud de calcul possédant plusieurs unités de calcul qui se partagent ces données, et de ne les dupliquer qu'entre les différents nœuds de calcul. Ce principe est illustré dans la figure 85.

Il existe bien d'autres champs d'exploration du Calcul Haute Performance pour le transport Monte-Carlo, parmi lesquels on peut citer l'utilisation des accélérateurs graphiques tels que GPU ou Intel Xeon Phi.

Le HPC en déterministe

Les différents niveaux de parallélisme

Dans les approches déterministes, nous pouvons considérer trois niveaux principaux de parallélisme :

- Le premier niveau concerne les calculs multi-paramétrés. Il s'agit de réaliser un ensemble de calculs indépendants les uns des autres sur un ensemble de ressources de calcul. Il faut donc, dans ce cas de figure, gérer les flots de calculs et de données (données d'entrées et résultats) sur l'ensemble des ressources de calcul. Un exemple classique est la construction d'une bibliothèque multi-paramétrée pour le calcul d'un cœur de réacteur nucléaire. Les calculs des différents assemblages et conditions de chargement sont tous indépendants les uns des autres et peuvent donc être effectués en même temps ;
- le second niveau correspond aux calculs multi-domaines. Il s'agit ici de gérer en parallèle un ensemble de calculs opérant sur des données qui ne sont pas forcément indépendantes. Par exemple, cela concerne tous les traitements portant sur les sections efficaces, les **calculs d'évolution isotopique***, les contre-réactions thermohydrauliques... Pour ce niveau, en général, on peut considérer que la dépendance spatiale des données est faible, et une approche mas-

sivement parallèle est bien adaptée. Dans les cas où la dépendance spatiale des données est forte, des techniques de décomposition de domaines sont généralement utilisées. C'est typiquement le cas lors des résolutions de l'équation du transport ;

- le troisième niveau concerne principalement la parallélisation à grain fin de solveurs en exploitant le parallélisme intrinsèque des méthodes numériques considérées.

La suite illustre ces différents niveaux, par quelques exemples représentatifs [13].

Premier niveau : calculs multi-paramétrés

Le principal intérêt de ce niveau est d'utiliser la « force brute » du HPC pour résoudre, dans un temps à échelle « humaine », des problèmes nécessitant un nombre important de calculs indépendants.

Un exemple en est fourni par l'utilisation du HPC pour réduire les incertitudes numériques des simulations (par exemple, grâce à des discrétisations plus fines, en espace, en énergie...) ou pour gagner des marges à l'aide de techniques d'optimisation.

Les calculs de propagation d'incertitudes peuvent être placés sur ce premier niveau. Outre les techniques déterministes (voir *supra* p. 61-88), l'approche stochastique moins intrusive et plus générale, fondée sur un échantillonnage des données d'entrée, peut pleinement bénéficier du HPC « force brute ». Ainsi, la propagation des incertitudes dans les problèmes couplés thermohydraulique-neutronique ou dans les calculs d'évolution isotopique, est désormais envisageable.

En ce qui concerne les problèmes d'optimisation, un très bon exemple est l'optimisation de plans de chargement de cœurs à l'aide d'algorithmes génétiques [14]. Un outil fondé sur URANIE/VIZIR et le code APOLLO3® [15] a été conçu et appliqué avec succès à l'optimisation du chargement du combustible modèle, dans le cas de cœurs de REP hétérogènes. Cet outil permet l'évaluation de plus de dix millions de configurations différentes en moins de dix heures en utilisant plus de 4 000 processeurs. Une illustration de différents types de solutions est donnée dans la figure 86, page suivante.

Le principal avantage de ce type de méthode est de permettre aux ingénieurs de tester différentes configurations et de relâcher certaines contraintes de conception, ce qui n'aurait pas été possible sans l'utilisation conjointe des algorithmes génétiques et du HPC. Des exemples de différentes solutions sont donnés dans la figure 87.

Ce type de démarche se généralise au CEA et s'applique désormais en support aux études **ASTRID*** avec un outil appelé « TRIAD ». Il est intéressant de noter qu'un exercice de

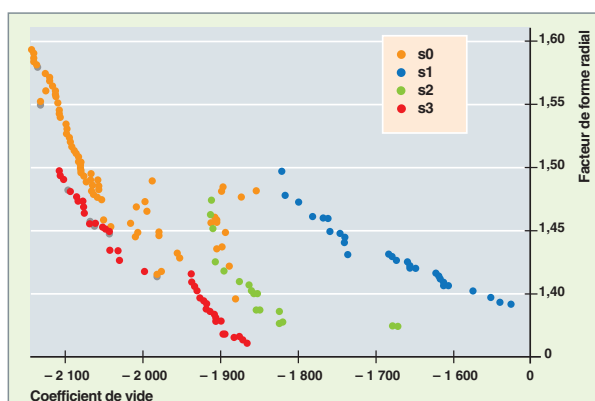


Fig. 86. Fronts de Pareto : ensembles de solutions trouvés par algorithmes génétiques suivant différentes stratégies d'optimisation sur le coefficient de vide et le facteur de forme radial, s0,s1,s2 et s3 étant différentes dispositions des assemblages fertiles dans le cœur.

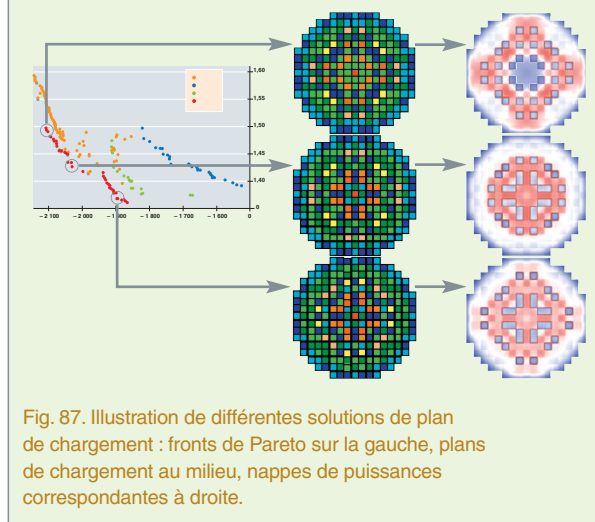


Fig. 87. Illustration de différentes solutions de plan de chargement : fronts de Pareto sur la gauche, plans de chargement au milieu, nappes de puissances correspondantes à droite.

prototypage, à la suite de l'accès à une grande ressource de calcul, a permis de démontrer aux physiciens concepteurs des réacteurs nucléaires les potentialités d'un outil et d'une approche grâce au HPC et comment, deux à trois années plus tard, grâce à l'augmentation de la puissance de calcul accessible, ce qui n'était qu'un exercice devient un outil de concepteur pour l'aide au design d'un réacteur.

Deuxième niveau : calculs multi-domaines

Ce niveau correspond à l'utilisation la plus classique. Dans la plupart des applications scientifiques parallèles, ce niveau est utilisé *via* la technique de **décomposition de domaines***. Dans le cadre de la neutronique, tous les calculs qui sont spatialement indépendants sont concernés. Par exemple, dans un calcul de cœur typique en deux étapes (voir *infra*, p. 193-213), au niveau du calcul de cœur proprement dit, toutes les séquences relatives à la gestion des sections efficaces, les contre-réactions, l'évolution isotopique, etc. sont localement associées à la maille du domaine géométrique et peuvent donc être effectuées en parallèle. Très schématiquement, dans

un calcul standard de cœur de réacteur nucléaire en 3D, toutes les étapes sont spatialement indépendantes et peuvent donc être menées naturellement en parallèle, à l'exception de l'une d'entre elles : le calcul du flux neutronique. Même si toutes les étapes précédentes sont conduites en parallèle, le principal problème demeure la gestion du flot de données et la distribution des données entre les processus. Il est donc nécessaire de bien penser la conception de l'architecture du code afin d'avoir des structures de données optimales permettant de faciliter et d'optimiser la gestion des flots de données en parallèle.

S'agissant du calcul du flux lui-même, des techniques classiques de décomposition de domaines peuvent être utilisées [16]. Concernant le solveur de l'équation du transport [17], des degrés supplémentaires de parallélisme peuvent être trouvés, car les autres dimensions de l'équation peuvent être utilisées, par exemple les dimensions angulaires ou énergétiques. Beaucoup de solveurs ont été mis en œuvre en parallèle, en exploitant le parallélisme soit en angle et en énergie [18, 19, 20], soit en espace [21, 22, 23], soit les trois [24].

La figure 88, ci-dessous, illustre les performances obtenues avec le solveur de transport MINARET du code APOLLO3® par parallélisation suivant les directions angulaires. L'exercice, qui s'est déroulé sur les supercalculateurs TITANE du CCRT* et TERA-100* du CEA/DAM, a permis de valider l'architecture et le comportement numérique du solveur pour une utilisation du parallélisme massif, jusqu'à 33 000 cœurs de calcul, sur une configuration réaliste : calcul de cœur 3D de type **ESFR***.

Un autre degré de parallélisme peut être utilisé lors de l'exploitation des techniques multi-échelles. Par exemple, le couplage d'une solution fine au niveau d'un assemblage de l'équation du transport avec une solution grossière 3D cœur. Des exemples typiques de la mise en œuvre de ces techniques peuvent être trouvés dans le code COBAYA [25] (fig. 89) ou dans le solveur diffusion MINOS, au sein d'une

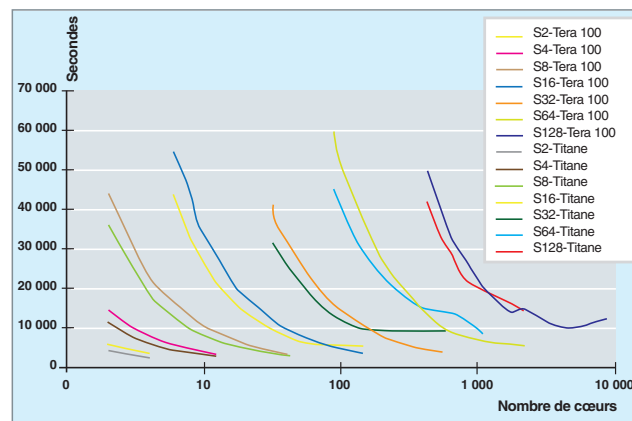


Fig. 88. Temps de calcul d'une simulation 3D avec le solveur transport MINARET du code APOLLO3® sur les supercalculateurs TITANE (CCRT) et TERA-100 (CEA/DAM).

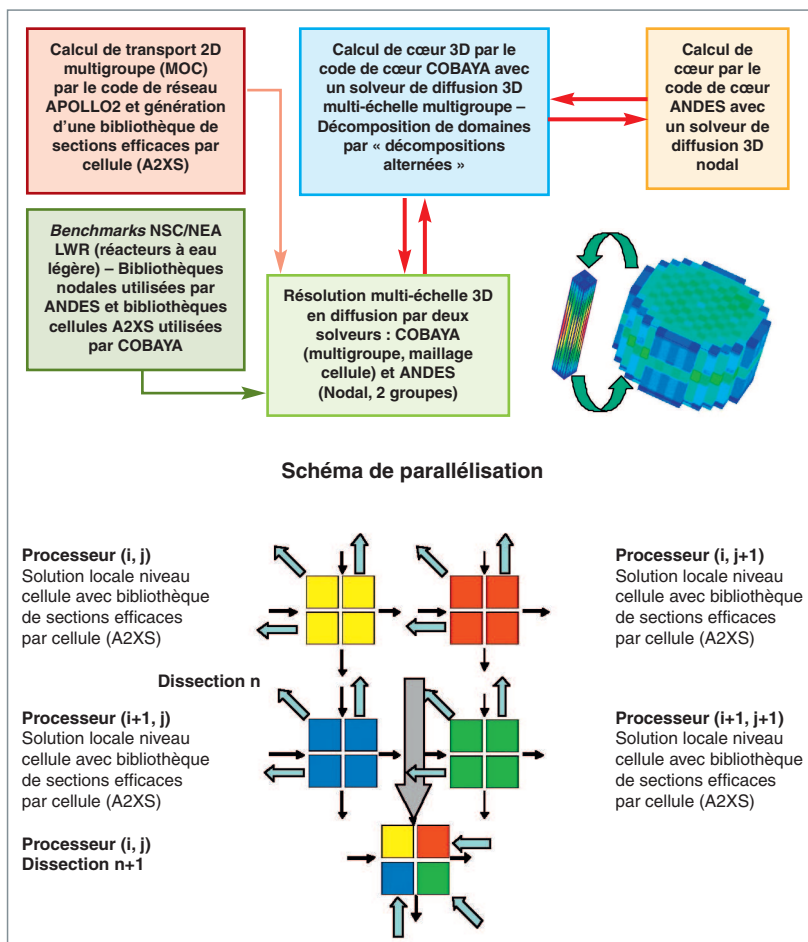


Fig. 89. Principe de parallélisme utilisé dans le code COBAYA (source : d'après le projet européen NURESIM).

approche originale fondée sur une méthode de synthèse modale [26].

Cette approche multi-échelles du parallélisme est également bien adaptée pour les calculs 3D, en particulier lorsque la

méthode est intrinsèquement peu parallèle ou très difficile à paralléliser. Un exemple typique est la méthode des caractéristiques (voir *supra*, p. 82-85) utilisée pour trouver la solution de l'équation du transport des neutrons. En effet, il est possible de paralléliser cette méthode, mais il faut employer des techniques de parallélisme très avancées, en vue d'obtenir une efficacité intéressante [27, 28, 29]. Une alternative est d'adopter une approche 2D avec un couplage dans la troisième direction, et de calculer des plans 2D en parallèle (fig. 90). Cette approche est utilisée, par exemple, dans le code DeCART [30] et dans le code UNIC [31].

Troisième niveau : parallélisme à grains fins

Ce niveau est généralement utilisé sur des architectures à mémoire partagée et exploite le parallélisme intrinsèque des algorithmes. Ces techniques ont eu beaucoup de succès au début des années 2000 avec le langage HPF, puis OpenMP [21, 22, 32]. Il devient de plus en plus intéressant sur les architectures multi-cœurs actuelles de combiner ce niveau *grain fin* avec le niveau précédent, afin d'améliorer les performances globales des algorithmes.

Parallélisme hybride

La course à la puissance a conduit à utiliser désormais dans les supercalculateurs les plus puissants des accélérateurs comme, par exemple, des cartes graphiques (GPU). Ces architectures de nouvelle génération présentent l'avantage d'offrir un rapport performance de calcul / consommation électrique très intéressant. Cependant, elles entraînent une hétérogénéité supplémentaire dans les codes devant les utiliser.

Des premières expérimentations ont été réalisées dans le cadre du projet APOLLO3® autour du solveur de transport simplifié MINOS. Ainsi, il est possible de mixer une approche décomposition de domaines et une accélération sur carte graphique [18].

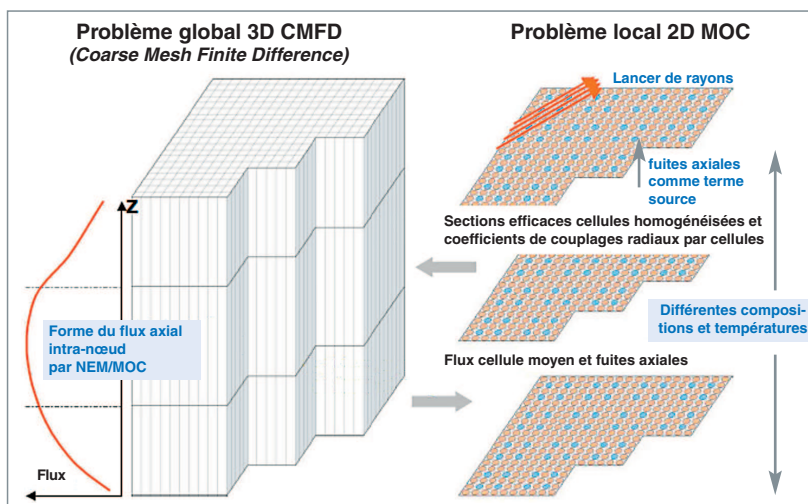


Fig. 90. Méthode MOC 3D à partir de synthèses de calculs 2D MOC plans.

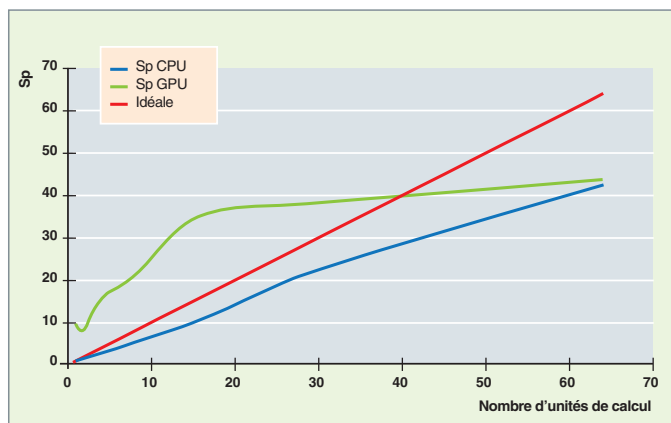


Fig. 91. Accélération (Sp pour *Speedup*) comparées entre CPU (courbe bleue), GPU (courbe verte) et accélération idéale (courbe rouge). En abscisse, le nombre d'unités de calcul.

La figure 91, page suivante, montre les résultats obtenus sur un calcul 3D, en diffusion à deux groupes, cellule par cellule, d'un cœur de REP. Comme on peut le constater, les accélérations jusqu'à 30 unités de calcul sont très intéressantes par rapport à des CPUs classiques.

Évolution des architectures matérielles pour le calcul scientifique haute performance

Ce paragraphe a pour objectif de fournir des éléments d'information sur l'évolution des architectures de machines et les tendances annoncées sur la prochaine dizaine d'années.

La première partie présente les évolutions des machines de calcul sur les vingt dernières années, ainsi que les principales tendances qui s'en dégagent, permettant ainsi de mieux anticiper les prochaines évolutions.

La deuxième partie fait un bref tour d'horizon des architectures actuelles, avec un focus sur les machines françaises. Enfin, dans la dernière partie on aborde la problématique des architectures de machines à un horizon de dix ans, avec notamment la cible de l'**exascale***.

Évolutions sur les vingt dernières années

Un moyen simple et représentatif de tracer l'évolution des architectures de machines de calcul est de se fonder sur le classement du TOP 500 (<http://www.top500.org>) qui, depuis 1993, classe deux fois par an les 500 machines les plus puissantes au monde, sur la base d'un *benchmark* d'algèbre linéaire.

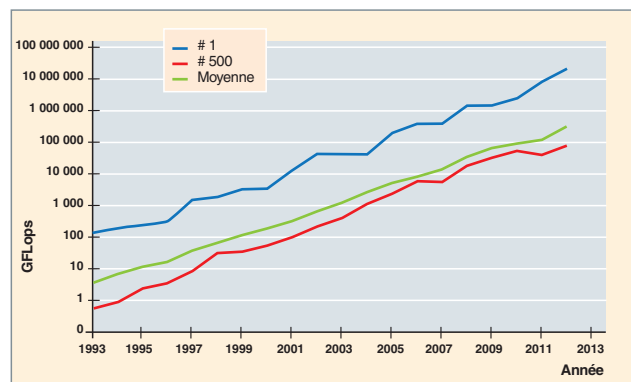


Fig. 92. Évolution de la puissance de calcul dans le TOP 500.

Évolution de la puissance des machines

La figure 92 présente l'évolution de la puissance crête de la première machine du classement, ainsi que de la dernière. Est également indiquée la puissance crête moyenne de l'ensemble des machines du classement.

Comme on peut le constater, la puissance est en constante augmentation. Autre élément intéressant, le délai de passage du premier rang au dernier est de l'ordre de sept à huit ans.

La figure 93, ci-dessous, montre l'évolution du nombre de processeurs ou cœurs de calcul, au fil des ans, pour la machine n°1 du classement, la dernière du classement ainsi que l'évolution du nombre moyen de processeurs pour l'ensemble des machines présentes dans le classement.

Les courbes sont moins lisses que dans la figure précédente, mais les conclusions sont les mêmes. Cela signifie que l'augmentation de la puissance de calcul passe par l'augmentation du nombre d'unités de calcul. Comme sur la figure 93, le nombre de cœurs de la dernière machine du TOP 500 est le nombre de cœurs de la machine n°1, huit ans plus tôt.

Cela signifie que la tendance d'augmentation massive du parallélisme ne vaut pas seulement pour la machine la plus puissante du monde, mais pour toutes les machines.

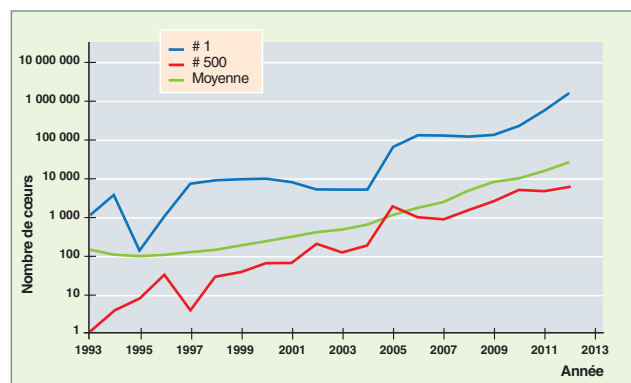


Fig. 93. Évolution du nombre de cœurs dans le TOP 500.

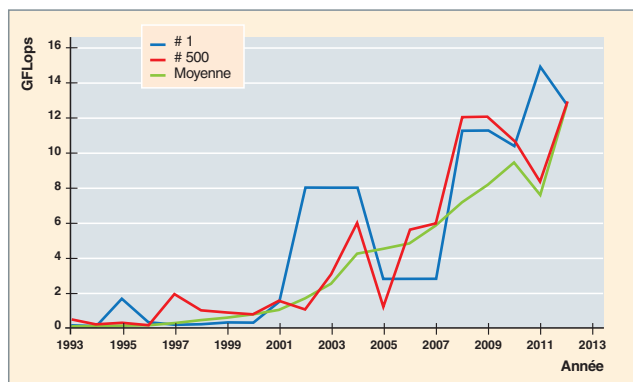


Fig. 94. Évolution de la puissance d'un cœur de calcul.

Cela est confirmé par le graphe suivant (fig. 94) qui représente l'évolution de la puissance d'un cœur de calcul.

Sur cette courbe les écarts entre le numéro 1 et le dernier ne sont pas systématiquement constants, au fil des ans. Le processeur de la machine n°1 n'est pas nécessairement plus puissant que celui de la dernière. On note, en particulier, qu'en 2012 la puissance est identique pour ces deux extrêmes. Cela est essentiellement dû à la standardisation des composants utilisés. Il n'y a plus vraiment de processeur spécialisé pour le HPC.

Autre remarque importante, la puissance unitaire d'un processeur a augmenté d'un facteur 100 entre 1993 et 2012. La *loi de Moore* aurait voulu que ce facteur fût de l'ordre de 8 000... En revanche, la puissance totale des machines a progressé d'un facteur supérieur à 150 000.

Il apparaît donc clairement que l'augmentation de la puissance des machines se fait essentiellement par l'augmentation du degré de parallélisme.

Évolution de la mémoire

La figure 95, ci-dessous, présente l'évolution de la taille mémoire totale des machines, uniquement pour la machine classée n°1 au TOP 500.

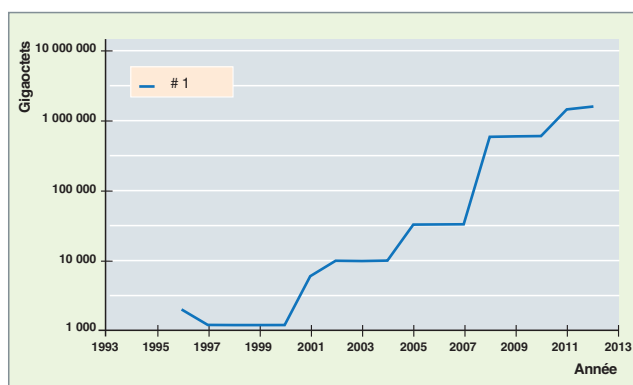


Fig. 95. Évolution de la capacité mémoire du TOP 500.

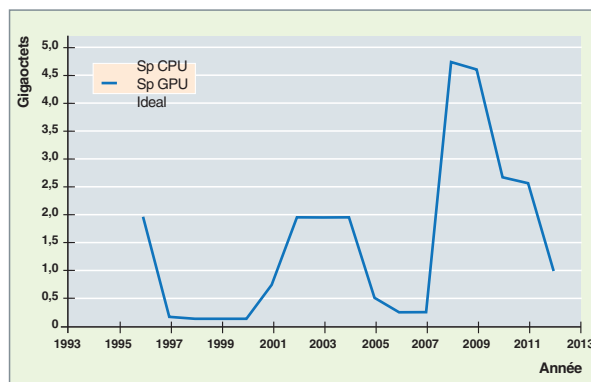


Fig. 96. Évolution de la mémoire par cœur de calcul.

Nous pouvons constater qu'il existe une augmentation régulière et importante de la capacité mémoire totale des machines de calculs.

Mais qu'en est-il de la mémoire par cœur de calcul ? Son évolution est représentée figure 96, ci-dessus.

Un constat manifeste est que, s'il y a eu des variations sensibles au cours des années, depuis 1996, la taille mémoire par cœur n'a pas augmenté, voire a plutôt diminué.

En conclusion, la capacité mémoire globale totale des machines augmente proportionnellement à la puissance (bien que la pente soit plus douce), mais la capacité par cœur de calcul soit reste constante, soit diminue. Cela signifie que cet espace mémoire global est de plus en plus partagé par des unités de calcul (cœurs, processeurs multi-cœurs) au sein d'un nœud de calcul, et de plus en plus distribué entre les nœuds de calcul.

Les architectures et puissances de calculs actuelles

Toutes les machines de calcul sont parallèles. Cela va de la station de travail au supercalculateur classé premier au TOP 500.

Comme mentionné auparavant, les processeurs eux-mêmes sont parallèles, dans le sens où ils sont devenus multi-cœurs. Ils sont eux-mêmes « *multithreads* ». Ces processeurs multi-cœurs sont eux-mêmes agrégés au sein d'un nœud de calcul à mémoire partagée, les nœuds étant reliés entre eux par un réseau de communication. Si l'on examine leur architecture, ces dernières années, elles ont globalement oscillé entre architectures massivement parallèles *homogènes* (on entend par « homogène » que les processeurs sont tous identiques ou, tout du moins, du même type) ou *hétérogènes* à base d'accélérateurs. Les tableaux 21 et 22 suivants présentent les dix premières machines du TOP 500 en juin 2012 et en novembre 2011.

Tableau 21

Dix premières machines du TOP 500 en juin 2012

Sur fond bleu, les machines avec accélérateurs.

Machine	Technologie du processeur	Cadence du processeur MHz	Accélérateur/co-processeur	Cœurs par socket*
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
K computer	Sparc	2 000	None	8
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
iDataPlex	Intel SandyBridge	2 700	None	8
NUDTYH MPP	Intel Nehalem	2 930	NVIDIA 2050	6
Cray XK6	AMD x86_64	2 200	NVIDIA 2090	16
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
BlueGene/Q	PowerPC	1 600	None	16
Bullx B510	Intel SandyBridge	2 700	None	8
Dawning TC3600	Intel Nehalem	2 660	NVIDIA 2050	6

Tableau 22

Dix premières machines du TOP 500 en novembre 2011

Sur fond bleu, les machines avec accélérateurs.

Machine	Technologie du processeur	Cadence du processeur MHz	Accélérateur/co-processeur	Cœurs par socket
K computer	Sparc	2 000	None	8
NUDTYH MPP	Intel Nehalem	2 930	NVIDIA 2050	6
Cray XT5-HE	AMD x86_64	2 600	None	6
Dawning TC3600	Intel Nehalem	2 660	NVIDIA 2050	6
HP ProLiant SL390s	Intel Nehalem	2 930	NVIDIA 2050	6
Cray XE6	AMD x86_64	2 400	None	8
SGI Altix ICE	Intel Core	3 000	None	4
Cray XE6	AMD x86_64	2 100	None	12
Bull bullx super-node S6010/S6030	Intel Nehalem	2 260	None	8
BladeCenter QS22/LS21	Power	3 200	IBM PowerXCell 8i	9

Tableau 23

Liste de différentes machines accessibles en France, avec indication de leur rang mondial, leur nombre de cœurs et leur puissance en TeraFLOPS* (10¹² opérations flottantes par seconde)

Rang	Site	Système	Nombre de cœurs	Puissance TeraFLOPS
9	CEA/TGCC/GENCI	CURIE TN – BULL Bullx	77 184	1 667,2
17	CEA	TERA-100 – BULL Bullx	138 368	1 254,5
29	EDF	Zumbrota – IBM BlueGene/Q	65 536	838,9
30	CNRS/IDRIS/GENCI	IBM BlueGene/Q	65 536	838,9
75	CINES/GENCI	JADE – SGI Altix	23 040	267,9
97	CEA/CCRT	AIRAIN – BULL Bullx	9 440	203,9
104	EDF	Ivanohe – IBM iDataPlex	16 320	191,3
115	CEA	TERA-100 Hybrid – BULL Bullx	7 020	274,6
149	CNRS/IDRIS/GENCI	IBM BlueGene/P	40 960	139,3
162	CEA/TGCC/GENCI	CURIE Hybrid – BULL Bullx	5 040	198,2
168	CEA/CCRT/GENCI	TITANE – BULL Novascale	11 520	130
201	EDF	Frontier2 – IBM BlueGene/P	32 768	111,4
245	CEA/TGCC/GENCI	CURIE TN – BULL Bullx	11 520	104,4

On constate qu'en novembre 2011, 60 % des machines du TOP 10 étaient à base d'accélérateurs, qu'en juin 2012, il n'y en a plus que 40 %. Une nouvelle inversion des proportions peut être pronostiquée... Il faut noter que l'utilisation d'un nombre croissant de processeurs conduit à une puissance thermique dégagée croissante qui doit être évacuée.

L'une des voies pour continuer à augmenter la puissance de calcul, tout en restant dans une enveloppe thermique raisonnable, est ainsi d'utiliser des accélérateurs (à l'heure actuelle, il s'agit de cartes graphiques – GPU), mais les machines **IBM BlueGene** ou encore la **machine K** de **Fujitsu** (qui a une déclinaison commerciale) sont des solutions avec des processeurs homogènes.

Le lecteur intéressé pourra consulter l'article http://www.hpcwire.com/hpcwire/2012-07-05/green500_turns_blue.html?page=2 sur l'analyse du Green 500. Le classement du Green500 (<http://www.green500.org/>) est le pendant du TOP 500, mais ici, le critère de classement est la puissance de calcul rapportée à la puissance électrique. Cet article montre que lors du dernier classement, ce sont les machines BlueGene/Q qui occupent les premières places, contrairement aux dernières années, où les premières machines de ce classement étaient à base d'accélérateurs.

Le tableau 23, ci-contre, synthétise les différentes machines accessibles en France (on ne parle pas ici des modalités d'accès, sachant que les machines listées sont utilisables par le CEA/DEN ou par ses clients).

En ne considérant que les machines du CEA civil, cela représente plus de 110 000 cœurs de calcul et pratiquement 2 pétaflops.

Les architectures et puissances de calcul futures

On peut considérer deux périodes distinctes, et donc deux générations différentes d'architectures : les machines multi-pétascales qui reposeront *grosso modo* sur les technologies actuelles et les machines exascales qui présenteront de grosses ruptures technologiques pour atteindre la puissance de l'exaFLOPS pour une consommation électrique acceptable.

Les machines multi-pétascales

Ces machines existent d'ores et déjà. Dans les prochaines années, on retrouvera donc des évolutions des architectures actuelles avec la ligne MPP homogène (BlueGene/Q, R...) et des architectures hybrides à base de GPU et du nouveau processeur Intel technologie MIC, le Xeon Phi (<http://www.pcinsight.com/news/71737-intel-xeon-phi-mic-knight-corner-coprocessor.htm>).

La prochaine machine du TACC (*Texas Advanced Computing Center*), Stampede, offrira de l'ordre de 20 petaFLOPS au début 2013, avec 5 petaFLOPS avec des processeurs classiques et 15 petaFLOPS en Xeon Phi.

Un avantage non négligeable de ce nouvel accélérateur est que les modèles et langages de programmation utilisables sont les mêmes que pour les CPU classiques. Ce n'est pas le cas des GPUs. Les langages, modèles et environnements de programmation pour le HPC constituent un sujet vaste, non abordé dans le cadre de cette brève revue.

Les machines exascales

Selon certains spécialistes, les machines exascales devraient voir le jour à l'horizon 2018-2020. Ce qui guide principalement leur conception, hormis le fait qu'elles devront atteindre l'exaFLOPS (10^{18} opérations flottantes par seconde), c'est la consommation électrique. En effet, si l'on restait sur le même type de technologie que celle adoptée pour les machines pétascales actuelles, cela nécessiterait l'équivalent de la production électrique d'une centrale nucléaire pour alimenter une telle machine. Il est délicat de prédire quelles seront les architectures des machines exascales. Il convient ici de se retourner vers les spécialistes du domaine, en citant un extrait du rapport **Roadmap 1.1** de l'**International Exascale Software Project** (IESP, http://www.exascale.org/iesp/Main_Page) [voir ci-contre].

En résumé : un parallélisme encore plus important (au-delà de 100 millions de cœurs), une taille mémoire par cœur réduite et obligatoirement des modèles de programmation adaptés.

Il existe encore énormément d'incertitudes sur ces machines, car même si elles voient le jour, elles seront tellement « uniques » qu'il faudra certainement les considérer comme des grands instruments de recherche construits en quelques

Extrait du rapport Roadmap 1.1



«As a result of these and other observations, exascale system architecture characteristics are beginning to emerge, though the details will become clear only as the systems themselves actually develop. Among the critical aspects of future systems, available by the end of the next decade, which we can predict with some confidence are the following:

- Feature size of 22 to 11 nanometers, CMOS in 2018 ;
- Total average of 25 picojoules per floating point operation ;
- Approximately 10 billion-way concurrency for simultaneous operation and latency hiding ;
- 100 million to 1 billion cores ;
- Clock rates of 1 to 2 GHz ;
- Multithreaded, fine-grained concurrency of 10- to 100-way concurrency per core ;
- Hundreds of cores per die (varies dramatically depending on core type and other factors) ;
- Global address space without cache coherence; extensions to PGAS (e.g., AGAS) ;
- 128-petabyte capacity mix of DRAM and nonvolatile memory (most expensive subsystem) Explicitly managed high-speed buffer caches; part of deep memory hierarchy
- Optical communications for distances > 10 centimeters, possibly intersocket ;
- Optical bandwidth of 1 terabit per second ;
- System wide latencies on the order of tens of thousands of cycles ;
- Active power management to eliminate wasted energy by momentarily unused cores ;
- Fault tolerance by means of graceful degradation and dynamically reconfigurable structures Hardware-supported rapid thread context switching ;
- Hardware-supported efficient message-to-thread conversion for message-driven computation ;
- Hardware-supported, lightweight synchronization mechanisms ;
- 3-D packaging of dies for stacks of 4 to 10 dies each including DRAM, cores, and networking.

Because of the nature of the development of the underlying technology most of the predictions above have an error margin of +/-50% or a factor 2 independent of specific roadblocks that may prevent reaching the predicted value».

exemplaires dans le monde, selon **Marc Snir**, directeur de la *Mathematics and Computer Science Division* du *Argonne National Laboratory*, aux États-Unis.

Il est difficile de connaître l'impact de ces évolutions d'architectures sur les machines des classes inférieures, sachant qu'il existe une constante observée ces dernières années : ce qui guide le marché de l'informatique, ce n'est pas le calcul scientifique.

Et donc, même si l'on construit quelques machines exceptionnelles à base de technologies de pointe, rien ne dit que ces technologies seront utilisées dans les machines de production, car le volume de cette production sera insuffisant pour rentabiliser les composants de base.

Cette stratégie partagée par tous les continents est résumée sur la figure 97, ci-dessous, qui est la vision stratégique du gouvernement japonais pour le HPC.

Synthèse

On peut synthétiser les différentes tendances des évolutions des architectures de machines de la manière suivante :

- Depuis plus de dix ans, et encore au moins pour dix ans, l'unique voie pour augmenter la performance des machines passe par l'*augmentation constante du degré de parallélisme, et cela à tous les niveaux* : dans un cœur de calcul avec du *multithreading*, au sein d'un processeur avec plusieurs cœurs de calcul et au sein d'un nœud de calcul avec plusieurs processeurs par nœud. En 2012, ce degré de parallélisme est de l'ordre du million de cœurs pour les premières machines du TOP 500, ou 100 000 pour les machines européennes ;
- La puissance des cœurs de calcul n'augmentera que très faiblement, voire baissera pour diminuer la consommation électrique ;
- La taille mémoire par cœur de calcul restera constante, voire, aura tendance à diminuer ;

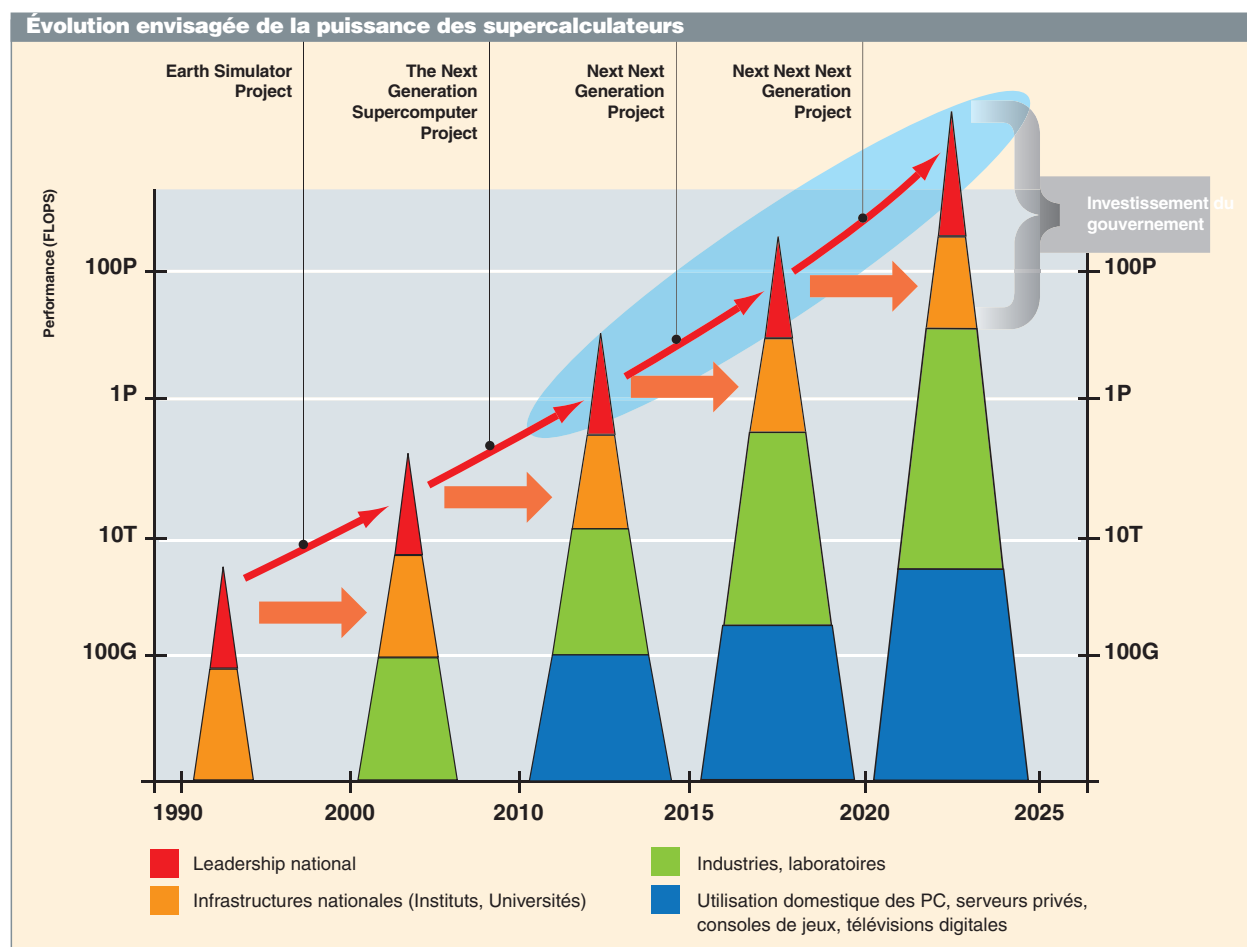


Fig. 97. Vision stratégique du gouvernement japonais pour le HPC.

- Le type de processeur qui sera utilisé n'est pas clairement déterminé, et il existe encore de nombreuses options possibles, processeurs standard Intel ou accélérateurs GPU ou Intel Phi ;
- Les machines exascales devraient voir le jour dans moins d'une dizaine d'années et seront certainement réservées à quelques défis scientifiques. Il y aura donc certainement cohabitation de quelques systèmes exaflopiques et de machines multi-pétaflopiques. Il est cependant difficile de dire s'il y aura une homogénéité des architectures : les choix technologiques pour l'exaflop imposeront-ils les choix pour les machines multi-pétaflops ?
- Quelles que soient les futures architectures, la nécessité de prendre en compte l'augmentation massive du degré de parallélisme apparaît clairement.

► Références

- [1] C. CALVIN and D. NOWAK, "High Performance Computing in Nuclear Engineering", Chapter in *Handbook of Nuclear Engineering*, Springer, 2010.
- [2] F. BROWN, J. GOORLEY and J. SWEETZ, "Mcnp5 Parallel Processing Workshop", *Workshop M&C 2003*, Gatlinburg, Tennessee, USA, April 6-11, 2003. http://mcnp-green.lanl.gov/publication/mcnp_publications.html
- [3] L. DENG and Z-S XIE, "Parallelization of MCNP Monte Carlo Neutron and Photon Transport Code in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface", *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 36, n° 7, pp. 626-629, 1999.
- [4] T. GOORLEY, F. BROWN, and L. J. COX, "MCNP5TM Improvements For Windows PCS", *Nuclear Mathematical and Computational Sciences*, Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, USA, 2003.
- [5] J.C. TRAMA and FX HUGOT, "TRIPOLI-4: Parallelism Capability", *ANS Winter meeting*, Washington, DC, USA, November, 11-15, 2007.
- [6] J.P. BOTH, A. MAZZOLO, Y. PÉNÉLIAU, O. PETIT, B. ROESSLINGER, *Notice d'utilisation du code TRIPOLI-4.3 : code de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo*, rapport CEA-R-6043, 2003.
- [7] J.C. TRAMA, "Overview of TRIPOLI-4.5", *Proceedings of 11th International Conference on Radiation Shielding*, April 13-18, 2008, Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA, 2008.
- [8] F.X. HUGOT, Y.K. LEE and F. MALVAGI, "Recent R&D around the Monte Carlo code Tripoli4 for criticality calculations", *Proceedings of PHYSOR 2008 Conference*, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- [9] P. HELLEKALEK, "Don't trust parallel Monte-Carlo!", *ACM SIGSIM Simulation Digest archive*, vol. 28, Issue 1 (July 1998), 1998.
- [10] T.G. LEWIS and W. H. PAYNE, "Generalized Feedback Shift Register Pseudorandom Number Algorithm", *Journal of the ACM*, vol. 20 (July 1973), Issue 3, pp. 456-468, 1973.
- [11] R. PROCASSINI, M. O'BRIEN and J. TAYLOR, "Load Balancing Of Parallel Monte Carlo Transport Calculations", *M&C 2005*, Avignon, France, Septembre 12-15, 2005.
- [12] P. ROMANO, B. FORGET, F. BROWN, "Towards Scalable Parallelism in Monte Carlo Particle Transport Codes Using Remote Memory Access," *Proc. SNA + MC2010*, Tokyo, Japan, October 17-20, 2010.
- [13] C. CALVIN, "HPC Challenges for Deterministic Neutronics Simulations Using APOLLO3® Code", *Progress in Nuclear Science and Technology Journal*, 2, pp. 7007-705, 2011.
- [14] J.M. DO *et al.*, "Fuel loading pattern for heterogeneous EPR core configuration using a distributed evolutionary algorithm", *Proceedings of M&C 2009*, Saratoga Springs, New York, USA, May, 3-7, 2009.
- [15] H. GOLFIER *et al.*, "APOLLO3: a common project of CEA, AREVA and EDF for the development of a new deterministic multi-purpose code for core physics analysis", *Proceedings of M&C 2009*, Saratoga Springs, New York, USA, May, 3-7, 2009.
- [16] B. F. SMITH, P. BJORSTAD and W. GROPP, *Domain Decomposition – Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, 1996.
- [17] R. ROY and Z. STANKOVSKI, "Parallelization of neutron transport solvers", *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*, LCNS, vol. 1332, pp. 494-501, 1997.
- [18] E. JAMELOT, J. DUBOIS, J-J. LAUTARD, C. CALVIN, A-M. BAUDRON, "High Performance 3d Neutron Transport On Petascale And Hybrid Architectures Within APOLLO3® Code", *M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brésil, May 2011.
- [19] M. ZEYAO and F. LIANXIANG, "Parallel Flux Sweep Algorithm for Neutron Transport on Unstructured Grid", *The Journal of Supercomputing*, vol. 30, issue 1, 2004.
- [20] Z. STANKOVSKI, A. PUIILL, L. DULLIER, "Advanced plutonium assembly parallel calculations using the APOLLO2 code", *M&C 97*, Saratoga Springs, NY, USA, 1997.
- [21] J. RAGUSA, "Application of Multithread Computing and Domain Decomposition to the 3-D Neutronics FEM Code CRONOS", *International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications*, Paris, France, Sept. 2003.
- [22] J. RAGUSA, "Implementation of Multithreaded Computing in the Neutronics FEM Solver Minos", *Proceedings of the ANS Mathematics and Computations International Conference*, Gatlinburg, Tennessee, April 2003.
- [23] P. GUÉRIN, A-M BAUDRON and J-J. LAUTARD, "Domain decomposition methods for core calculations using the MINOS solver", *M&C + SNA 2007*, Monterey, California, April 15-19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2007.
- [24] G. E. SJODEN, *PENTRAN: A parallel 3-D S_N transport code with complete phase space decomposition, adaptive differencing, and iterative solution methods*, Thesis (PhD). The Pennsylvania State University, Source DAI-B 58/05, p. 2652, Nov. 1997.
- [25] J.J. HERRERO, C. AHNERT, J.M. ARAGONÉS, "Spatial Domain Decomposition for LWR Cores at the Pin Scale", *ANS Winter meeting*, Washington, DC, USA, November, 11-15, 2007.
- [26] P. GUÉRIN, A-M BAUDRON and J-J. LAUTARD, "Component mode synthesis methods applied to 3D heterogeneous core calculations, using the mixed dual finite element solver MINOS", *PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.

- [27] M. DAHMANI and R. ROY, "Scalability Modeling For Deterministic Particle Transport Solvers", *International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 20, n° 4, pp. 541-556, 2006.
- [28] G. WU and R. ROY, "Parallelization of Characteristics Solvers for 3D Neutron Transport", *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*, LCNS, pp. 344-351, 2001.
- [29] M. DAHMANI and R. ROY, "Parallel solver based on the three-dimensional characteristics method: Design and performance analysis", *Nuclear Science and Engineering*, 150 (2), pp. 155-169, 2005.
- [30] J. HAN GYU *et al.*, "Methods and performance of a three-dimensional whole-core transport code DeCART", *PHYSOR 2004*, Chicago, Illinois, April 25-29, 2004, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2004.
- [31] G. PALMIOTTI *et al.*, "UNIC: Ultimate Neutronic Investigation Code", *M&C + SNA 2007*, Monterey, California, April 15-19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2007.
- [32] F. COULOMB, "Parallelization of the DSN Multigroup Neutron Transport Equation on the CRAY-T3D using CRAFT", *Proceedings of the Eighth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, PPSC, 1997.

Christophe CALVIN

Département de modélisation des systèmes et des structures



