

COMBUSTIBLE NUCLÉAIRE : LA MODÉLISATION DE L'ASSEMBLAGE PLUTONIUM AVANCÉ

L'intérêt de la modélisation dans le domaine nucléaire est parfaitement illustrée par l'exemple de l'étude d'un nouvel assemblage combustible au plutonium, l'APA, capable d'assurer une consommation maximale de ce dernier dans des réacteurs à eau sous pression. Au-delà de la conception physique de l'assemblage et de son intégration au réacteur, elle permet d'établir un flux de matière complet et aide à modéliser la production du parc électronucléaire dans son ensemble.

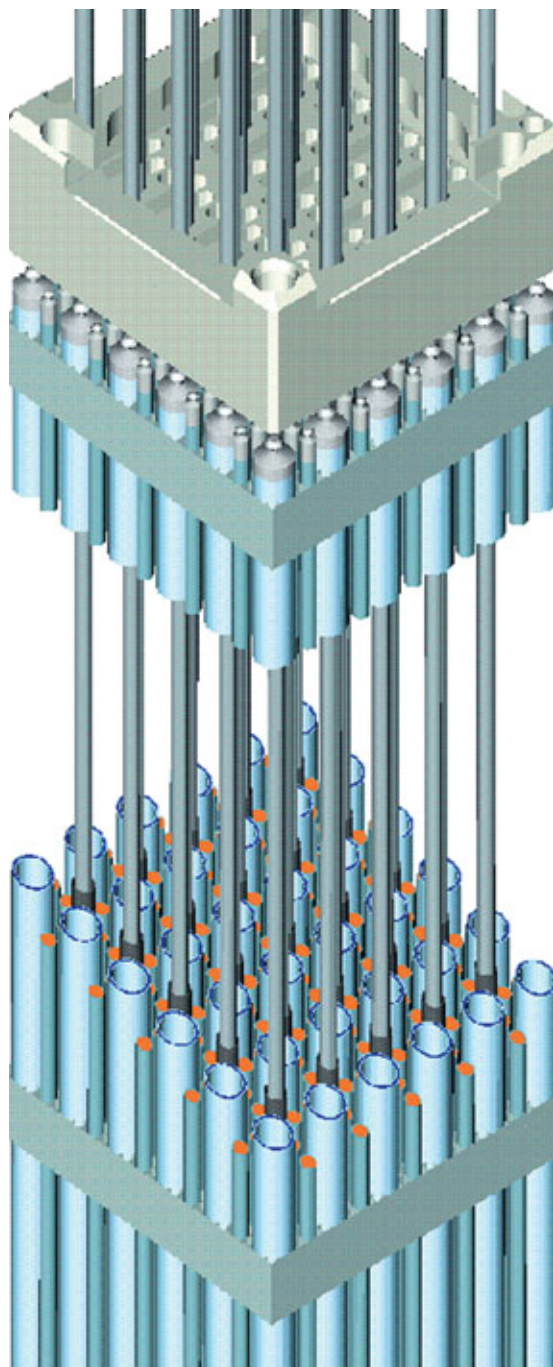


Figure 1. L'assemblage APA, dans sa variante APA-a, comporte des crayons tout plutonium annulaires (section bleue) répartis parmi les crayons à l'oxyde d'uranium standards (section rouge). Dans la variante APA-c, les crayons de plutonium sont cruciformes.

Maîtriser le stock de plutonium et réduire les déchets

Dans le cadre des axes de recherche définis par la loi de 1991 sur les déchets radioactifs, les réflexions sur les scénarios de cycle du **combustible** ont conduit à engager des études sur l'utilisation du parc des réacteurs à eau pour optimiser le recyclage du plutonium⁽¹⁾, dans l'optique d'en maîtriser le stock et de réduire les déchets (encadré 1). Ces études prospectives sont menées en s'appuyant tout d'abord sur une analyse approfondie des propriétés physiques du plutonium et sur l'établissement de contraintes et de paramètres libres qui aident à l'orientation technique.

Sont recherchées des conceptions d'**assemblages** qui soient compatibles avec le dimensionnement des systèmes internes des cuves de manière à ne pas avoir à redévelopper une filière spécifique. Les solutions doivent également prendre en compte des aspects de compétitivité économique.

Il s'agit en fait "tout simplement" de concevoir un nouvel élément combustible (en particulier de définir la matrice support des noyaux fissiles et la géométrie) qui soit le plus compatible possible avec les réacteurs actuels. Une solution envisageable est l'assemblage APA, Assemblage plutonium avancé. Elle consiste à réunir des crayons à l'oxyde d'uranium et des crayons "tout plutonium" dans une structure augmentant la section de passage de l'eau et assurant un ralentissement accru des neutrons (figure 1).

Un ensemble à modéliser très complet

Il s'agit de **modéliser** un ensemble très complet, à commencer par les interactions entre les neutrons et le combustible, dans des

(1) À ce sujet, voir *Clefs CEA* n° 46, p. 45.



compositions très différentes de celles actuellement rencontrées dans les réacteurs en service, puis l'ensemble du réacteur notamment pour s'assurer de la faisabilité (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). Enfin, pour définir un scénario d'utilisation optimum du plutonium, les flux de matières du parc de réacteurs, des unités de production et de retraitement ainsi que l'évolution des déchets produits doivent être modélisés. Cette démarche permet de mesurer les performances réellement atteintes et d'évaluer l'importance des programmes de recherche à mettre en place.

La physique des réacteurs nucléaires est la discipline de base au cœur de cette modélisation. Comprenant la **neutronique** et la **thermohydraulique**, elle permet de mettre en évidence les potentialités et la faisabilité des solutions. Une partie de la connaissance dans ces domaines est pérennisée dans des systèmes de **codes de calcul** dont l'objet est de modéliser les différents phénomènes physiques impliqués (encadré E, *Les progrès de génie logiciel*).

Les principes du recyclage du plutonium ¹

Une utilisation performante du plutonium dans les réacteurs à eau nécessite le *multirecyclage*⁽¹⁾. Après chaque passage en réacteur, le **combustible** est retraité, le plutonium réinjecté dans le processus de fabrication des éléments combustibles puis rechargé en réacteur. Les propriétés neutroniques de l'**assemblage** sont préservées grâce à des crayons combustible classiques enrichis en uranium 235.

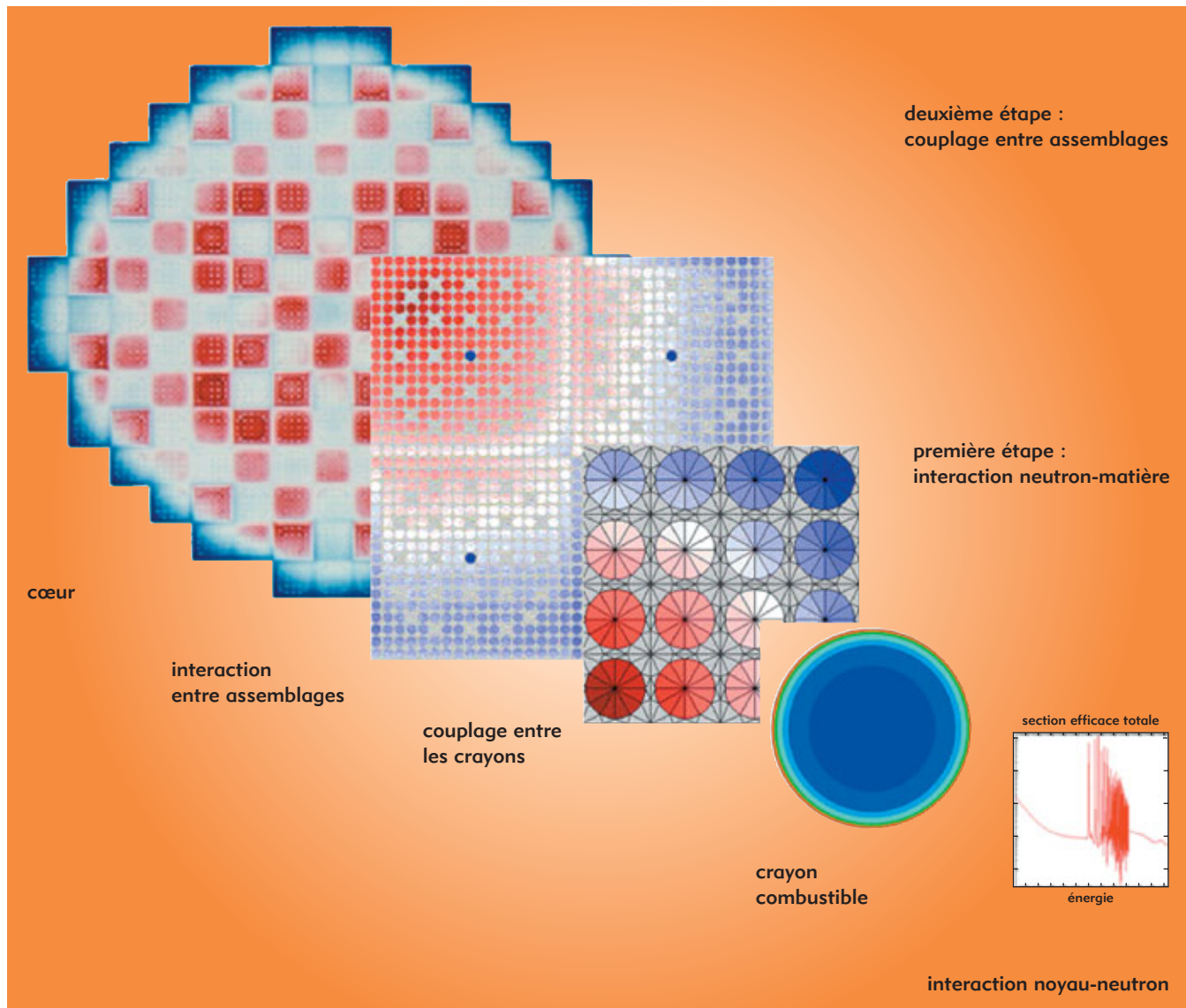
L'inventaire de plutonium total à un instant donné résulte de l'ensemble des contributions des composants du combustible du parc : il est constitué du mélange du plutonium issu de l'utilisation des assemblages à l'oxyde d'uranium (UOX) et de celui du recyclage (figure 1). Le plutonium utilisé pour le multirecyclage dans les réacteurs à eau se met à l'équilibre en compensant la perte de la qualité du vecteur **isotopique** du plutonium par l'augmentation de l'**enrichissement** de l'uranium (par exemple pour l'APA, l'enrichissement en uranium 235 passe de l'ordre de 2 % au premier recyclage à 4 % au quatrième cycle, qui est proche de l'asymptote), ce qui permet de conserver un potentiel énergétique suffisant au rechargement et, simultanément, de garder des paramètres de sûreté satisfaisants.

Données et équations de base

La réalisation de ces codes s'appuie sur des bases de données qui rassemblent les données nucléaires de base, informations



Figure 2. Les différentes échelles de la modélisation d'un assemblage combustible.



Expériences analytiques et expériences globales

D

Pour comprendre et approfondir les connaissances, des expériences portant prioritairement sur l'étude d'un seul phénomène sont d'abord réalisées, souvent à taille réduite. Ces **expériences** dites **analytiques**, *élémentaires* ou *détaillées* permettent d'évaluer individuellement chaque phénomène, ou du moins d'étudier des *effets séparés* en essayant de limiter l'influence d'autres phénomènes. Leurs résultats sont ensuite intégrés sous forme de données utilisées par les modèles physiques dans des **codes (logiciels) de calcul**.

Dans le domaine nucléaire, l'équation de bilan des neutrons dans un réacteur à fission (**équation de Boltzmann**) fournit un exemple de linéarité; ainsi, une expérience menée sur un réacteur critique de basse puissance tel Éole est représentative de configurations rencontrées dans les réacteurs électrogènes pour des paramètres clefs de leur dimensionnement comme la distribution de puissance ou l'efficacité des absorbants. En revanche, la physique de la **fusion thermonucléaire**

est non linéaire : il est donc impossible d'extrapoler compte tenu du fait que des seuils doivent être franchis.

Les expériences prenant en compte l'ensemble des phénomènes élémentaires et donc – ce qui est essentiel – de leurs interactions sont qualifiées d'**expériences globales** ou encore "**système**". Leur objectif est de reproduire, éventuellement à échelle réduite mais avec tous les éléments du système étudié, l'enchaînement des processus physiques (le cas échéant, chimiques et biologiques) essentiels qui caractérisent leur fonctionnement, aussi bien dans des conditions normales que dans des conditions "aux limites", voire hors de ces limites (situations accidentelles, par exemple avec la boucle Bethsy en thermohydraulique et le réacteur Cabri en thermomécanique du combustible). Ces expériences font apparaître les *effets système* et rendent possible l'acquisition de données ainsi que l'établissement de critères et sont nécessaires pour vérifier que les logiciels de calcul intégrant toutes ces connaissances rendent bien compte de la réalité.

relatives à chaque interaction entre les neutrons et les noyaux. Cette masse considérable de connaissances résulte de mesures menées sur des installations expérimentales dédiées (encadré D, **Expériences analytiques et expériences globales**). Ce travail, conduit depuis très longtemps dans le cadre de coopérations internationales, est toujours d'actualité, notamment pour répondre aux besoins soulevés par les études relatives à l'aval du cycle du combustible⁽²⁾.

Autre outil de base, les équations de bilan des neutrons. La modélisation des processus intervenant dans les réacteurs nucléaires

s'appuie sur l'**équation de Boltzmann**, qui décrit très fidèlement le bilan neutronique, et sur l'équation de Bateman qui décrit l'évolution isotopique des milieux radioactifs sous le flux des neutrons. Plusieurs centaines d'isotopes concernés sont représentés dans les calculs : les chaînes des noyaux lourds et celles des produits de fission du combustible, sans oublier le caloporteur, les matériaux de structure et de contrôle.

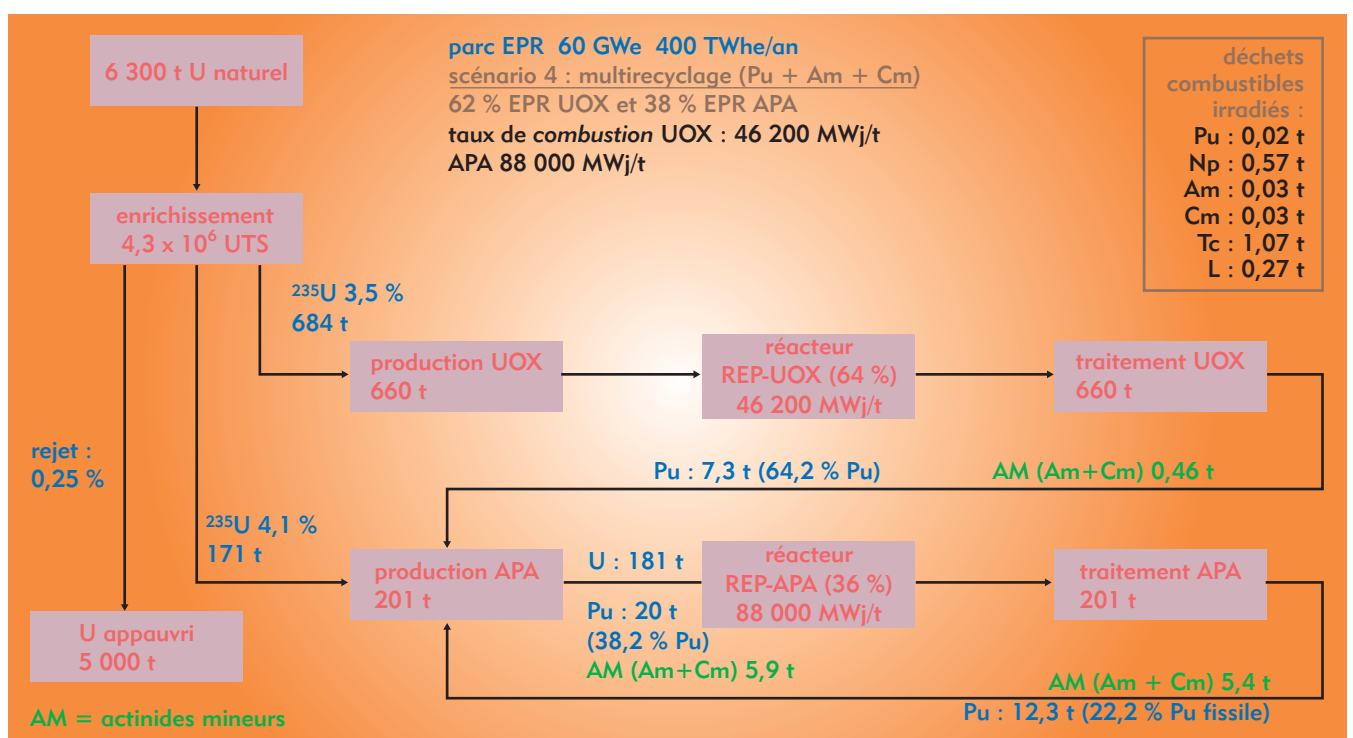
Un schéma en plusieurs étapes

Aujourd'hui, les ordinateurs n'ont pas la puissance suffisante pour calculer directement les caractéristiques des réacteurs.



Figure 3. Schéma des informations résultant de l'ensemble des simulations mises en œuvre dans la modélisation d'assemblages combustible APA. Il illustre la finalité : établir un flux de matières complet et modéliser le parc dans son ensemble (les valeurs indiquées correspondent à des flux annuels).

(2) À ce sujet, voir *Clefs CEA* n° 45, p. 22.





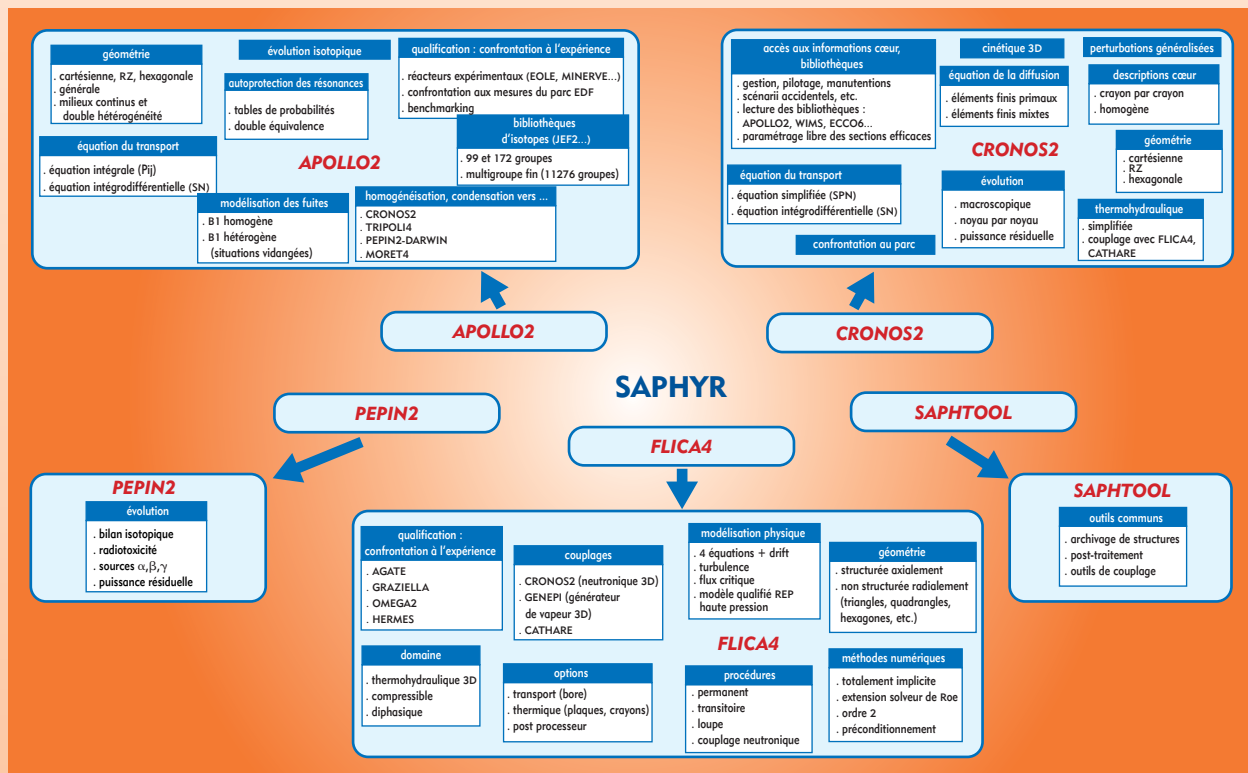
Le système de codes Saphyr

2

Le système de **codes** Saphyr (Système Avancé pour la PHY-sique des Réacteurs) constitue la base des outils mis en place à EDF et à Framatome-ANP (figure). Résultat de plusieurs dizaines d'années d'effort pour l'élaboration de **logiciels de calcul** (Apollo, Cronos, Pépin et Flica) représentant plusieurs centaines de milliers de lignes de programmation, il a atteint sa maturité (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). De par sa structure modulaire, ses méthodes numériques de pointe, ses **modélisations** physiques rigoureuses et grâce à l'outil de couplage Isas, Saphyr est un atout permettant

au CEA de mener des études très innovantes comme celles conduisant à la définition de l'**assemblage** APA et de ses programmes de recherche associés.

Dès maintenant, une nouvelle génération d'outils est en cours de codéveloppement avec les partenaires industriels français dans le cadre du projet Descartes⁽⁵⁾. Elle permettra dès 2005 d'améliorer l'utilisation des connaissances acquises en physique de réacteur, de concevoir avec plus de précision les réacteurs du futur et de réduire les coûts de mise au point de nouveaux concepts.



(5) Descartes est le nom du programme pour la neutronique. Pour la thermohydraulique, il s'agit de Neptune et pour le combustible, de Pléiades.

La résolution des équations de bilan dans les codes de neutronique fait appel à des simplifications qui reposent sur des hypothèses de découplage. Dans différentes configurations de fonctionnement, l'équation de Boltzman est très finement résolue sur un motif de taille réduite représentatif de l'interaction neutron-combustible⁽³⁾. structures. Un premier niveau de modélisation est ainsi constitué d'un réseau infini d'assemblages, niveau auquel sont tout d'abord évalués les potentiels de la solution recherchée (figure 2). L'évolution du combustible est traitée finement en prenant en compte toutes les réactions nucléaires dans une représentation géométrique très détaillée. Le code de neutronique de cœur Apollo est mis en œuvre pour cette phase. La solution obtenue permet, par un processus de réduction de données (homogé-

nisation et condensation en énergie), de fournir les caractéristiques moyennes des assemblages pour obtenir une représentation du comportement de tout le réacteur. Les caractéristiques du réacteur dépendant des conditions de fonctionnement, il est nécessaire d'introduire au niveau du calcul de cœur un processus itératif entre la neutronique et la thermohydraulique⁽⁴⁾. De cette manière, des **algorithmes** adaptés permettent de simuler le comportement du réacteur dans les configurations accidentelles. Les études de cœurs nécessitent le couplage de la neutronique et de la thermohydraulique, elles sont réalisées avec les codes Cronos et Flica.

(3) À ce sujet, voir *Clefs CEA* n° 45, p. 9.

(4) À ce sujet, voir *Clefs CEA* n° 45, p. 31.

Les solutions jugées au niveau du parc

Dans le cas de l'étude de la conception de l'assemblage APA, le jugement sur une solution ne peut en réalité être porté qu'après avoir modélisé l'ensemble du parc des réacteurs. Cette étape permet de caractériser la qualité isotopique du plutonium, la fraction de parc qui doit être dédiée au multirecyclage⁽¹⁾, et de chiffrer le gain en matière de réduction des déchets. Les codes Pépin et Così sont ici appliqués. Les résultats de l'analyse menée montrent ainsi que l'apport d'eau au voisinage du crayon plutonium améliore la consommation et qu'un combustible sur support inerte est un facteur déterminant pour la recherche de la performance et la souplesse d'exploitation d'un parc (figure 3). La puissance à évacuer nécessitant de concevoir un crayon avec une grande

Les progrès du “génie logiciel”

E

Dans les débuts du calcul scientifique (années 1950-1970), le physicien “faisait tout” : **modélisation** physique et mathématique, **analyse numérique**, programmation, utilisation de l’outil développé, analyse des résultats (encadré A, *Qu’est-ce qu’une simulation numérique ?*).

Puis la complexité des problèmes abordés, la nécessité de maîtriser la précision des résultats et la stabilité des **méthodes numériques**, la recherche de l’optimisation du temps de calcul (jusqu’au *temps réel* aujourd’hui), ont conduit les “numériciens” à venir épauler les physiciens dans la conception des **codes de calcul**. Cette évolution a naturellement soulevé quelques difficultés passagères : l’activité devenait multidisciplinaire et les physiciens perdaient une partie de leur autonomie au profit de la synergie entre deux métiers pointus.

Les problèmes traités se sont ensuite encore enrichis : on calcule aujourd’hui des cœurs de réacteurs nucléaires en décrivant chacun des 40 000 crayons **combustibles** de composition différente et, simultanément, l’écoulement eau-vapeur **turbulent** qui les entoure ! (Encadré F, *Modélisation et simulation des écoulements turbulents*.) Et il a fallu aborder des questions d’ergonomie, de souplesse d’utilisation, d’enchaînements, de couplages et d’adaptation à des ordinateurs aux architectures en évolution accélérée (encadré B, *Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances*). À son tour, l’intégration de ce troisième métier, le génie logiciel, au profit de calculs plus précis ou plus pertinents, a amené sa part de difficultés d’organisation.

Naturellement, ces trois métiers (physique, analyse numérique et génie logiciel) sont étroitement imbriqués et “l’art” de chacun a des impacts directs sur les autres. Il est devenu indispensable de former des ingénieurs et des chercheurs qui

maîtrisent au moins deux de ces métiers tout en ayant une connaissance non élémentaire du troisième.

Dans le cadre du codéveloppement CEA-EDF des nouvelles plates-formes de calcul et de modélisation pour l’électronucléaire (**neutronique**, **thermohydraulique**, combustible), l’architecture logicielle est tout aussi importante que les modèles physiques, les méthodes numériques ou la qualification. Cette question a été instruite projet par projet et globalement entre les projets durant deux ans pour finalement aboutir à une architecture commune à cinq niveaux qui permettra de prendre en compte les besoins d’ergonomie de l’utilisateur, tout en permettant aux physiciens et aux numériciens d’exprimer leur art de manière optimale.

Ces cinq couches logicielles établissent les transitions entre les “objets du monde réel” (un assemblage combustible, une tuyauterie vapeur, etc.) et les objets de calcul (**maillages**, matrices, solveurs, champs, etc.).

Le chemin parcouru est immense depuis les premiers calculs des années 50, effectués à la règle à calcul et basés majoritairement sur des règles de trois, et les codes de calculs d’aujourd’hui résolvant des systèmes non linéaires d’équations aux dérivées partielles sur des **supercalculateurs**. L’art du physicien et de l’ingénieur reste cependant intact : c’est la validation expérimentale, “intuitive” ou déductive, des modélisations mathématiques et physiques imaginées et intégrées dans ces codes de calcul. Le vrai physicien conserve la capacité de prévoir et de vérifier les ordres de grandeur des résultats fournis par ces codes... avec des règles de trois !

Thierry N’kaoua

Direction de l’énergie nucléaire
CEA centre de Saclay

surface d’échange, le crayon annulaire est une solution très prometteuse (figure 1). La mise au point de cette conception est l’objet d’un programme de recherche qui fera appel à de la modélisation numérique et également à de l’expérimentation, notamment dans le domaine du combustible et de la thermohydraulique.

Ainsi, pour la mise au point d’un concept d’assemblage qui permet de maîtriser le stock de plutonium en impliquant un minimum de réacteurs à eau et, simultanément, d’obtenir une réduction significative des déchets, il est nécessaire de mettre en œuvre un ensemble de logiciels complexes très performants et

fiables (encadré 2) dont l’élaboration nécessite des efforts de développement et de qualification très importants. ●

Richard Lenain

Direction de l’énergie nucléaire
CEA centre de Saclay

L’apport des maquettes critiques dans la simulation des réacteurs nucléaires

L’exemple de Zoé, premier réacteur français, est là pour montrer que, dès le début de l’histoire des réacteurs nucléaires, il n’y eut pas de développement de concepts et de techniques nucléaires sans **maquettes critiques**, réacteurs de puissance quasi nulle capables d’entretenir une réaction en chaîne et représentant les réseaux combustibles des filières et réacteurs à explorer. Certes la **neutronique** s’appuie sur des équations parfaitement représentatives des phénomènes. Mais l’amplitude des domaines d’énergie en jeu, la multiplicité des matériaux et de leurs caractéristiques, la complexité de la géométrie des **assemblages**

font que, dès qu’il s’agit de qualifier avec précision l’ensemble des données physiques et des **modèles** de calcul, l’expérimentation sur de telles maquettes a, jusqu’à présent, toujours été nécessaire. Elle le restera à l’avenir dans le contexte du développement de la **simulation numérique** (encadré A, *Qu’est-ce qu’une simulation numérique ?*).

Le CEA participe à l’étude de la physique des réacteurs par la conception et la réalisation d’**expériences intégrales** pour la qualification des formulaires⁽¹⁾ de calcul neutronique, de protection (atténuation gamma et neutron dans les matériaux) et de données

nucléaires de base sur trois maquettes critiques à Cadarache (Bouches-du-Rhône) : Éole (spectres⁽²⁾ **REP** et **REB**), Minerve (tous types de spectres) et Masurca (spectres “**rapides**” et de système piloté par accélérateur – en anglais ADS, pour Accelerator-Driven System). Ces maquettes critiques sont

(1) Formulaire : outil composé de bibliothèques de données nucléaires, de **logiciels de calcul** et de procédures de calcul validés et qualifiés.
(2) Spectre : distribution en énergie de la population de neutrons présents dans le cœur de réacteur.



Mise en place dans le cœur de la maquette critique Éole d'aiguilles de combustible d'oxyde d'uranium.



A. Gonin/CEA

des réacteurs mettant en jeu de très faibles puissances. Leurs comportements neutroniques sont directement extrapolables aux phénomènes physiques rencontrés dans les réacteurs de puissance, à un *facteur de représentativité* près. Tout en étant sûres, ces maquettes sont très souples, adaptables, faciles d'accès et aisées à instrumenter.

La conception des expériences intégrales consiste en l'utilisation d'enchaînements de modèles de *calculs de sensibilité* et de *calculs d'incertitudes* et permet de vérifier *a priori* l'adéquation de l'expérience au besoin en qualification exprimé.

La réalisation de programmes expérimentaux en neutronique est basée sur la détermination et la mesure des paramètres ou phénomènes d'intérêt pour la qualification des outils de calculs et des "bibliothèques" de données nucléaires. Deux types principaux d'expériences intégrales peuvent être distingués (encadré D : *Expériences analytiques et expériences globales*). Celles de type *fondamental* visent à qualifier les données nucléaires de base par la mesure de paramètres eux-mêmes fondamentaux. Celles de type *maquette* visent à qualifier les méthodes de calcul à travers des paramètres de projet.

La détermination de ces paramètres s'appuie sur l'utilisation de nombreuses techniques expérimentales, qui peuvent être classées en trois familles principales selon que les mesures servent à déterminer :

- la **réactivité** "absolue" (échelle de réactivité) ou la réactivité "relative" (différence entre deux niveaux de réactivité) ;
- les distributions de taux de réaction⁽³⁾ et de flux⁽⁴⁾ dans le cœur (*in core*) ou de façon post-irradiatoire ;
- les doses **gamma** ou **neutrons**.

Les valeurs des paramètres expérimentaux doivent s'accompagner de valeurs d'incertitude maîtrisées. Aussi, pour un paramètre donné, l'emploi simultané de plusieurs techniques de mesure permet une diminution du terme systématique de l'incertitude. La réalisation de plusieurs séries de mesure avec une même technique expérimentale permet d'atteindre ce but.

Cela conduit naturellement, dans le cadre du développement de la simulation et avec pour objectif l'amélioration des prédictions des schémas de calcul par celle des modèles mathématiques et des données de bases

(3) Taux de réaction : nombre de **noyaux fissiles** créés sur nombre de noyaux fissiles détruits.

(4) Taux de flux : nombre de réactions entre les neutrons et la matière, par unité de volume et de temps.

(5) Section efficace : mesure de la probabilité d'interaction d'une particule avec un noyau-cible. Dans le cas du neutron, elle définit sa probabilité d'interaction avec les noyaux de la matière des différents constituants du cœur.

(6) Capture : absorption neutronique ne conduisant pas à une fission.

utilisés dans les formulaires neutroniques, à réaliser soit des développements de nouvelles méthodes de mesure et des chaînes d'acquisition associées, soit des améliorations des techniques expérimentales existantes.

La détermination de l'incertitude expérimentale est donc associée à la mise en œuvre, au maintien et à l'évolution de ces techniques, ainsi qu'au développement de nouvelles techniques de mesure. Peuvent être cités à titre d'exemple le développement récent d'une chaîne de mesure de la section efficace⁽⁵⁾ de capture⁽⁶⁾ de l'uranium 238 directement sur barreau combustible et celui d'une chaîne de mesure de réactivité en dynamique à l'aide d'un générateur de neutrons pulsés.

L'amélioration de ces méthodes fait aussi appel à une expertise poussée de l'instrumentation. Pour mesurer au plus près et avec plus de précision les paramètres locaux des cœurs, il a fallu mettre au point des détecteurs de flux neutronique de type chambres à fission de très petites dimensions (1,5 mm, 4 mm et 8 mm) associées à une électronique d'acquisition et à un traitement du signal permettant une analyse satisfaisante des mesures.

Philippe Fougeras et Daniel Rippert

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Cadarache

Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?

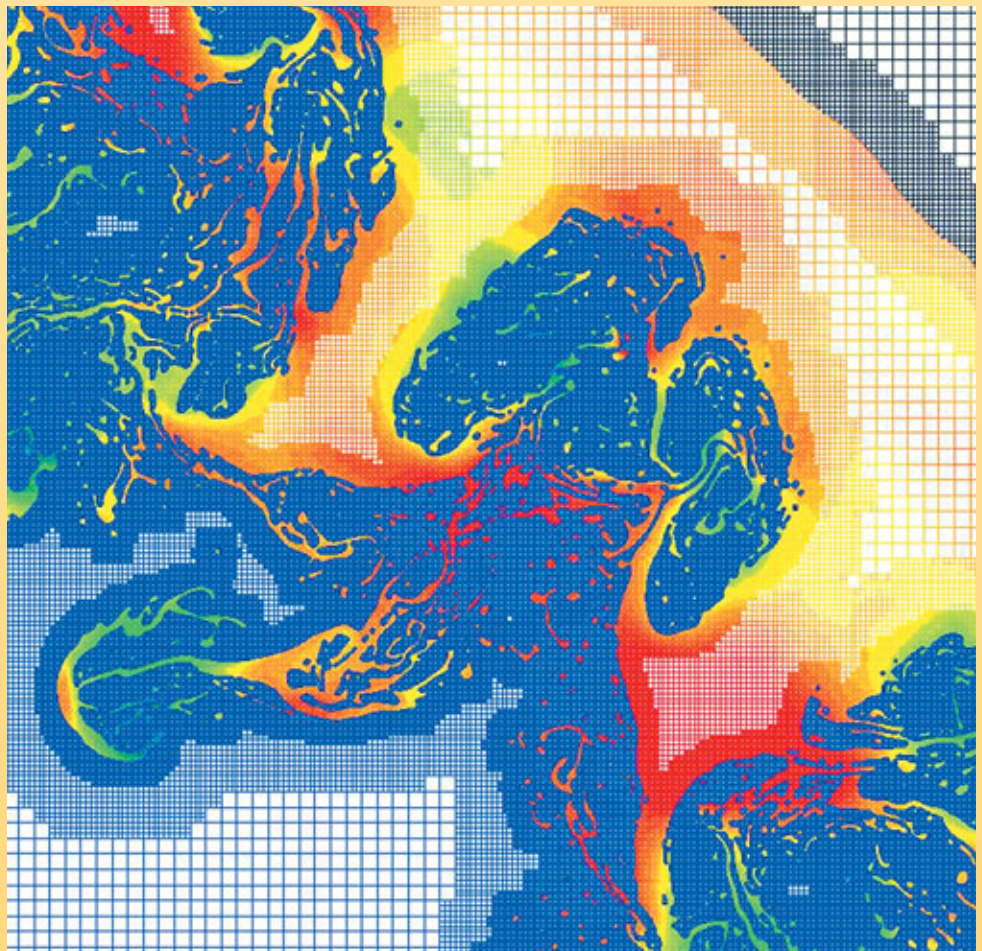
La **simulation numérique** consiste à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système, préalablement décrit par un ensemble de **modèles**. Elle s'appuie sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques. Les principales étapes de la réalisation d'une étude par simulation numérique sont communes à de nombreux secteurs de la recherche et de l'industrie, en particulier le nucléaire, l'aérospatial ou l'automobile.

En chaque point de l'"objet" considéré, plusieurs grandeurs physiques (vitesse, température...) décrivent l'état et l'évolution du système étudié. Celles-ci ne sont pas indépendantes, mais reliées et régies par des **équations**, généralement **aux dérivées partielles**. Ces équations constituent la traduction mathématique des lois de la physique qui modélisent le comportement de l'objet. Simuler l'état de ce dernier, c'est déterminer – idéalement en tout point – les valeurs numériques de ses **paramètres**. Comme il y a un nombre infini de points, donc une infinité de valeurs à calculer, cet objectif est inaccessible (sauf dans des cas bien particuliers où l'on peut résoudre les équations de départ à l'aide de formules analytiques). Une approximation naturelle consiste donc à ne considérer qu'un nombre fini de points. Les valeurs des paramètres à calculer sont ainsi en nombre fini et les opérations nécessaires deviennent abordables grâce à l'ordinateur. Le nombre effectif de points traités dépendra bien sûr de la puissance de celui-ci : plus il sera élevé, meilleure sera finalement la description de l'objet. À la base du calcul des paramètres comme à la base de la simulation numérique, il y a donc la réduction de l'infini au fini, la **discrétisation**.

Comment opère-t-on précisément à partir des équations mathématiques du modèle ? Deux méthodes sont très souvent utilisées, respectivement représentatives des méthodes de **calcul déterministe**, qui résolvent les équations régissant les phénomènes étudiés après avoir discrétisé les variables, et des méthodes de **calcul statistique** ou **probabiliste**.

Le principe de la première, connue sous le nom de **méthode des volumes finis**, est antérieur à l'usage des ordinateurs. Chacun des points de l'objet est assimilé simplement à un petit volume élémentaire (un cube par exemple), d'où le nom de *volume fini*. Un plasma, par exemple, est ainsi vu comme un ensemble ou un réseau de volumes contigus qui, par analogie avec la trame d'un tissu, sera dénommé **maillage**. Les paramètres de l'état de l'objet sont maintenant définis dans chaque maille du maillage. Pour chacune d'elles, en reformulant les équations mathématiques du modèle par des moyennes volumiques, il sera alors possible de construire des *relations algébriques* entre les paramètres de la maille et ceux de ses voisines. Au total, il y aura autant de relations que de paramètres inconnus et ce sera à l'ordinateur de résoudre le *système* de relations obtenu. Il faudra pour cela recourir aux techniques de l'**analyse numérique** et programmer des **algorithmes** spécifiques.

L'accroissement de la puissance des ordinateurs a permis d'augmenter la finesse de discrétisation, permettant de passer de quelques dizaines de mailles dans les années soixante à plusieurs dizaines de milliers dans les années quatre-vingt, à des millions dans les années quatre-vingt-dix et jusqu'à la dizaine de milliards de mailles aujourd'hui (machine Tera de la Direction



Exemple d'image d'une simulation 2D d'instabilités réalisée avec le supercalculateur Tera du CEA. Le calcul a fait appel au maillage adaptatif, qui se fait plus fin dans les zones où les phénomènes sont les plus complexes.

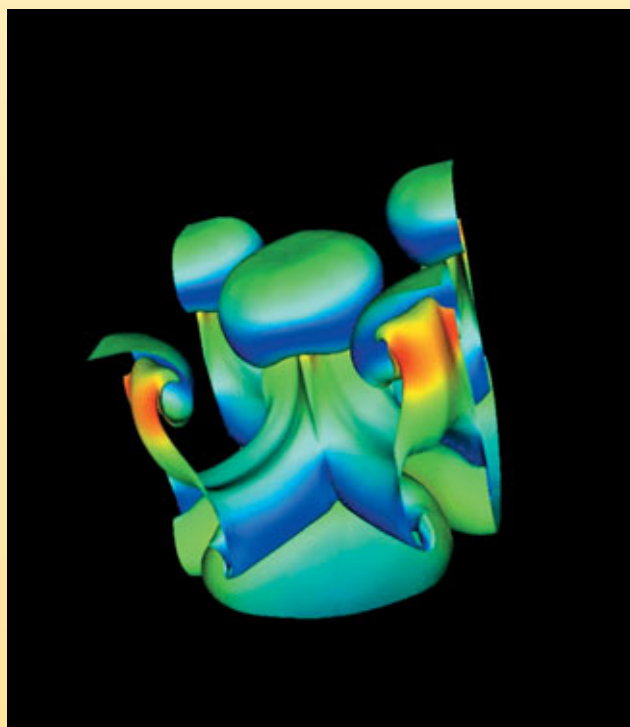
des applications militaires du CEA), chiffre qui devrait décupler à la fin de la décennie.

Un raffinement du maillage, le **remailage adaptatif**, consiste à ajuster la taille des mailles en fonction des circonstances, par exemple en les rendant plus petites et plus serrées aux interfaces entre deux milieux, là où les phénomènes physiques sont les plus complexes, ou là où les variations sont les plus importantes.

La méthode des volumes finis s'applique dans des contextes physiques et mathématiques très variés. Elle autorise toute forme de maille (cube, hexaèdre, tétraèdre...) et le maillage peut être modifié durant le calcul, en fonction de critères géométriques ou physiques. Enfin, elle est aisée à mettre en œuvre dans le contexte des **ordinateurs parallèles** (encadré B, **Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances**), le maillage pouvant en effet faire l'objet d'un découpage pour des calculs sur ce type de machines (exemple figure B, p. 13).

Appartiennent à la même famille la **méthode des différences finies**, cas particulier de la **méthode des volumes finis** où les côtés des mailles sont orthogonaux, et la **méthode aux éléments finis**, qui peut juxtaposer divers types de mailles. La deuxième grande méthode, dite de **Monte-Carlo**, est particulièrement adaptée pour simuler le *transport de particules*, par exemple des neutrons ou des photons d'un **plasma** (voir *Les simulations en physique des particules*). Un tel transport est en fait caractérisé par une succession d'étapes lors desquelles chaque particule peut subir différents événements (diffusion, absorption, émission...) possibles *a priori*. Les probabilités élémentaires de chacun de ces événements sont connues individuellement pour chaque particule.

Il est alors naturel d'assimiler un point du plasma à une particule. Un ensemble de particules, en nombre fini, va constituer un échantillon représentatif de l'infinité de particules du plasma, comme lors d'un sondage statistique. D'étape en étape, l'évolution de l'échantillon sera déterminée grâce à des tirages au hasard (d'où le nom de la méthode). L'efficacité de cette méthode, mise en œuvre à Los Alamos dès les années 1940, dépend bien sûr de la qualité statistique des tirages au hasard.



CEA

Simulation 3D réalisée à l'aide du supercalculateur Tera installé fin 2001 au centre CEA/DAM Île-de-France à Bruyères-le-Châtel (Essonne).

Il existe pour cela des méthodes de nombres aléatoires, bien adaptées au traitement par un ordinateur.

Les méthodes des volumes finis et de Monte-Carlo ont suscité et suscitent de nombreuses études mathématiques. Ces études s'attachent notamment à préciser la convergence de ces méthodes, c'est-à-dire comment la précision de l'approximation varie avec le nombre de mailles ou de particules. Cette question est naturelle lors de la confrontation des résultats de la simulation numérique à ceux de l'expérience.

Comment se déroule une simulation numérique ?

Il est souvent question d'*expérience numérique* pour souligner l'analogie entre la pratique d'une simulation numérique et la conduite d'une expérience de physique.

Brièvement, cette dernière utilise un dispositif expérimental, configuré selon des conditions initiales (de température, de pression...) et des paramètres de contrôle (durée de l'expérience, des mesures...). Durant l'expérience, le dispositif produit des points de mesures qui sont enregistrés. Ces enregistrements sont ensuite analysés et interprétés.

Dans une simulation numérique, le dispositif expérimental consiste en un ensemble de programmes informatiques exécutés sur des ordinateurs. Les **codes** ou **logiciels de calcul** sont la traduction, à travers des algorithmes numériques, des formulations mathématiques des modèles physiques étudiés. En amont et en aval du calcul, les *logiciels d'environnement* effectuent la gestion de plusieurs opérations complexes de préparation des calculs et de leur dépouillement.

Les données initiales de la simulation comporteront d'abord la délimitation du domaine de calcul à partir d'une représentation approchée des formes géométriques (produite par le dessin et la CAO, conception assistée par ordinateur), suivie de la discrétisation de ce

domaine de calcul sur un maillage, ainsi que les valeurs des paramètres physiques sur ce maillage et les paramètres de contrôle du bon déroulement des programmes... Toutes ces données (produites et gérées par les logiciels d'environnement) seront saisies et vérifiées par les codes. Les résultats des calculs proprement dits, c'est-à-dire les valeurs numériques des paramètres physiques, seront sauvegardés au fur et à mesure. En fait, un protocole spécifique structurera les informations produites par l'ordinateur afin de constituer une base de données numériques.

Un protocole complet organise l'échange informatique des informations requises (dimensions notamment) suivant des formats prédéfinis : *modeleur*⁽¹⁾, *mailleur*⁽²⁾, *découpeur de maillage*, *code*

(1) Le *modeleur* est un outil qui permet la création et la manipulation de points, courbes et surfaces en vue par exemple de la création d'un maillage.

(2) Les formes géométriques d'un maillage sont décrites par des ensembles de points reliés par des courbes et des surfaces (de Bézier par exemple) qui en représentent les frontières.



de calculs, logiciel de visualisation et d'analyse. Les études de *sensibilité* des résultats (au maillage et aux modèles) font partie des "expériences" numériques.

À l'issue des calculs (résolution numérique des équations décrivant les phénomènes physiques qui se déroulent dans chaque maille), l'analyse des résultats par des spécialistes reposera sur l'exploitation de la base de données numériques. Elle comportera plusieurs étapes : extraction sélective des données (selon le paramètre physique recherché) et visualisation, extraction et transfert des données pour calculer et visualiser des diagnostics.

Le parallèle entre la conduite d'un cas de calcul, d'une expérience numérique et la conduite d'une expérience physique ne s'arrête pas là : les résultats numériques seront comparés aux résultats expérimentaux. Cette analyse comparative, effectuée sur la base de critères quantitatifs standardisés, fera appel et à l'expérience

et à l'art de l'ingénieur, du physicien, du mathématicien. Elle débouchera sur de nouvelles améliorations des modèles physiques et des programmes informatiques de simulation.

Bruno Scheurer

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

Frédéric Ducros et Ulrich Bieder

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Grenoble

L'exemple d'un calcul de thermohydraulique

La mise en œuvre d'un protocole de simulation numérique peut être illustrée par les travaux réalisés par l'équipe de développement du logiciel de calcul **thermohydraulique** Trio U. Ces travaux se sont déroulés dans le cadre d'une étude faite en collaboration avec l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN). L'objectif était d'obtenir des données très précises pour fournir à l'ingénieur les sollicitations en température à la paroi des composants d'un réacteur à eau sous pression dans le cas d'un accident grave impliquant une circulation naturelle turbulente de gaz chauds. Cette étude requiert la modélisation simultanée d'effets "système" à grande échelle et de phénomènes **turbulents** à petite échelle (encadré F, **Modélisation et simulation des écoulements turbulents**).

Elle débute par la définition du modèle de calcul global (figure A), suivie de la réalisation du modèle CAO et du maillage correspondant avec des logiciels du commerce (figure B). Les maillages de plus de cinq millions de mailles exigent l'utilisation de puissantes stations graphiques. Dans cet exemple, le maillage d'un générateur de vapeur (figures C et D) a été découpé pour répartir les calculs sur huit processeurs d'un ordinateur parallèle du CEA : chaque couleur symbolise une zone affectée à un processeur particulier. Les calculs, dont les conditions aux limites sont données par un calcul "système" (Icare-Cathare), produisent des résultats qu'il appartient aux spécialistes d'interpréter. En l'occurrence, les visualisations sur des stations graphiques des valeurs instantanées des champs de vitesse montrent l'impact d'un panache chaud sur la plaque tubulaire du

générateur de vapeur (coupe dans le champ de vitesses à gauche de la figure E) et la température instantanée dans la boîte à eau (à droite).

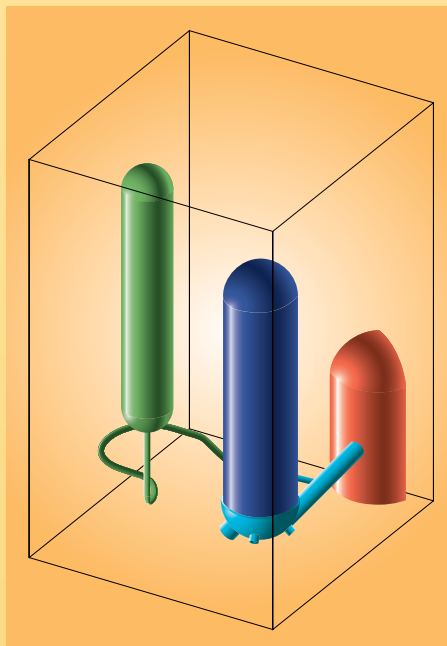


Figure A. Domaine de calcul global incluant une partie de la cuve réacteur (rouge), la conduite de sortie (branche chaude en bleu clair), le générateur de vapeur (bleu foncé) et le pressuriseur (vert).

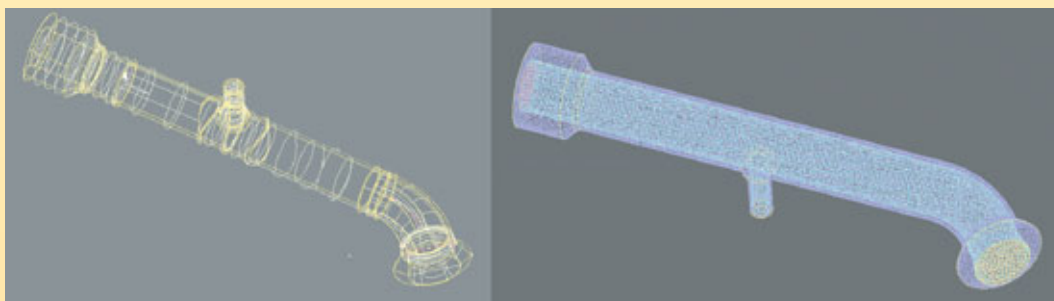
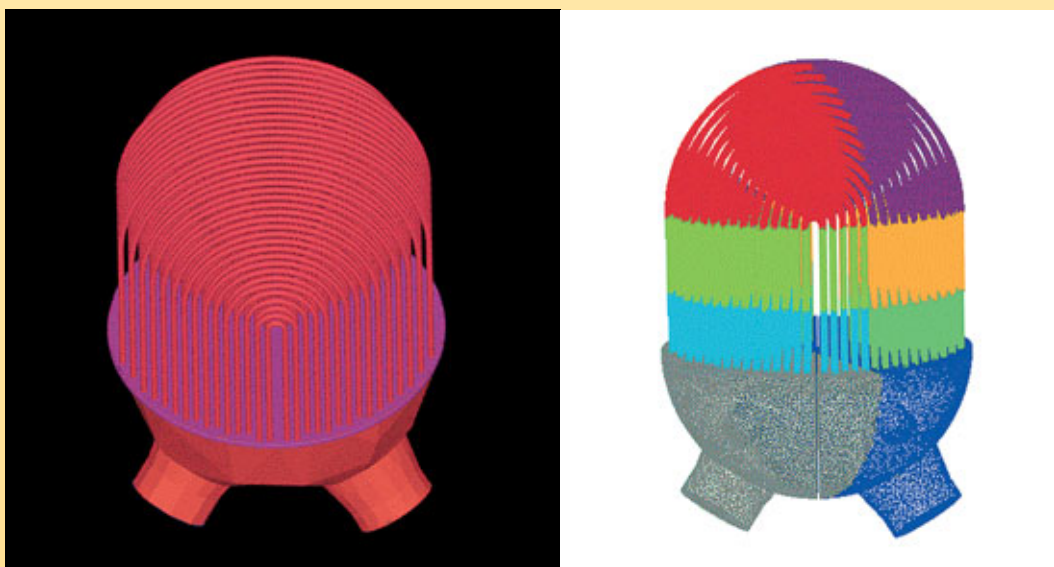


Figure B. Modèle CAO de la branche chaude en sortie de la cuve réacteur (à gauche) et son maillage non structuré (à droite).



Figures C et D.

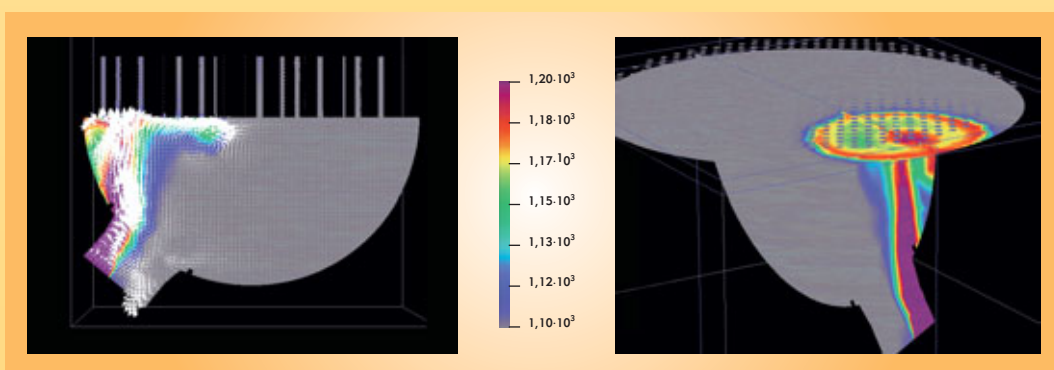


Figure E.

Les moyens informatiques de la simulation

Effectuer des **simulations numériques** plus précises impose de mettre en œuvre des **modèles** physiques et numériques eux-mêmes plus précis portant sur des descriptions plus fines des objets simulés (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). Tout ceci nécessite des progrès dans le domaine des logiciels de simulation mais aussi une augmentation importante de la capacité des équipements informatiques sur lesquels ces logiciels sont utilisés.

Processeurs scalaires et vectoriels

Au cœur de l'ordinateur, le processeur est l'unité de base qui, déroulant un programme, effectue les calculs. Il en existe deux grands types, les **processeurs scalaires** et les **processeurs vectoriels**. Les premiers exécutent des opérations portant sur des nombres élémentaires (scalaires), par exemple l'addition de deux nombres. Les seconds exécutent des opérations portant sur des ensembles de nombres (vecteurs), par exemple additionner deux à deux les nombres composant deux ensembles de 500 éléments. À ce titre, ils sont particulièrement adaptés à la simulation numérique : lors de l'exécution d'une opération de ce type, un processeur vectoriel peut fonctionner à une vitesse proche de sa performance maximale (crête). La même opération avec un processeur scalaire exige de nombreuses opérations indépendantes (opérations par composante des vecteurs) qui s'exécutent à une vitesse bien inférieure à sa vitesse crête. L'avantage principal des processeurs scalaires est leur prix : il s'agit de microprocesseurs généralistes dont les coûts de conception et de fabrication peuvent être amortis sur de larges marchés.

Forces et contraintes du parallélisme

Les processeurs récents permettent de hautes performances, d'une part en utilisant une fréquence de fonctionnement plus élevée, d'autre part en cherchant à exécuter en même temps

plusieurs opérations : c'est un premier niveau de **parallélisme**. L'accélération de la fréquence est limitée par l'évolution de la technologie micro-électronique, tandis que les dépendances entre instructions à exécuter par le processeur limitent le parallélisme possible. La mise en œuvre simultanée de plusieurs processeurs constitue un second niveau de parallélisme, qui permet d'obtenir des performances accrues à condition de disposer de programmes capables d'en tirer parti. Alors que le parallélisme au niveau des processeurs est automatique, celui *entre processeurs* dans un ordinateur parallèle est à la charge du programmeur, qui doit découper son programme en morceaux indépendants et prévoir entre eux les communications nécessaires. On procède souvent par un découpage du domaine sur lequel porte le calcul, chaque processeur étant chargé de simuler le comportement d'un domaine, et par l'établissement de communications régulières entre processeurs afin de garantir la cohérence d'ensemble du calcul. Pour obtenir un programme parallèle efficace, il faut s'assurer de l'équilibrage de charge entre processeurs et chercher à limiter le coût des communications.

Les différentes architectures

Les équipements informatiques ont différentes fonctions. À partir de son ordinateur de travail sur lequel il prépare ses calculs et en analyse les résultats, l'utilisateur accède à des moyens de calcul, de stockage, et de visualisation partagés, mais beaucoup plus puissants que les siens propres. L'ensemble de ces équipements sont reliés par des réseaux informatiques permettant de faire circuler les informations entre eux avec des débits compatibles avec le volume de données produites, pouvant atteindre 1 **téraoctet** (1 To = 10^{12} octets) de données pour une seule simulation.

Les grands équipements de calcul sont généralement appelés **supercalculateurs**. Ils atteignent aujourd'hui des puissances qui se chiffrent en **téraflops** (1 Tflops = 10^{12} opérations de calcul par seconde).

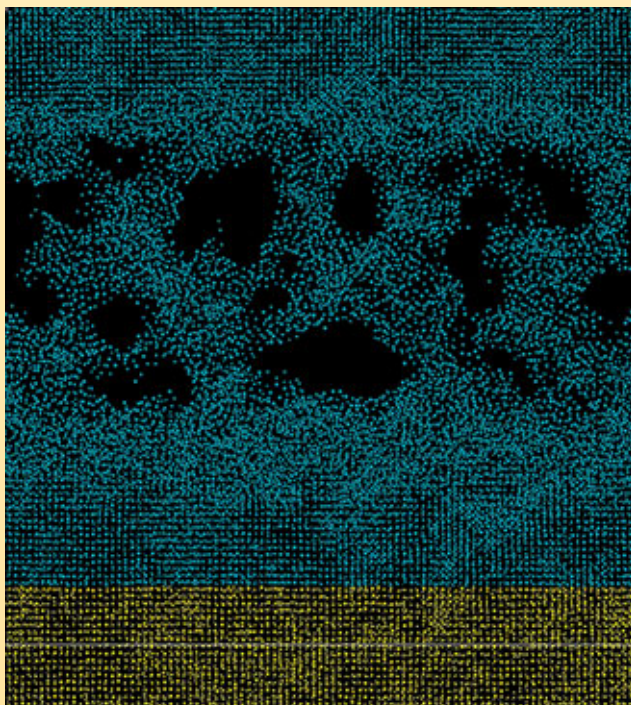
Il existe aujourd'hui trois grands types de supercalculateurs : les supercalculateurs vectoriels, les grappes de mini-ordinateurs à mémoire partagée et les grappes de PC (l'ordinateur que chacun possède chez soi). Le choix entre ces architectures dépend largement des applications et de l'utilisation visées. Les supercalculateurs vectoriels disposent de processeurs très performants mais dont il est difficile d'augmenter la puissance en ajoutant des processeurs. Les grappes de PC sont peu coûteuses mais mal adaptées à des environnements où de nombreux utilisateurs font beaucoup de calculs très gourmands en puissance machine, en mémoire et en entrées-sorties.

Ce sont ces considérations qui ont en particulier conduit la Direction des applications militaires (DAM) du CEA à choisir pour son programme simulation (voir *Le programme Simulation : la garantie des armes sans essais nucléaires*) les architectures de type grappe de mini-ordinateurs à mémoire partagée, encore appelées **clusters de SMP** (Symmetric Multi-Processor). Un tel système utilise comme brique de base un mini-ordinateur com-



CEA

Installée en décembre 2001 au CEA (centre DAM-Ile de France) et conçue par Compaq (devenue depuis HP), la machine Tera a pour élément de base un mini-ordinateur à 4 processeurs Alpha à 1 GHz partageant une mémoire de 4 Go et fournissant une puissance totale de 8 Gflops. Ces éléments de base sont interconnectés par un réseau rapide conçu par la société Quadrics. Une opération de synchronisation sur l'ensemble des 2 560 processeurs s'effectue en moins de 25 microsecondes. Le système de fichiers global offre un espace de stockage de 50 téraoctets pour les entrées-sorties avec une bande passante agrégée de 7,5 Go/s.



Les calculateurs parallèles sont adaptés aux méthodes numériques basées sur des maillages (encadré A, **Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?**) mais aussi au traitement de calculs ab initio comme cette simulation par dynamique moléculaire de l'endommagement par choc de deux plaques de cuivre à 1 km/s (voir La simulation des matériaux). Le système considéré est constitué de 100 000 atomes de cuivre représentant un parallélépipède de section carrée (0,02 μm de côté) à densité normale. Les atomes interagissent suivant un potentiel EAM (embedded atom potential) pendant 4,6 picosecondes. Le calcul, effectué sur 18 processeurs du supercalculateur Tera de Bruyères-le-Châtel à l'aide du logiciel Stamp développé au CEA, a représenté une dizaine de minutes de temps "utilisateur" (calcul réalisé par B. Magne). Des tests impliquant jusqu'à 64 millions d'atomes ont été réalisés, mobilisant 256 processeurs pendant une centaine d'heures.

portant plusieurs microprocesseurs qui partagent une mémoire commune (figure). Ces mini-ordinateurs étant largement diffusés dans des domaines variés allant de la banque au serveur web

en passant par les bureaux d'études, ils offrent un excellent rapport performance/prix. Ces "briques" de base (encore appelées *nœuds*) sont reliées entre elles par un réseau d'interconnexion hautes performances : la puissance cumulée de plusieurs centaines de ces "briques" peut atteindre plusieurs téraflows. On parle alors d'**ordinateur massivement parallèle**.

Cette puissance peut être disponible pour une seule application parallèle utilisant toutes les ressources du supercalculateur mais aussi pour de multiples applications indépendantes, parallèles ou non, utilisant chacune une partie des ressources.

Si la caractéristique mise en avant pour décrire un supercalculateur est en général sa puissance de calcul, il ne faut pas négliger l'aspect entrées-sorties. Ces machines capables d'effectuer des simulations de grande taille doivent disposer de systèmes de disques avec des capacités et des performances adaptées. Dans les *clusters* de SMP, chaque mini-ordinateur dispose d'un espace disque local. Il n'est néanmoins pas judicieux d'utiliser celui-ci pour les fichiers utilisateurs, ce qui obligerait l'utilisateur à explicitement déplacer ses données entre les différentes phases de ses calculs. Pour cette raison, il est important de disposer d'un espace disque accessible par l'ensemble des mini-ordinateurs du supercalculateur. Cet espace est en général constitué de batteries de disques reliées à des nœuds dont la fonction principale est de les gérer. Comme pour le calcul, c'est le parallélisme pour les entrées-sorties qui permet d'offrir des performances élevées. Il faut, pour ce faire, disposer de systèmes de fichiers globaux parallèles permettant un accès rapide et sans contraintes à l'espace disque partagé.

Offrant des puissances de calcul considérables, les *clusters* de SMP posent néanmoins plusieurs défis. Parmi les plus importants, outre la programmation de logiciels de simulation capables de tirer parti du grand nombre de processeurs, il faut mettre au point des systèmes d'exploitation et les logiciels associés compatibles avec de telles configurations et tolérants vis-à-vis des pannes.

François Robin

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

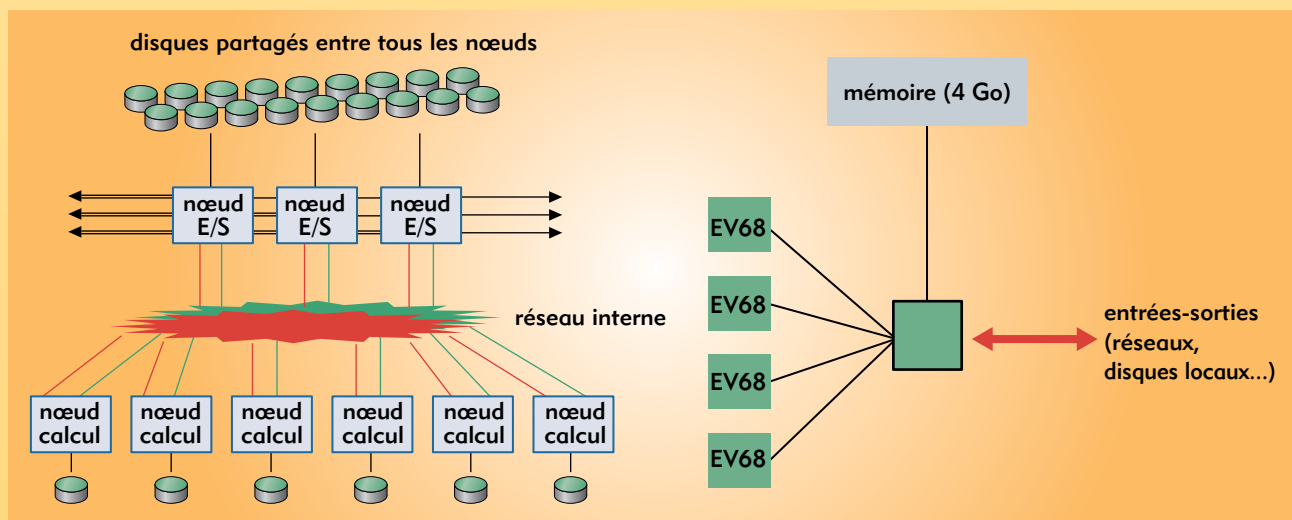


Figure. Architecture d'une machine du type "cluster de SMP". À gauche, l'architecture générale (E/S = entrée/sortie), à droite celle d'un nœud avec quatre processeurs Alpha EV68 cadencés à 1 GHz.

Modélisation et simulation des écoulements turbulents

La **turbulence**, ou l'agitation de l'écoulement dit turbulent, se développe dans la plupart des écoulements qui conditionnent notre environnement immédiat (rivières, océan, atmosphère). Elle se révèle être aussi un, sinon le, paramètre dimensionnant dans un bon nombre d'écoulements industriels (liés à la production ou la conversion d'énergie, à l'aérodynamique...). Il n'est donc pas étonnant que soient entrepris des efforts visant sa prédiction – fût-elle encore imprécise – surtout lorsqu'elle se trouve combinée à des phénomènes qui la compliquent : stratification, combustion, présence de plusieurs phases... C'est que, paradoxalement, même s'il est possible d'anticiper la nature turbulente d'un écoulement et même, d'un point de vue théorique, de dégager certaines caractéristiques communes et apparemment universelles aux écoulements turbulents⁽¹⁾, leur prédiction dans

des cas précis reste délicate. Celle-ci doit en effet prendre en compte l'importante gamme d'échelles spatiales et temporelles⁽²⁾ impliquées dans tout écoulement de ce type.

Les chercheurs ne sont pourtant pas démunis, aujourd'hui, pour aborder ce problème. En premier lieu, les équations qui régissent l'évolution spatio-temporelle des écoulements turbulents (équations de Navier-Stokes⁽³⁾) sont connues. Leur résolution complète, dans des cas très favorables, a conduit à des descriptions prédictives. Mais l'emploi systématique de cette méthode de résolution se heurte à deux difficultés rédhibitoires : d'une part, il nécessiterait la connaissance complète et simultanée de toutes les variables attachées à l'écoulement et des forçages s'exerçant sur lui⁽⁴⁾ et, d'autre part, il mobiliserait des moyens de calculs irréalistes pour encore des décennies.

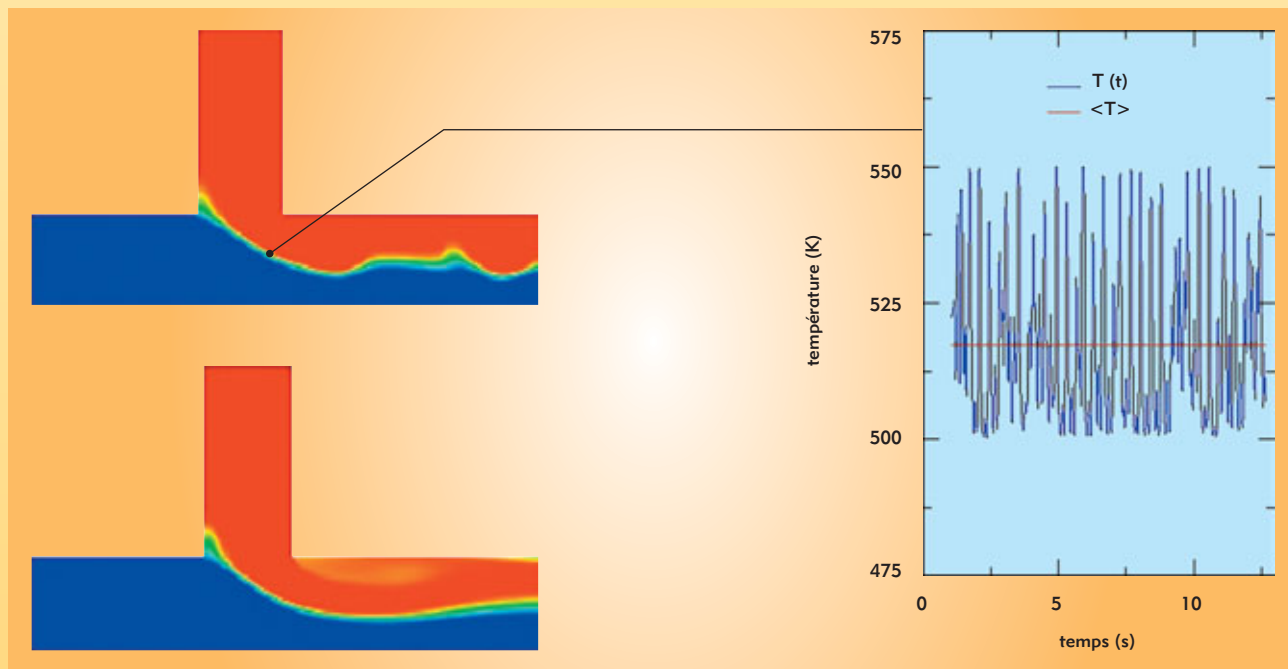


Figure. Champ de température instantané (haut) et moyenné (bas) dans une situation de mélange. La courbe donne l'historique de la température en un point : valeur instantanée fluctuante en bleu et moyenne en rouge (d'après la thèse d'Alexandre Chatelain [DEN/DTTP/SMTH/LDTA]).

Il faut donc se résoudre, en s'appuyant sur le caractère fluctuant dû à l'agitation turbulente, à définir et utiliser des moyennes. Une des approches les plus répandues consiste à aborder le problème sous un angle statistique. Les moyennes d'ensemble de vitesse, de pression, de température... dont la distribution caractérise l'écoulement turbulent sont définies comme les variables principales de l'écoulement qu'on cherche à qualifier par rapport à ces moyennes. Ceci conduit à une décomposition du mouvement (dite de Reynolds) en champs moyen et fluctuant, ce dernier mesurant l'écart instantané et local entre chaque grandeur réelle et sa moyenne (figure). Ces fluctuations représentent la turbulence et couvrent une partie importante du spectre de Kolmogorov⁽¹⁾.

Cette opération réduit considérablement le nombre de degrés de liberté du problème et le rend « manipulable » informatiquement. Elle comporte aussi de nombreuses difficultés : il faut tout d'abord constater que, précisément en raison des non-linéarités des équations du mouvement, toute moyenne fait surgir des termes nouveaux et inconnus qu'il faut estimer. En fermant la porte à la description complète et déterministe du phénomène, on ouvre celle de la modélisation, c'est-à-dire à la représentation des effets de la turbulence sur les variables moyennes.

Beaucoup de progrès ont été accomplis depuis les premiers modèles (Prandtl, 1925). Les modélisations n'ont cessé d'évoluer vers plus de complexité, se basant sur le fait généralement vérifié que toute nouvelle extension permet de conserver les propriétés antérieurement acquises. Il faut aussi constater que, même

si de nombreux développements remettent en avant la nécessité de traiter les écoulements en respectant leur caractère *instationnaire*, les modélisations les plus populaires ont été développées dans le cadre des écoulements *stationnaires*, pour lesquels on n'accède donc qu'à une représentation de la moyenne temporelle de l'écoulement : dans le modèle mathématique final, les effets de la turbulence proviennent ainsi intégralement de la modélisation.

Il est également remarquable que, malgré de nombreux travaux, aucune modélisation n'est aujourd'hui capable de rendre compte de l'intégralité des phénomènes qui influencent la turbulence ou sont influencés par elle (transition, instationnarité, stratification, compression, etc.). Ce qui semble pour l'instant empêcher les modélisations statistiques de nourrir une ambition d'universalité.

Malgré ces limitations, la plupart des modélisations statistiques courantes sont maintenant disponibles dans les codes commerciaux et les outils des industriels. Il n'est pas possible de prétendre qu'elles permettent des calculs prédictifs dans toute situation. Leur précision est variable, offrant des résultats utiles pour l'ingénieur dans des situations maîtrisées et favorables (prédiction de la traînée avec une précision de 5 % à 10 % d'erreur [parfois mieux] sur certains profils), mais parfois faux dans des situations qui se révèlent, après coup, en dehors du champ de validité du modèle. Tout emploi maîtrisé d'une modélisation repose donc sur une qualification particulière au type d'écoulement à traiter. Des modélisations alternatives, répondant au besoin d'une plus grande précision sur des gammes d'échelles spatiales et temporelles plus étendues et donc basées sur un opérateur de "moyenne" d'une nature différente, sont actuellement en développement et représentent des voies nouvelles.

Le paysage des modélisations de la turbulence est aujourd'hui très complexe et l'unification des points de vue et des divers concepts de modélisation est une gageure. La tentation de l'universalité des modélisations reste donc hors de propos. Leur mise en œuvre réelle relève la plupart du temps de compromis généralement guidés par le savoir-faire de l'ingénieur.

Frédéric Ducros

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Grenoble

(1) On peut faire référence à la répartition spectrale de l'énergie cinétique turbulente, connue comme le "spectre de Kolmogorov", qui illustre de manière très simple la hiérarchie des échelles, des grandes échelles porteuses d'énergie aux échelles de plus en plus petites et de moins en moins énergétiques.

(2) Cette étendue est le résultat des non-linéarités des équations du mouvement qui donne naissance à une gamme étendue d'échelles spatiales et temporelles. Cette gamme est une fonction croissante du nombre de Reynolds, Re , mesurant le rapport entre force d'inertie et force visqueuse.

(3) L'hypothèse selon laquelle la résolution complète des équations de Navier-Stokes permet la simulation de la turbulence est généralement admise, tout du moins dans la gamme des écoulements sans choc.

(4) Il s'agit d'un problème régi par des conditions initiales et aux limites.