

# SEMINAIRE



**Service de Recherches de Métallurgie Physique**  
DEN/DANS/DMN

Bibliothèque du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

## ***Amélioration des performances du code de cinétique chimique MFVISC dédié à la simulation de la co-agglomération des défauts ponctuels et des atomes de soluté sous irradiation***

**Solène LE BOURDIEC**

*EDF R&D – Département SINETICS – Clamart*

Afin de prévoir le comportement en service ainsi que la durée de vie des composants des réacteurs nucléaires de type Réacteur à Eau Pressurisée (REP) soumis au bombardement neutronique, le groupe EDF réalise des expérimentations sur des réacteurs particuliers appelés réacteurs de recherche. Ces études sont complétées par des travaux numériques de modélisation des phénomènes mis en jeu. Ainsi, le projet européen PERFORM vise à mettre au point une chaîne de calcul constituée de sept modules pour la simulation du vieillissement des aciers de cuve sous l'effet de l'irradiation neutronique.

Le projet PARMAT (PARAllélisation pour la simulation des MATériaux) vise à optimiser plusieurs modules de la chaîne dont le module de cinétique chimique. Dans la chaîne de calcul mise en place à l'heure actuelle, une approche déterministe basée sur un modèle de champ moyen a été choisie. Le code MFVISC associé procède à la résolution directe d'un système raide d'EDO non linéaires. La version actuelle du code ne permet pas de réaliser les simulations visées, soit d'obtenir l'évolution de  $10^8$  défauts en quelques heures. De tels calculs nécessiteraient un très grand espace mémoire (non disponible sur les machines à l'heure actuelle), ainsi qu'un temps de calcul de l'ordre du mois.

Dans un premier temps, on a détecté les parties consommatrices en temps de calcul du code MFVISC en vue de sa parallélisation. Ce travail préliminaire réalisé sur le code MFVISC a suggéré différentes optimisations du code avant toute parallélisation. Dans un second temps, on s'est intéressé à une approche stochastique, l'algorithme SSA de type Monte Carlo pour la résolution des équations de la cinétique chimique. On présentera l'ensemble des résultats obtenus, en particulier des calculs de comparaison entre les approches stochastiques et déterministes.

Le travail préliminaire réalisé sur le code MFVISC a suggéré différentes optimisations du code avant toute parallélisation : un travail d'optimisation de la factorisation LU, du solveur d'EDO, de la multiplication d'une matrice par un scalaire et de la copie d'une matrice. De plus, les matrices jacobiniennes du système étant très creuses, il est naturel d'envisager un stockage creux à la fois pour réduire le temps de calcul et le stockage mémoire, et traiter ainsi des systèmes de plus grande taille. Enfin, compte tenu de la structure des matrices jacobiniennes, une renumérotation des inconnues est également envisagée afin d'obtenir des structures optimales pour la résolution directe du système linéaire. La suite de ce travail d'optimisation du code MFVISC, consiste donc à tester un stockage creux des matrices jacobiniennes et un solveur direct creux en séquentiel puis en parallèle, de manière à isoler la stratégie optimale pour le stockage des données et la résolution des systèmes linéaires.

L'approche stochastique basée sur l'algorithme SSA a été validée sur une maquette appelée GMC (Gillespie Monte Carlo) dans le cadre simplifié où seuls les monomères sont mobiles et où il n'y a pas de soluté dans le système. La suite du travail consiste à évaluer et à améliorer l'efficacité de l'approche à partir du code GMC écrit, suite à l'optimisation du stockage des vecteurs d'état et à l'extension du problème à des défauts mixtes. La comparaison avec le code déterministe sur les cas les plus représentatifs pouvant être simulés renseignera sur la performance de l'approche stochastique et sur la continuité ou non de ces travaux.

**Lundi 19 janvier 2009 à 10h30**

***N.B :***

***Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance – les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire – le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre :***

***Tel : 01 69 08 66 64 – Fax : 01 69 08 68 67***