

Titre: Développement de la méthode Sn à schémas diamants d'ordres élevés en géométrie 3D cartésienne
Title: élevé en géométrie 3D cartésienne

Auteur: Nicolas Martin
Author:

Date: 2008

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Martin, N. (2008). Développement de la méthode Sn à schémas diamants d'ordres élevés en géométrie 3D cartésienne [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/8392/>
Citation:

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/8392/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Alain Hébert
Advisors:

Programme: Unspecified
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉVELOPPEMENT DE LA MÉTHODE S_N À SCHÉMAS DIAMANTS D'ORDRES
ÉLEVÉS EN GÉOMÉTRIE 3D CARTÉSIENNE

NICOLAS MARTIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE ÉNERGÉTIQUE)
FÉVRIER 2008



Library and
Archives Canada

Published Heritage
Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Direction du
Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file *Votre référence*
ISBN: 978-0-494-47676-5
Our file *Notre référence*
ISBN: 978-0-494-47676-5

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

DÉVELOPPEMENT DE LA MÉTHODE S_N À SCHÉMAS DIAMANTS D'ORDRES
ÉLEVÉS EN GÉOMÉTRIE 3D CARTÉSIENNE

présenté par: MARTIN Nicolas

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. KOCLAS Jean, Ph.D., président

M. HÉBERT Alain, D.Ing, membre et directeur de recherche

M. MARLEAU Guy, Ph.D., membre

À mes parents, Olivier et Anne Martin.

REMERCIEMENTS

J'aimerais d'abord remercier mon directeur de recherche le professeur Alain Hébert de m'avoir accepté dans ce programme et proposé ce sujet de recherche. J'adresse également un remerciement tout particulier à Romain Le Tellier, post-doctorant lors du début de ma maîtrise et actuellement chercheur au CEA/SPRC, pour ses nombreux conseils et pour m'avoir aidé à démarrer rapidement mes travaux de recherche. Par ailleurs, merci à l'ensemble des professeurs de l'Institut de Génie Nucléaire, en particulier au professeur Guy Marleau, pour ses conseils et indications. Je remercie enfin mes anciens et actuels collègues étudiants aux cycles supérieurs en génie nucléaire pour la bonne ambiance régnant au sein du laboratoire, Joël Le Mer, Alexi Popov, Marc-André Lajoie, Majid Fassi-Fehri, Martin Bouquillon et bien sûr tous ceux que j'aurais croisé.

RÉSUMÉ

Le travail réalisé au cours de cette maîtrise a été d'implémenter une méthode de résolution tridimensionnelle de l'équation de transport neutronique par la méthode des ordonnées discrètes (S_N), apparaissant lors de l'étape de calcul de cellules ou de coeur dans le domaine de la simulation neutronique des réacteurs nucléaires. La méthode S_N fait partie des premiers outils numériques développés pour résoudre l'équation de transport de particules neutres, et reste encore largement utilisée.

La méthode aux ordonnées discrètes présuppose un traitement particulier de la variable angulaire, celle-ci est en effet discrétisée suivant un nombre donné de directions (ordonnées discrètes), auxquelles on associe un poids d'intégration.

Concernant le traitement de la variable spatiale, c'est historiquement le schéma diamant linéaire qui est le plus utilisé. Celui-ci repose sur un schéma aux différences finies linéaires, comme nous le décrirons par la suite. Dans notre travail, nous avons généralisé cette approche en proposant l'utilisation de schémas diamants d'ordres élevés, permettant ainsi un gain en terme de convergence spatiale de nos calculs. Nous nous sommes limités dans notre études aux géométries 2D et 3D cartésiennes.

Par ailleurs, il a fallu tenir compte des problèmes de convergence connus de la méthode S_N , pour cela nous avons retenu le schéma DSA (diffusion synthetic acceleration), appartenant à la famille des méthodes d'accélération synthétiques. Dans cette optique, nous avons utilisé le code TRIVAC en approximation diffusion, mixe-duale, Raviart-Thomas, superconvergente (Gauss-Legendre) et cartésienne tridimensionnelle.

L'ensemble de la programmation a été validé au travers de benchmarks simples monocinétiques 3D anisotropes, à deux groupes et isotropes, puis finalement par comparaison avec le code MCNP sur le benchmark NEA3D-TAB-2007.

ABSTRACT

This project is dedicated to the implementation of the discrete ordinate method (S_N method) for the 3-Dimensionnal Cartesian transport equation. S_N method is the most widely used technique for solving the transport equation of neutral particles.

The discrete ordinate method implies a special discretization of the angular variable, and in its classical implementation the spatial variable is integrated by the Diamond Linear scheme. In this work, our approach was to extend the diamond scheme to high order spatial approximations, in order to increase the spatial accuracy of our numerical results. Our study is limited to 2D/3D Cartesian geometries.

Furthermore, S_N methods are known for their bad convergence properties, typically when the scattering ratio is close to one, or in presence of strong heterogeneities. To deal with these issues, we have conjointly implemented in our 3D S_N method a Diffusion Synthetic Acceleration, based on our core solver TRIVAC. We have used here a mixed-dual, Raviart-Thomas, superconvergent (Gauss-Legendre) approximation of the flux in 3-Dimensionnal Cartesian geometry.

All of our work was validated through simple test cases, one-group anisotropic and two-groups isotropic benchmarks. Finally, we have tested our solver by comparison with MCNP numerical results during the study of the NEA3D-TAB-2007.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	vii
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES TABLEAUX	xvi
LISTE DES ANNEXES	xvii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT PAR LA MÉTHODE S_N	3
1.1 Présentation de l'équation de transport	3
1.2 Obtention de l'équation de transport	4
1.3 Traitement du terme de source	7
1.4 Traitement des conditions aux frontières	7
1.5 L'approche multigroupe	9
1.6 Méthode aux ordonnées discrètes	10
1.6.1 Traitement de la variable angulaire	10
1.6.2 Quadratures angulaires pour la méthode des ordonnées discrètes	11
1.6.3 Équation de Boltzmann en géométrie 3D cartésienne	14

1.6.4	Traitement de la variable spatiale : schéma aux différences finis	16
1.6.5	Stratégie de résolution	18
1.6.6	Accélération synthétique de la convergence	19
1.6.7	Méthode de Krylov appliquée au formalisme S_N	22
CHAPITRE 2	MÉTHODE S_N À ORDRES ÉLEVÉS EN GÉOMÉTRIE 3D CARTÉSIENNE	26
2.1	Théorie	26
2.1.1	Équation de Boltzmann en géométrie 3D cartésienne	26
2.1.2	Intégration de la variable angulaire	28
2.1.3	Intégration de la variable spatiale	28
2.1.4	Stratégie de résolution	36
2.1.5	Balayage angulaire et spatial	38
2.2	Implémentation et validation dans DRAGON	40
2.2.1	Cadre de travail : le code de réseau DRAGON	40
2.2.2	Méthodologie de la validation	40
2.2.3	Comparaison S_N 2D/3D	42
2.2.3.1	Test numéro 1 : comparaison 2D/3D	42
2.2.3.2	Test numéro 2 : Benchmark IAEA 2D.	45
2.2.4	Invariance par rotation de la géométrie	47
2.2.4.1	Test numéro 3 : géométrie 3D à 3 plans	48
2.2.4.2	Test numéro 4 : géométrie 3D à 5 plans.	49
2.2.5	Comparaison S_N/SP_n	49
2.2.5.1	Théorie de la méthode SP_n	50
2.2.5.2	Test 5 : comparaison S_{n+1}/SP_n : benchmark IAEA 3D	52
2.3	Implémentation et validation de la méthode DSA	55
2.3.1	Test 6 : benchmark anisotrope 3D à un plan	56

2.3.2	Test de l'implémentation du solveur GMRES à l'aide du benchmark NEA 3D	58
2.3.2.1	Nombre d'itérations en fonction du coefficient de diffusion	59
2.3.2.2	Analyse des résultats	61
CHAPITRE 3	ÉTUDE DU BENCHMARK NEA 3D À L'AIDE DU CODE DRAGON	63
3.1	Problématique et but de l'étude du benchmark NEA-3DTAB-2007	63
3.2	Description du benchmark	64
3.3	Valeurs recherchées	67
3.4	Étude préliminaire de convergence	68
3.4.1	Options disponibles dans notre solveur	68
3.4.2	Étude préliminaire : le cas 222222	69
3.4.2.1	Cas 222222 : Raffinement spatial pour les flux scalaires	71
3.4.2.2	Cas 222222 : Raffinement angulaire pour les flux scalaires	72
3.4.2.3	Cas 222222 : Raffinement spatial pour les flux surfaciques	73
3.4.2.4	Cas 222222 : Raffinement angulaire pour les flux surfaciques	74
3.4.2.5	Interprétations des résultats	74
3.4.3	Étude de convergence pour le cas 111111	75
3.4.3.1	Cas 111111 : Raffinement spatial pour les flux scalaires	75
3.4.3.2	Cas 111111 : Raffinement angulaire pour les flux scalaires	76
3.4.3.3	Cas 111111 : Raffinement spatial pour les flux surfaciques	77

3.4.3.4	Cas 111111 : Raffinement angulaire pour les flux surfaciques	78
3.4.3.5	Interprétation des résultats	78
3.4.4	Étude de convergence pour le cas 333333	79
3.4.4.1	Cas 333333 : Raffinement spatial pour les flux scalaires	79
3.4.4.2	Cas 333333 : Raffinement angulaire pour les flux scalaires	80
3.4.4.3	Cas 333333 : Raffinement spatial pour les flux surfaciques	81
3.4.4.4	Cas 333333 : Raffinement angulaire pour les flux surfaciques	82
3.4.4.5	Interprétation des résultats	82
3.4.5	Étude de convergence avec le schéma parabolique	83
3.4.5.1	Cas 222222 : Étude de convergence avec le schéma parabolique pour les flux scalaires	83
3.4.5.2	Cas 222222 : Étude de convergence avec le schéma parabolique pour les flux surfaciques	84
3.4.5.3	Interprétation des résultats	84
3.4.6	Conclusion de l'étude préliminaire de convergence	84
3.5	Présentation des résultats	86
3.5.1	Propriétés numériques du solveur	86
3.5.2	Analyse de l'erreur sur nos résultats	86
3.5.2.1	Présentation des résultats pour des cas homogènes	87
3.5.2.2	Analyse des cas présentant un fort écart relatif	94
3.5.2.3	Analyse des résultats présentant un écart croissant avec l'indice de discrétisation	99
3.6	Conclusion	100

CONCLUSION 101

RÉFÉRENCES 103

ANNEXES 106

LISTE DES FIGURES

FIG. 1.1	Quadrature à niveau symétrique S_6	14
FIG. 1.2	Système de coordonnées 3D cartésien	15
FIG. 2.1	Système de coordonnées en géométrie 3D cartésienne	27
FIG. 2.2	Benchmark anisotrope	43
FIG. 2.3	Benchmark IAEA 2D	45
FIG. 2.4	Benchmark IAEA 3D	52
FIG. 2.5	Test GMRES et DSA : cas 222-c-2-c	59
FIG. 2.6	Test GMRES et DSA : cas 221-c-3-c	60
FIG. 2.7	Test GMRES et DSA pour les différents ordres spatiaux : benchmark IAEA3D	61
FIG. 3.1	Géométrie du Benchmark NEA 3D	65
FIG. 3.2	Position de la source unitaire	66
FIG. 3.3	Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires	71
FIG. 3.4	Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux scalaires	72
FIG. 3.5	Cas 22222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux surfaciques	73
FIG. 3.6	Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques	74
FIG. 3.7	Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires	75
FIG. 3.8	Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux scalaires	76
FIG. 3.9	Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux surfaciques	77

FIG. 3.10	Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques	78
FIG. 3.11	Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires	79
FIG. 3.12	Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux scalaires	80
FIG. 3.13	Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux surfaciques	81
FIG. 3.14	Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques	82
FIG. 3.15	Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires	83
FIG. 3.16	Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques	84
FIG. 3.17	Erreur relative pour le cas 211111	87
FIG. 3.18	Erreur relative pour le cas 211113	88
FIG. 3.19	Erreur relative pour le cas 211223	89
FIG. 3.20	Erreur relative pour le cas 212312	90
FIG. 3.21	Erreur relative pour le cas 222322	91
FIG. 3.22	Erreur relative pour le cas 211223 : schéma diamant	92
FIG. 3.23	Erreur RMS pour les 30 premiers cas	93
FIG. 3.24	Erreur relative : cas 111111	95
FIG. 3.25	Erreur relative : cas 113111	96
FIG. 3.26	Erreur relative : cas 311111	97
FIG. 3.27	Erreur relative : cas 313111	98
FIG. 3.28	Erreur RMS pour les 30 derniers cas	99
FIG. I.1	Etude de convergence monotonique	109
FIG. I.2	Erreur relative pour le cas linéaire	110

FIG. I.3	Erreur relative pour le cas linéaire : courbe log-log	111
FIG. I.4	Erreur relative pour le cas parabolique	112
FIG. I.5	Erreur relative pour le cas parabolique : courbe log-log	113
FIG. I.6	Erreur relative pour le cas cubique	114
FIG. I.7	Erreur relative pour le cas cubique : courbe log-log	115

LISTE DES TABLEAUX

TAB. 2.1	Benchmark anisotrope : sections efficaces des mélanges	43
TAB. 2.2	Benchmark anisotrope : comparaison S_8 2D/3D	44
TAB. 2.3	Benchmark IAEA2D : comparaison S_{n+1} 2D/3D pour le cas dia- mant linéaire avec $n=1,3,5$	46
TAB. 2.4	Benchmark IAEA2D : comparaison S_{n+1} 2D/3D pour le cas dia- mant parabolique avec $n=1,3,5$	46
TAB. 2.5	Benchmark IAEA2D : comparaison S_{n+1} 2D/3D pour le cas dia- mant cubique avec $n=1,3,5$	47
TAB. 2.6	Benchmark anisotrope 3D : test 1 d'invariance par rotation . . .	48
TAB. 2.7	Benchmark anisotrope 3D : test 2 d'invariance par rotation . . .	49
TAB. 2.8	Benchmark IAEA3D : comparaison S_{n+1}/SP_n pour les cas li- néaires	53
TAB. 2.9	Benchmark IAEA3D : comparaison S_{n+1}/SP_n pour les cas pa- raboliques	54
TAB. 2.10	Benchmark IAEA3D : comparaison S_{n+1}/SP_n pour les cas cu- biques	54
TAB. 2.11	Test du DSA pour le cas linéaire	56
TAB. 2.12	Test du DSA pour le cas parabolique	56
TAB. 2.13	Test du DSA pour le cas cubique	57
TAB. 3.1	Tableaux des paramètres	66
TAB. I.1	Erreur relative pour le cas linéaire	110
TAB. I.2	Erreur relative pour le cas parabolique	112
TAB. I.3	Erreur relative pour le cas cubique	114

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	ETUDE NUMÉRIQUE DE L'ORDRE DES SCHÉMAS D'IN-	
	TÉGRATION SPATIAUX	106
I.1	Théorie	106
I.2	Étude du régime monotonique de convergence	109
I.2.1	Cas linéaire	110
I.2.2	Cas parabolique	112
I.2.3	Cas cubique	114

INTRODUCTION

Le domaine de la simulation neutronique joue un rôle important dans les phases de développement et d'exploitation des réacteurs nucléaires. Avec une densité d'un neutron pour cent milliard d'atomes, cette population neutronique peut être considérée comme un gaz monoatomique. C'est donc l'équation de transport de Boltzmann, issue de la mécanique des gaz, qui décrit l'évolution de la population de neutrons dépendamment des variables spatiales, angulaires et énergétiques.

Due à sa nature intégró-différentielle, l'équation de transport de Boltzmann ne peut être résolue de manière analytique que pour des cas extrêmement simples. Dans les cas réels, le flux neutronique est obtenu par des méthodes numériques impliquant un processus itératif.

La méthode dite aux ordonnées discrètes ou S_N , fait partie des méthodes les plus utilisées pour justement résoudre l'équation de transport de particules neutres sur une géométrie donnée (Gelbard et al. ; 1968). Utilisée dès le début du 20ème siècle en astrophysique dans le domaine du transport radiatif, puis formalisée par Chandrasehkar en 1950 (Chandrasekhar, S. ; 1960), la méthode aux ordonnées discrètes a été transposée à la neutronique par Lee au laboratoire de Los Alamos dans les années 1960 (Lee, C. ; 1962).

Comme nous le préciserons dans la suite, la méthode S_N utilise la forme dite intégró-différentielle de l'équation de transport et implique un traitement spécial de la variable angulaire, le traitement des variables spatiales reposant très souvent sur un schéma aux différences finies dit *schéma diamant*. C'est pourquoi il est relativement fréquent en neutronique que le terme *méthode S_N* implique implicitement schéma d'intégration à différence diamant (diamond differencing scheme). Afin d'accroître l'ordre de précision spatial, de nombreux schémas d'intégrations dits à ordres élevés ont été proposé récemment, on pourrait citer par exemple les méthodes nodales et caractéristiques (Duo, I.J, Azmy, Y.Y. ; 2007), ainsi que les schémas directionnels θ -pondérés (Petrovic, B. & Ha-

ghihat, .A ; 1995b).

La méthode à ordre élevée développée dans (Hébert, A. ; 2006c) repose sur une généralisation du schéma diamant en géométrie 1D/2D, approche que nous avons étendu au cas 3D. L'intérêt est de pouvoir accroître l'ordre de convergence spatial de nos calculs tridimensionnels, et ainsi de disposer d'une méthode plus précise lors d'applications futures, tels que le design et la validation de la neutronique des réacteurs de génération 3 et 4.

Par ailleurs, il est apparu nécessaire de développer conjointement aux méthodes S_N des techniques dites d'accélération de la convergence, car dans certains cas très diffusif la méthode aux ordonnées discrètes présente un taux de convergence très faible (Alcouffe, R.E. ; 1977). La méthode dite DSA (diffusion synthetic acceleration) fait partie des techniques de préconditionnement les plus employées afin d'accélérer les itérations internes, et ainsi de s'assurer que les solutions numériques produites par la méthode S_N soient bien convergées .

Le travail réalisé dans le cadre de cette maîtrise a consisté à :

- généraliser la méthode S_N déjà disponible en 1D/2D en 3D.
- mettre en place les ordres d'intégrations spatiaux linéaire, parabolique et cubique.
- implanter un schéma d'accélération de la convergence, basé sur la méthode DSA utilisant l'approximation mixe-duale, superconvergente en théorie P_1 du flux. La stratégie d'accélération retenue est basée sur l'utilisation d'un préconditionnement de type DSA, combinée à des méthodes de résolution itératives de type GMRES(k) semblable à celle décrite par Saad dans (Saad et al. ; 1986).

Tout ce travail a été réalisé et implanté dans le code de réseau DRAGON (Marleau, G., Hébert, A. & Roy, R. ; 2007a), développé à l'Institut de Génie Nucléaire de l'École Polytechnique de Montréal.

CHAPITRE 1

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT PAR LA MÉTHODE S_N

1.1 Présentation de l'équation de transport

Avant d'introduire le formalisme S_N , il convient de présenter plus en détail l'équation de transport neutronique. L'approche issue de mécanique statistique suppose que chaque neutron évolue dans un espace de phase à 7 dimensions comprenant :

- 3 coordonnées spatiales ;
- 3 coordonnées angulaires ;
- 1 dimension temporelle.

On utilise couramment la notation suivante :

- \vec{r} pour la variable de position dans l'espace.
- \vec{V}_n variable de vitesse décomposée en $V_n = \|\vec{V}_n\|$ et $\hat{\Omega} = \frac{\vec{V}_n}{V_n}$.
- t variable temporelle.

La densité neutronique est représentée par la distribution $n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t)$,

tel que $n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t)d^3rdV_nd^2\Omega$ représente le nombre de neutrons à l'instant t dans l'hypervolume $d^3rdV_nd^2\Omega$, qui correspond à l'élément de volume d^3r autour du point \vec{r} , l'élément de vitesse dV_n autour de V_n , et dans l'élément d'angle solide $d^2\Omega$ autour de $\hat{\Omega}$. On peut remarquer que $n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t)$ est une distribution par rapport aux variables \vec{r} , V_n et $\hat{\Omega}$ mais une fonction par rapport au temps t .

On définit à partir de la densité neutronique le flux neutronique tel que :

$$\phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) = V_n n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \quad (1.1)$$

Le flux neutronique tel que défini précédemment est utilisé comme inconnue dans l'équation de transport car sa connaissance facilite par la suite le calcul des taux de réactions. Ainsi, sa définition est d'ordre mathématique et non physique.

On utilisera tout au long de ce travail la forme dite intégral-différentielle simplifiée de l'équation de transport de Boltzmann :

$$\hat{\Omega} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) = Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) \quad (1.2)$$

Avec :

- \vec{r} variable d'espace,
- $\hat{\Omega} = (\sqrt{(1 - \mu^2)} \cos \phi, \sqrt{(1 - \mu^2)} \sin \phi, \mu)$ variable angulaire,
- V_n variable d'énergie.
- $\phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega})$ représente le flux neutronique dans l'hypervolume associé,
- $\hat{\Omega} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega})$ représente le terme de neutrons sortant,
- $\Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega})$ représente le terme de fuite par collision des neutrons,
- $Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega})$ représente l'ensemble des termes de source des neutrons.

1.2 Obtention de l'équation de transport

L'équation de transport traduit un bilan de neutrons dans l'élément d'hypervolume défini précédemment $d^3r d^2\Omega dV_n$ autour de $\{\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}\}$ dans un intervalle de temps Δt :

$$\begin{aligned} \text{Variation du nombre de neutrons} = & - \text{bilan de neutrons sortis de } d^3r & (1.3) \\ & - \text{neutrons sortis par collision} \\ & + \text{neutrons créés} \end{aligned}$$

On détaille chaque terme :

- La variation du nombre de neutrons dans l'intervalle de temps Δt dans l'hypervolume $d^3r d^2\Omega dV_n$ est donnée par :

$$n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t + \Delta t) - n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \quad (1.4)$$

- Les neutrons perdus par collision pendant l'intervalle de temps Δt s'écrivent :

$$\Sigma(\vec{r}, V_n) \left[\phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \right] \Delta t \quad (1.5)$$

avec $\Sigma(\vec{r}, V_n)$ section efficace totale du milieu.

- Le bilan de neutrons sortant de d^3r se met sous la forme :

$$\vec{\nabla} \cdot \hat{\Omega} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \Delta t = \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \Delta t \quad (1.6)$$

- on définit le terme source $Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t)$ tel que

$$Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \Delta t \quad (1.7)$$

représente le nombre de neutrons créés pendant l'intervalle de temps Δt dans l'élément $d^3r d^2\Omega dV_n$.

On peut désormais établir le bilan de la population neutronique dans l'élément d'hypervolume $d^3r d^2\Omega dV_n$ autour de $\{\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}\}$ dans un intervalle de temps Δt :

$$\begin{aligned} \frac{n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t + \Delta t) - n(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t)}{\Delta t} = & - \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \\ & - \hat{\Omega} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \\ & + Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (1.8)$$

En faisant tendre Δt vers 0, on obtient la forme *différentielle* de l'équation de transport :

$$\frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) + \vec{\nabla} \cdot \hat{\Omega} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) + \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) = Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \quad (1.9)$$

Avec l'égalité

$$\vec{\nabla} \cdot \hat{\Omega} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) = \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t), \quad (1.10)$$

On obtient la forme suivante pour l'équation linéaire de Boltzmann :

$$\frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) + \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) + \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) = Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}, t) \quad (1.11)$$

En approximation quasi-statique, l'équation devient :

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) = Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) \quad (1.12)$$

La dernière étape consiste à écrire sous forme d'expansion en harmonique sphérique le terme de source :

$$Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_l^m(\vec{r}, V_n) R_l^m(\hat{\Omega}). \quad (1.13)$$

Le sujet de travail de cette maîtrise sera donc de résoudre l'équation suivante en géométrie 3D cartésienne en utilisant la méthode des ordonnées discrètes :

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_l^m(\vec{r}, V_n) R_l^m(\hat{\Omega}). \quad (1.14)$$

1.3 Traitement du terme de source

Dans l'équation linéaire stationnaire de Boltzmann, le terme de source $Q(\vec{r}, V_n, \hat{\Omega})$ englobe toutes les émissions possibles de neutrons (fission, diffusion, source externe). On utilise désormais pour l'énergie la variable $E = \frac{1}{2}mV_n^2$. Sous sa forme intégrale, le terme de source s'écrit :

$$\begin{aligned}
 Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = & \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \leftarrow \hat{\Omega}', E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E') \\
 & + \chi(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E') \\
 & + S_{ext}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)
 \end{aligned} \quad (1.15)$$

Avec les valeurs macroscopiques suivantes :

- Σ_s la section efficace de diffusion (scattering), correspondant au transfert entre les différents groupes d'énergie ;
- Σ_f section efficace de fission ;
- ν le nombre de neutrons secondaires issus de la fission ;
- χ le spectre des neutrons, défini tel que $\chi(E)dE$ corresponde à la probabilité pour un neutron émis suite à une fission d'avoir une énergie E à dE près.

Il convient dès lors de s'intéresser aux principales étapes intervenant dans la résolution de l'équation de transport de manière générale.

1.4 Traitement des conditions aux frontières

Avant de résoudre l'équation de transport dans une région V donnée, il convient de s'intéresser aux conditions imposées aux limites de ce domaine ∂V .

Le traitement des conditions aux limites est propre à chaque méthode de résolution, nous y reviendrons donc par la suite dans le cas précis de la méthode aux ordonnées discrètes.

Pour l'instant, de manière générale, on pose $\overrightarrow{N(r_s)}$ le vecteur normal au point $\overrightarrow{r_s}$ appartenant à ∂V .

La résolution de l'équation de Boltzmann sur le domaine imposé V requiert la connaissance du flux $\phi(\overrightarrow{r}, V_n, \widehat{\Omega})$ pour $\overrightarrow{\Omega} \cdot N(\overrightarrow{r_s}) < 0$.

– Condition limite d'albédo :

La condition aux limites d'albédo relie la valeur du flux sortant à celle du flux rentrant. Cette relation s'exprime par :

$$\phi(\overrightarrow{r}, V_n, \widehat{\Omega}) = \beta \phi(\overrightarrow{r}, V_n, \widehat{\Omega}') \text{ avec } \overrightarrow{\Omega} \cdot N(\overrightarrow{r_s}) < 0 \quad (1.16)$$

On a noté $\widehat{\Omega}'$ la direction de la particule sortante. L'albédo β peut prendre n'importe quelle valeur entre 0 et 1, si $\beta = 0$ alors nous sommes dans le cas de conditions de vide aux frontières. Si β prend la valeur 1, il s'agit de conditions de réflexion pure.

Le cas général correspond au cas dit de réflexion spéculaire :

$$\widehat{\Omega} \cdot N(\overrightarrow{r_s}) = -\widehat{\Omega}' \cdot N(\overrightarrow{r_s}) \text{ avec } (\widehat{\Omega} \times \widehat{\Omega}') \cdot N(\overrightarrow{r_s}) = 0 \quad (1.17)$$

– Conditions de réflexion blanche :

Elle correspond à une condition particulière de réflexion pour laquelle toutes les particules sortant de l'espace V retournent dans V avec une distribution angulaire isotrope.

On a alors :

$$\phi(\overrightarrow{r}, V_n, \widehat{\Omega}) = 4\pi \int_{\widehat{\Omega}' \cdot N(\overrightarrow{r_s}) > 0} d^2\Omega' \left[\widehat{\Omega}' \cdot N(\overrightarrow{r_s}) \right] \phi(\overrightarrow{r}, V_n, \widehat{\Omega}') \text{ avec } \widehat{\Omega} \cdot N(\overrightarrow{r_s}) < 0 \quad (1.18)$$

– Conditions de translation ou conditions aux frontières périodique :

Ce type de condition correspond au cas d'un réseau périodique où le flux sur une

frontière est égal au flux sur une autre frontière parallèle au domaine.

$$\phi(\vec{r}_s, V_n, \hat{\Omega}) = \phi(\vec{r}_s + \Delta r, V_n, \hat{\Omega}) \quad (1.19)$$

avec Δr le pas du réseau.

1.5 L'approche multigroupe

La résolution de l'équation de transport par la méthode déterministe implique un traitement spécial de la dépendance en énergie. L'approche multigroupe consiste à subdiviser le domaine d'énergie en G groupes dans lesquels les neutrons seront considérés comme monocinétiques. Les quantités dépendant de l'énergie seront ensuite condensées sur chaque groupe.

On utilise de manière courante la variable léthargie $u = \ln(E_0/E)$ sur le domaine énergétique $[0, E_0]$, de telle sorte que :

$$W_g = \{u; u_{g-1} \leq u \leq u_g\} = \{E; E_g \leq E \leq E_{g-1}\}; \quad g = 1, G \quad (1.20)$$

avec $u_g = \ln(E_0/E_g)$ et $u_0 = 0$. Ainsi le spectre d'énergie est divisé en G groupes $]E_g, E_{g-1}[$ avec $g = [1, G]$. Les groupes de plus hautes énergies se retrouvent donc en premier, $E_1 > E_2 \dots > E_G$.

On peut dès lors exprimer l'équation de transport en formalisme multi-groupe :

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = Q^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) \quad (1.21)$$

Avec désormais la relation suivante pour le terme source :

$$\begin{aligned}
Q^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) &= \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s^{g'-g'}(\vec{r}, \hat{\Omega} \leftarrow \hat{\Omega}') \phi^{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') \\
&+ \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi^{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') \\
&+ S_{ext}^g(\vec{r}, \hat{\Omega})
\end{aligned} \tag{1.22}$$

1.6 Méthode aux ordonnées discrètes

La méthode des ordonnées discrètes est très largement utilisée comme outil numérique de résolution de l'équation de transport linéaire de Boltzmann.

1.6.1 Traitement de la variable angulaire

L'idée fondamentale est de discrétiser la variable angulaire $\vec{\Omega}$ en un nombre donné de directions $\vec{\Omega}_n$ (ordonnées discrètes) auxquelles on associe des poids d'intégration w_n .

La combinaison {ordonnées discrètes, poids d'intégration} définit une quadrature angulaire. On résoud ensuite pour chaque direction la forme intégro-différentielle de l'équation de transport de Boltzmann. Pour une direction arbitraire $\vec{\Omega}_n$, celle-ci devient dès lors :

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, V_n, \vec{\Omega}_n) + \Sigma(\vec{r}, V_n) \phi(\vec{r}, V_n, \vec{\Omega}_n) = Q(\vec{r}, V_n, \vec{\Omega}_n) \tag{1.23}$$

1.6.2 Quadratures angulaires pour la méthode des ordonnées discrètes

La variable angulaire $\vec{\Omega}$ dans l'équation de transport est discrétisée en considérant un nombre fini de directions, le flux étant évalué sur chacune de ces directions. Chaque direction peut être visualisée comme un point sur la surface de la sphère unité, avec une surface associée dont la signification du point de vue mathématique est de correspondre au poids d'intégration.

C'est l'ensemble des direction discrètes et leurs poids associés qui définit une quadrature angulaire.

Une des méthodes les plus utilisées en calcul de réseau pour générer une quadrature est la technique dite à niveau symétrique dite *level-symmetric quadrature* ou LQ_n quadrature (Carlson, B.G. ; 1970). Le principe de la méthode est d'ordonner sur chaque octant de la sphère unité les directions sur $N/2$ niveaux distincts.

Les quadratures angulaires utilisées dans la méthode S_N vérifient généralement les propriétés suivantes :

- La paire $\{w_m, \widehat{\Omega}_m\}$ (respectivement poids et directions) définit la quadrature.
- Le nombre de directions M dépend de l'ordre de la quadrature n .
- L'ordre de la quadrature est paire, $n = 2, 4, 6, \dots$
- Les poids associés doivent être positifs et leur somme normalisée à 1. On doit avoir la relation suivante :

$$\sum_{n=1}^M w_n = 1 \quad (1.24)$$

- Les composantes μ_m, η_m, ξ_m du vecteur $\widehat{\Omega}_m$ vérifient la relation :

$$\mu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1 \quad (1.25)$$

– Conditions dites de flux :

$$\sum_m w_m \mu_m = 0 \quad \sum_m w_m \eta_m = 0 \quad \sum_m w_m \xi_m = 0 \quad (1.26)$$

– Condition dite de diffusion :

$$\sum_m w_m \mu_m^2 = 1/3 \quad (1.27)$$

– La quadrature est usuellement définie sur un octant (1/8 de la sphère unité) et est ensuite dépliée pour les autres octants suivant des conditions de réflexion.

Pour chaque octant, on aura ainsi les conditions suivantes :

– La quadrature doit être symétrique sur la sphère unité, de telle sorte que la solution est invariante par rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$ et par réflexion. Cela implique des conditions sur les moments d'ordre impaires des cosinus directeurs :

$$\sum_{n=1}^M w_n \mu_m^n = \sum_{n=1}^M w_n \eta_m^n = \sum_{n=1}^M w_n \xi_m^n = 0, \quad \text{pour } n \text{ impair.} \quad (1.28)$$

– Les quadratures angulaires doivent intégrer correctement les moments du flux, cette condition s'exprime par les relations suivantes sur les moments paires des cosinus directeurs :

$$\sum_{n=1}^M w_n \mu_m^n = \sum_{n=1}^M w_n \eta_m^n = \sum_{n=1}^M w_n \xi_m^n = \frac{1}{(n+1)}, \quad \text{pour } n \text{ pair.} \quad (1.29)$$

– Le nombre de directions sur chaque niveau est égal à $\frac{N}{2} - i + 1$ pour $i = 1, N/2$.

Le terme niveau symétrique signifie que les angles formés par les lignes de niveaux latitudinaux sont constants. En d'autres termes, les niveaux η (latitudes) sont constants quand μ varie.

– Dans le cas 3D, le nombre total de directions sera égal à $M = N(N+2)$, avec N l'ordre de la méthode S_N .

- Soient $\{i,j,k\}$ les indices des cosinus directeurs et N le nombre de niveaux. On a les relations suivantes : $\mu_i^2 + \eta_j^2 + \xi_k^2 = 1$ et $i + j + k = \frac{N}{2} + 2$.
- On peut démontrer par ailleurs la relation suivante :

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + (i - 1)\Delta \quad (1.30)$$

avec :

$$\Delta = \frac{2(1 - 3\mu_1^2)}{N - 2} \quad \text{pour} \quad 2 \leq i \leq N/2 \quad \text{et} \quad 0 \leq \mu_1^2 \leq 1/3 \quad (1.31)$$

On s'aperçoit que le choix de μ_1 détermine la répartition des directions dans l'octant. Pour des valeurs de μ_1 faible, les ordonnées discrètes vont être regroupées près des pôles de la sphère. A l'inverse, plus μ_1 est grand et plus les directions seront éloignées des pôles.

Les poids associés à chaque direction (point weight) sont ensuite évalués au travers d'autres équations. Par exemple, dans le cas d'une quadrature à niveaux symétriques S_8 , les conditions peuvent être formulées de la manière suivante :

$$2p_1 + 2p_2 = w_1 \quad (1.32)$$

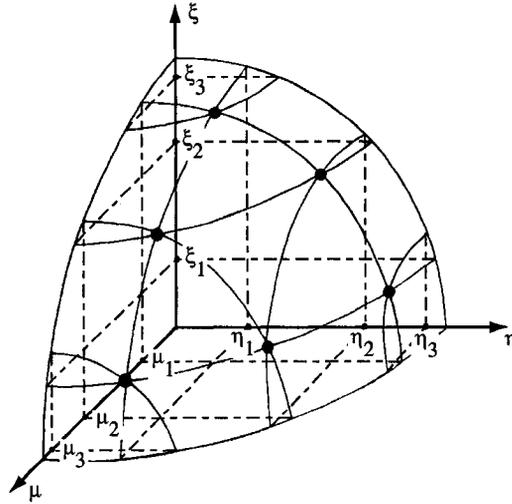
$$2p_2 + p_3 = w_2 \quad (1.33)$$

$$2p_2 = w_3 \quad (1.34)$$

$$1p_1 = w_4 \quad (1.35)$$

Avec $\{p_1, p_2, p_3, p_4\}$ les poids associés respectivement aux directions $\{1,2,3,4\}$, et $\{w_1, w_2, w_3, w_4\}$ les poids associés à chaque niveau $\{1,2,3,4\}$.

Il faut néanmoins remarquer que ce type de quadrature est restreinte par l'apparition de poids négatifs non physiques à l'ordre S_{20} .

FIG. 1.1 Quadrature à niveau symétrique S_6

1.6.3 Équation de Boltzmann en géométrie 3D cartésienne

Dans le cas particulier d'une géométrie 3D cartésienne, la direction de la particule neutre $\vec{\Omega}$ est uniquement définie par le cosinus directeur μ de l'angle polaire Ψ et par son angle azimuthal ϕ .

Dans ces conditions, l'opérateur de fuite est uniquement une distribution en $\{x, y, z, \mu, \phi\}$.

On peut ainsi l'exprimer sous la forme suivante en utilisant une dérivation en chaîne :

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} = \frac{d}{ds} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{dy}{ds} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{dz}{ds} + \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{d\mu}{ds} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{d\phi}{ds} \quad (1.36)$$

Avec ds un élément différentiel du chemin de la particule dans la direction $\hat{\Omega}$.

On a de plus les relations suivantes :

$$\frac{dx}{ds} = \mu, \quad \frac{dy}{ds} = \eta, \quad \frac{dz}{ds} = \xi \quad \text{et} \quad \frac{d\mu}{ds} = \frac{d\phi}{ds} = 0 \quad (1.37)$$

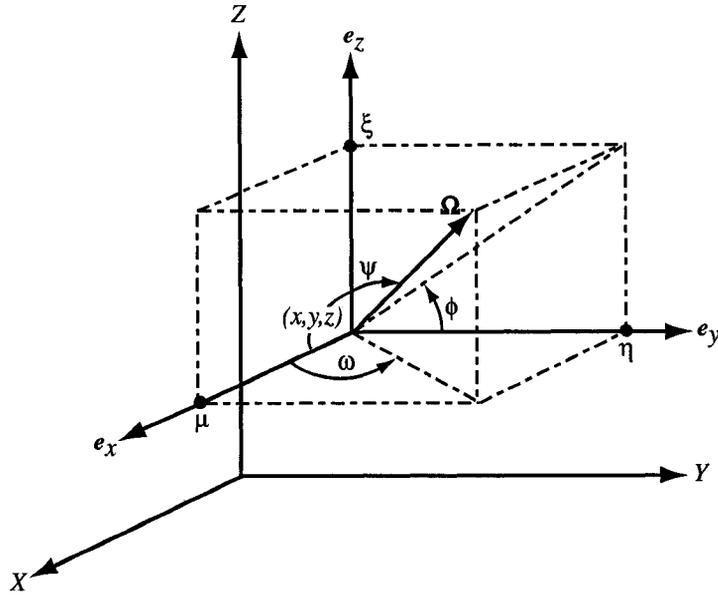


FIG. 1.2 Système de coordonnées 3D cartésien

On obtient donc pour l'opérateur de fuite :

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} = \mu \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y} + \xi \frac{\partial}{\partial z} \quad (1.38)$$

L'équation de transport de Boltzmann devient donc :

$$\left[\mu_n \frac{\partial}{\partial x} + \eta_n \frac{\partial}{\partial y} + \xi_n \frac{\partial}{\partial z} + \Sigma(x, y, z) \right] \Phi_n(x, y, z) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_l^m(x, y, z) R_l^m(\Omega_n). \quad (1.39)$$

Nous allons par la suite chercher à résoudre cette équation par des méthodes numériques.

1.6.4 Traitement de la variable spatiale : schéma aux différences finis

Le traitement des variables spatiales implique dans un premier temps une discrétisation du domaine géométrique en n cellules de calcul : $x_{1/2}, x_{3/2}, x_{i+1/2}, \dots, x_{n+1/2}$,

$y_{1/2}, y_{3/2}, y_{i+1/2}, \dots, y_{n+1/2}$,

$z_{1/2}, z_{3/2}, z_{i+1/2}, \dots, z_{n+1/2}$.

Chaque cellule aura donc comme volume $V_{i,j,k} = \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k$

Les sections efficaces sont également considérées constantes sur chaque cellule et sont notées $\Sigma_{i,j,k}$. On intègre ensuite l'équation (1.39) sur chaque cellule, puis après normalisation par rapport au volume, on obtient l'équation suivante pour les flux volumiques et surfaciques :

$$\begin{aligned} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\phi_{i+1/2,j,k} - \phi_{i-1/2,j,k}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\phi_{i,j+1/2,k} - \phi_{i,j-1/2,k}) + \\ \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\phi_{i,j,k+1/2} - \phi_{i,j,k-1/2}) + \Sigma_{i,j,k} \phi_{i,j,k} = Q_{i,j,k} \end{aligned} \quad (1.40)$$

Dans cette équation, les indices $\{i,j,k\}$ réfèrent aux valeurs volumiques, les indices $\{i \pm 1/2, j \pm 1/2, k \pm 1/2\}$ aux valeurs surfaciques aux frontières de la cellule.

Pour les méthodes S_N , différentes classes de schémas aux différences ont été développés. Le plus utilisé historiquement (Lathrop, K. ; 1969) est sans doute le schéma aux différences pondérés : les flux scalaires de chaque cellule sont pris comme étant fonction des flux surfaciques situés aux frontières de la cellule considérée. On a alors les relations suivantes :

$$\phi_{n,i,j,k} = a_{i,j,k} \phi_{n,i+1/2,j,k} + (1 - a_{i,j,k}) \phi_{n,i-1/2,j,k} \quad (1.41)$$

$$\phi_{n,i,j,k} = b_{i,j,k} \phi_{n,i,j+1/2,k} + (1 - b_{i,j,k}) \phi_{n,i,j-1/2,k} \quad (1.42)$$

$$\phi_{n,i,j,k} = c_{i,j,k} \phi_{n,i,j,k+1/2} + (1 - c_{i,j,k}) \phi_{n,i,j,k-1/2} \quad (1.43)$$

Les termes {a,b,c} sont alors des facteurs de pondérations et déterminent le schéma d'intégration choisi. Dans le cas particulier où $\{a, b, c\} = \{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$, on obtient le *schéma aux différences diamants*. On l'appelle également schéma aux différences linéaires. Dans ce cas précis, le flux angulaire étant la moyenne des flux aux frontières, la variation du flux dans chaque cellule est supposée linéaire. Les relations suivantes apparaissent :

$$\phi_{n,i,j,k} = \frac{1}{2}(\phi_{n,i+1/2,j,k} + \phi_{n,i-1/2,j,k}) \quad (1.44)$$

$$\phi_{n,i,j,k} = \frac{1}{2}(\phi_{n,i,j+1/2,k} + \phi_{n,i,j-1/2,k}) \quad (1.45)$$

$$\phi_{n,i,j,k} = \frac{1}{2}(\phi_{n,i,j,k+1/2} + \phi_{n,i,j,k-1/2}) \quad (1.46)$$

On peut ensuite éliminer les flux sortants dans l'équation principale et obtenir les flux angulaires centrés dans la cellule {i,j,k} :

$$\phi_{n,i,j,k} = \frac{\frac{2\mu_n}{\Delta x_i} \phi_{n,i-1/2,j,k} + \frac{2\eta_n}{\Delta y_j} \phi_{n,i,j-1/2,k} + \frac{2\xi_n}{\Delta z_k} \phi_{n,i,j,k-1/2} + Q_{n,i,j,k}}{\Sigma_{n,i,j,k} + \frac{2\mu_n}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_n}{\Delta y_j} + \frac{2\xi_n}{\Delta z_k}} \quad (1.47)$$

Par la suite, pour une direction donnée avec $\mu_n > 0$, $\eta_n > 0$ et $\xi_n > 0$, les flux sortant sont évalués aux travers des équation suivantes :

$$\phi_{n,i+1/2,j,k} = 2\phi_{n,i,j,k} - \phi_{n,i,j-1/2,k} \quad (1.48)$$

$$\phi_{n,i,j+1/2,k} = 2\phi_{n,i,j,k} - \phi_{n,i,j-1/2,k} \quad (1.49)$$

$$\phi_{n,i,j,k+1/2} = 2\phi_{n,i,j,k} - \phi_{n,i,j,k-1/2} \quad (1.50)$$

Un des problèmes majeurs est que le schéma aux différences linéaires peut conduire à des flux angulaires négatifs non physiques pour des régions où le gradient de flux est important, et ce bien que les flux entrants ainsi que les termes de source soient positifs.

Pour remédier à ce problème, l'approche la plus utilisée est de fixer les flux négatifs à zéro, et de recalculer le flux dans la cellule en conservant le bilan de neutrons. C'est l'approche dite de *negative flux fixup*. Cela permet de palier à l'apparition de flux négatifs, cependant la linéarité du schéma diamant est perdue, d'où une perte en terme de cohérence mathématique dans la méthode ainsi qu'en terme de précision dans les calculs.

1.6.5 Stratégie de résolution

La résolution de l'équation de transport par la méthode des ordonnées discrètes implique un calcul itératif sur les termes de source (itération sur la source, dites également itération de scattering).

Le principe de cette méthode est de fixer dans la première itération les termes de source, puis ensuite d'appliquer une stratégie de balayage des domaines angulaires et spatiaux prenant en compte les conditions aux limites.

Les valeurs du flux angulaires récupérées ainsi servent à calculer les moments de Legendre du flux, qui à leur tour permettent de déterminer les termes de source pour l'itération suivante. Le processus itératif continue jusqu'à ce qu'un critère de convergence fixé soit atteint. Généralement, le critère de convergence est :

$$\frac{\|\phi_{i+1} - \phi_i\|_\infty}{\|\phi_i\|_\infty} \leq 10^{-5} \quad (1.51)$$

Le processus complet de résolution du problème de transport nécessite ensuite un calcul itératif sur les groupes d'énergie, et éventuellement dans le cadre d'un problème à k_{eff} , un calcul itératif sur la valeur propre. Ces schémas de calculs sont communs aux autres méthodes de résolution, nous ne les décrivons pas dans ce travail.

Par ailleurs, le processus itératif sur le calcul de la source est connu pour présenter des problèmes de convergence pour des milieux très fortement diffusifs et optiquement épais

(Alcouffe, R.E. ; 1977), c'est-à-dire pour lesquels $\frac{\Sigma_s}{\Sigma} \simeq 1$, avec Σ_s section efficace de diffusion, et Σ la section efficace totale. De nombreuses méthodes d'accélération de la convergence ont été développées pour palier à ce problème (M.L. Adams & E.W. Larsen ; 2002), en particulier la technique dite d'accélération synthétique, mathématiquement équivalente à un préconditionnement à gauche comme nous le développerons par la suite.

1.6.6 Accélération synthétique de la convergence

La méthode synthétique pour accélérer la convergence du processus itératif de résolution de l'équation de transport a été formalisée aux débuts des années 60 par Kopp. L'idée de base est d'utiliser un opérateur de transport d'ordre inférieur comme *préconditionneur* afin d'accélérer la résolution numérique de l'équation de transport. Les méthodes utilisant les opérateurs S_2 ou S_4 ont montré rapidement leurs limites en terme de stabilité. C'est pourquoi Alcouffe proposa en 1977 un schéma synthétique d'accélération basé sur l'approximation de la diffusion et connu sous le nom de *diffusion synthetic acceleration*, qui s'est très rapidement imposé comme une des meilleures méthodes d'accélération synthétique pour la résolution de l'équation de transport par la méthode S_N .

Le principe de la méthode DSA est :

- Effectuer une première itération sur la source.
- Utiliser une approximation de la diffusion pour estimer l'erreur dans l'itération sur les flux.
- Cette estimation est ensuite utilisée pour améliorer le résultat de l'itération.

La distribution en particules de la source est dans un premier temps écrite en terme du taux de réaction du groupe d'énergie dans lui-même :

$$Q(\vec{r}, \widehat{\Omega}_n) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \left[\Sigma_{s,l}(\vec{r}) \phi_l^m(\vec{r}) + Q_l^{*m}(\vec{r}) R_l^m(\widehat{\Omega}_n) \right] \quad (1.52)$$

Avec :

- $\Sigma_{s,l}(\vec{r})$ l -ième moment de Legendre de la section efficace macroscopique de diffusion du groupe dans lui-même.
- ϕ_l^m moment harmonique sphérique du flux.
- $Q_l^{*m}(\vec{r})$ moment harmonique sphérique de la source représentant les contributions des autres groupes ainsi que la fission.

Le schéma DSA correspond au processus suivant. Si l'on considère l'itération sur la source à l'index arbitraire κ :

(1)

$$\begin{aligned} \widehat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^{(\kappa+1)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}) \phi^{(\kappa+1)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) = \\ \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \left[\Sigma_{s,l}(\vec{r}) \phi_l^{m,(\kappa)} + Q_l^{*m}(\vec{r}) \right] R_l^m(\Omega_n). \end{aligned} \quad (1.53)$$

Itération sur la source à l'index arbitraire $\kappa + \frac{1}{2}$:

(2)

$$\begin{aligned} \widehat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^{(\kappa+1/2)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}) \phi^{(\kappa+1/2)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) = \\ \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \left[\Sigma_{s,l}(\vec{r}) \phi_l^{m,(\kappa+1/2)} + Q_l^{*m}(\vec{r}) \right] R_l^m(\Omega_n). \end{aligned} \quad (1.54)$$

On pose :

$$\delta \phi^{(\kappa+1/2)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) = \phi^{(\kappa+1)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) - \phi^{(\kappa+1/2)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) \quad (1.55)$$

En faisant la différence des deux équations précédentes, on obtient le schéma DSA :

$$\begin{aligned}
& \widehat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \delta\phi^{(\kappa+1/2)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r})\delta\phi^{(\kappa+1/2)}(\vec{r}, \widehat{\Omega}) - \\
& \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \Sigma_{s,l}(\vec{r}) \delta\phi_l^{m,(\kappa+1/2)} R_l^m(\Omega_n) = \\
& \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \Sigma_{s,l}(\vec{r}) [\phi_l^{m,(\kappa+1/2)} - \phi_l^{m,(\kappa)}] R_l^m(\Omega_n) \quad (1.56)
\end{aligned}$$

Le schéma précédent mène à la solution convergée en une seule itération, à condition que l'équation obtenue soit résolvable. Le problème est que justement cette équation est équivalente en terme de difficulté de résolution à l'équation de transport initiale. L'approche proposée par Alcouffe a donc été de remplacer cette équation par son approximation en théorie de la diffusion. Le schéma ainsi obtenu est inconditionnellement stable à condition que l'opérateur de discrétisation spatial de la diffusion soit cohérent avec l'opérateur de discrétisation spatial de la méthode S_N . L'équation précédente devient dès lors en théorie P_1 :

$$\begin{aligned}
& -\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{3\Sigma(\vec{r})} \vec{\nabla} \delta\phi^{\kappa+1/2}(\vec{r}) + [\Sigma(\vec{r}) - \Sigma_{s,0}(\vec{r})] \delta\phi^{\kappa+1/2}(\vec{r}) = \\
& \Sigma_{s,0}(\vec{r}) [\phi_0^{0,(\kappa+1/2)}(\vec{r}) - \phi_0^{0,(\kappa)}(\vec{r})] \quad (1.57)
\end{aligned}$$

Les moments harmoniques sphériques du flux étant pour $m = l = 0$ à l'itération $\kappa + 1$:

$$\delta\phi_0^{0,(\kappa+1/2)}(\vec{r}) = \phi_0^{0,(\kappa+1)}(\vec{r}) - \phi_0^{0,(\kappa+1/2)}(\vec{r}) \quad (1.58)$$

On doit par ailleurs accélérer les flux aux frontières dans le cas de conditions autre que vide, en utilisant la même approche que pour les flux angulaires. Le DSA est appliqué de manière isotrope sur chaque point frontière r_s pour chaque moment angulaire n , en utilisant la relation :

$$\phi_n^{\kappa+1}(r_s) = \phi_n^{\kappa+\frac{1}{2}}(r_s) + \frac{1}{4\pi} \delta\phi^{\kappa+\frac{1}{2}}(r_s) \quad (1.59)$$

Dans notre étude, nous avons utilisé le schéma DSA pour accélérer notre méthode S_N à ordre élevé, nous y reviendrons dans le chapitre 2. En effet, la méthode DSA est connue pour être très efficace avec le schéma diamant, à condition que les discrétisations spatiales des deux formalismes soient cohérentes. Dans notre cas, une approximation de la diffusion compatible avec le formalisme S_N consiste à utiliser une approximation P_1 du flux et à utiliser une méthode des éléments finis de type Raviart-Thomas (Hébert, A. ; 1993) avec une intégration de type Gauss-Legendre des matrices d'assemblages.

1.6.7 Méthode de Krylov appliquée au formalisme S_N

Bien que le schéma DSA soit connu pour être inconditionnellement stable pourvu que l'équation de diffusion soit discrétisée de manière cohérente et que le milieu soit isotrope, voire faiblement anisotrope, l'efficacité du DSA peut être très largement dégradé dans le cas de problèmes multidimensionnels présentant des fortes hétérogénéités (Warsa, J.S et al. ; 2003). Cette défaillance peut être surmontée en utilisant les méthodes de résolution itératives basées sur les sous-espaces de Krylov pour résoudre le système obtenu. En effet, il est intéressant de remarquer que le schéma DSA tel qu'introduit précédemment est équivalent à un préconditionnement à gauche de la méthode S_N (Patton, B. W. ; 1996). En écrivant les relations définies précédemment sous forme matricielle, on obtient :

$$\mathbb{D}\delta\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} = \mathbb{E}(\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} - \Phi^{(\kappa)}) \quad (1.60)$$

Avec Φ et $\delta\Phi$ les vecteurs colonnes contenant respectivement toutes les composantes harmoniques sphériques du flux et les termes correctifs.

$$\Phi^{(\kappa+1)} = \Phi^{(\kappa)} + \mathbb{P}(\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} - \Phi^{(\kappa)}) \quad (1.61)$$

Avec :

$$\mathbb{P} = \mathbb{I} + \mathbb{D}^{-1}\mathbb{E}. \quad (1.62)$$

L'équation (1.62) est de type récursive, préconditionnée et à point fixe. A ce titre, elle est directement éligible à une procédure d'accélération basée sur une minimisation de son résidu. Le formalisme GMRES (Saad et al. ; 1986), pour *General Minimal RESidual*, est largement utilisé dans le cadre des méthode aux ordonnées discrètes. La méthode GMRES utilisée dans le cadre des méthodes S_N dans DRAGON Version 4 est basée sur l'approche suivante : on introduit d'abord un facteur d'accélération dynamique $\mu^{(k)}$ dans l'équation (1.61) :

$$\Phi^{(\kappa+1)} = \Phi^{(\kappa)} + \mu^{(k)}\mathbb{P}(\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} - \Phi^{(\kappa)}) \quad (1.63)$$

Le but de l'algorithme est de minimiser la norme L^2 du résidu $R^{(\kappa+1)}$ à l'itération suivante. On réécrit l'équation (1.54) sous forme matricielle :

$$\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} = \mathbb{W}\Phi^{(\kappa)} + S \quad (1.64)$$

Le résidu correspondant est alors :

$$R^{(\kappa)} = \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi^{(\kappa)} + S - \Phi^{(\kappa)}) = \mathbb{P}(\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} - \Phi^{(\kappa)}) \quad (1.65)$$

A l'itération suivante, le résidu devient :

$$\begin{aligned} R^{(\kappa+1)} &= \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi^{(\kappa+1)} + S - \Phi^{(\kappa)}) & (1.66) \\ &= \mathbb{P} \left[(\mathbb{W}\Phi^{(\kappa)} + \mu^{(k)}\mathbb{W}\mathbb{P}(\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} - \Phi^{(\kappa)}) + S - \Phi^{(\kappa)} - \mu^{(k)}\mathbb{P}(\Phi^{(\kappa+\frac{1}{2})} - \Phi^{(\kappa)}) \right] \\ &= R^{(\kappa)} + \mu^{(k)}\mathbb{P}(\mathbb{W} - \mathbb{I})R^{(\kappa)} \end{aligned}$$

La norme L^2 du résidu est minimale si l'on a :

$$\frac{d}{d\mu^{(\kappa)}} \langle R^{(\kappa+1)}, R^{(\kappa+1)} \rangle = 0 \quad (1.67)$$

Donc, d'après l'équation obtenue précédemment, on obtient :

$$\mu^{(\kappa)} = - \frac{\langle R^{(\kappa+1)}, \mathbb{P}(\mathbb{W} - \mathbb{I})R^{(\kappa)} \rangle}{\langle \mathbb{P}(\mathbb{W} - \mathbb{I})R^{(\kappa)}, \mathbb{P}(\mathbb{W} - \mathbb{I})R^{(\kappa)} \rangle}. \quad (1.68)$$

Le paramètre $\mu^{(\kappa)}$ est ainsi calculé dynamiquement, comme une fonction du résidu. Une technique utile de calcul de $\mu^{(\kappa)}$ est de considérer la valeur de $\Phi^{(\kappa)}$ à l'itération (κ) et de réaliser deux itérations libres (une préconditionnée et une non accélérée). On obtient alors trois itérations successives :

$$\Phi_0 = \Phi^{(\kappa)} \quad (1.69)$$

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi_0 + S - \Phi_0) \quad (1.70)$$

$$\Phi_2 = \Phi_1 + \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi_1 + S - \Phi_1) \quad (1.71)$$

De tel sorte que les vecteurs erreurs e_0 et e_1 peuvent être définis tels que :

$$e_0 = \Phi_1 - \Phi_0 = \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi_0 + S - \Phi_0) = R^{(\kappa)} \quad (1.72)$$

$$e_1 = \Phi_2 - \Phi_1 = \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi_1 + S - \Phi_1) \quad (1.73)$$

Et de plus :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathbb{W} - \mathbb{I})R^{(\kappa)} &= \mathbb{P}[\mathbb{W}(\Phi_1 - \Phi_0) - (\Phi_1 - \Phi_0)] \\ &= \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi_1 + S - \Phi_1) - \mathbb{P}(\mathbb{W}\Phi_0 + S - \Phi_0) \\ &= e_1 - e_0. \end{aligned} \quad (1.74)$$

On obtient ainsi une expression simplifiée pour $\mu^{(\kappa)}$:

$$\mu^{(\kappa)} = -\frac{\langle e_0, e_1 - e_0 \rangle}{\langle e_1 - e_0, e_1 - e_0 \rangle} \quad (1.75)$$

L'itération $\kappa + 1$ accélérée devient alors :

$$\Phi^{(\kappa+1)} = \Phi^{(\kappa)} + \mu^{(\kappa)} R^{(\kappa)} = \mu^{(\kappa)} \Phi_1 + (1 - \mu^{(\kappa)}) \Phi_0 \quad (1.76)$$

A ce moment précis, nous avons besoin de trois nouvelles itérations libres, on pose donc :

$$\tilde{\Phi}_0 = \Phi^{(\kappa)} \quad (1.77)$$

$$\tilde{\Phi}_1 = \tilde{\Phi}_0 + \mathbb{P}(\mathbb{W}\tilde{\Phi}_0 + S - \tilde{\Phi}_0) = \mu^{(\kappa)} \Phi_2 + (1 - \mu^{(\kappa)}) \Phi_1$$

$$\tilde{\Phi}_2 = \tilde{\Phi}_1 + \mathbb{P}(\mathbb{W}\tilde{\Phi}_1 + S - \tilde{\Phi}_1)$$

et l'on continue ainsi de suite jusqu'à convergence des calculs.

CHAPITRE 2

MÉTHODE S_N À ORDRES ÉLEVÉS EN GÉOMÉTRIE 3D CARTÉSIENNE

2.1 Théorie

2.1.1 Équation de Boltzmann en géométrie 3D cartésienne

Le comportement quasi-statique d'une population de particules neutres peut être modélisé par la forme du premier ordre de l'équation de Boltzmann. On considère ici la forme monocinétique, résultant de l'approche multi-groupe. En omettant l'index g issu de cette discrétisation, l'équation de Boltzmann se simplifie en :

$$\widehat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \widehat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \widehat{\Omega}) = Q(\vec{r}, \widehat{\Omega}) \quad (2.1)$$

avec :

- $\phi(\vec{r}, \widehat{\Omega})$ flux angulaire des particules, correspondant au produit de la densité de population des particules par leur vitesse ;
- $\Sigma(\vec{r})$ section efficace macroscopique ;
- $Q(\vec{r}, \widehat{\Omega})$ distribution en particules de la source.

Le système de coordonnées 3D cartésiennes est montré à la figure (2.1). La particule est localisée à la position (x, y, z) , correspondant à l'origine du système de coordonnées. La direction de la particule $\widehat{\Omega}$ est définie par le cosinus directeur μ , l'angle polaire Φ et par l'angle azimutal ϕ . Le terme de fuite est donc une distribution des variables x, y, z, μ, Φ et ϕ , on peut donc l'écrire :

$$\widehat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} = \mu \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y} + \xi \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.2)$$

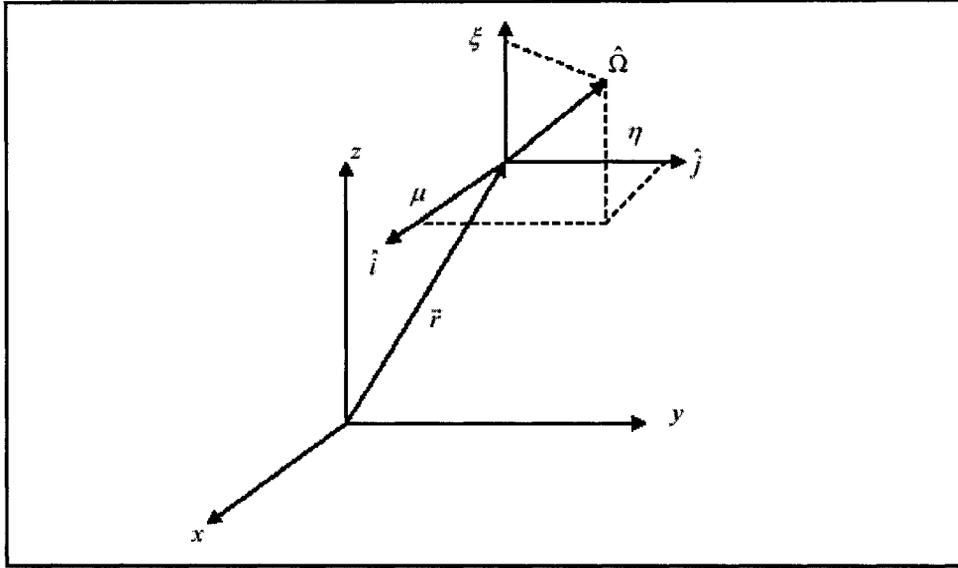


FIG. 2.1 Système de coordonnées en géométrie 3D cartésienne

Après discrétisation des variables angulaires, on obtient comme formulation de la forme linéaire de l'équation de transport de Boltzmann :

$$\left[\mu_n \frac{\partial}{\partial x} + \eta_n \frac{\partial}{\partial y} + \xi_n \frac{\partial}{\partial z} + \Sigma(x, y, z) \right] \Phi_n(x, y, z) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_l^m(x, y, z) R_l^m(\Omega_n). \quad (2.3)$$

avec $\Phi_n(x, y, z) = \Phi(x, y, z, \mu_n, \eta_n, \xi_n)$, le terme de source étant écrit sous sa forme en expansion d'harmoniques sphériques. Les moments harmoniques sphériques du flux sont approximés :

$$\Phi_l^m(x, y, z) = \sum_{n=1}^{N(N+2)} W_n \Phi_n(x, y, z) R_l^m(\mu_n, \eta_n, \xi_n) \quad (2.4)$$

$N(N+2)$ correspondant au nombre total de directions (ordonnées discrètes).

2.1.2 Intégration de la variable angulaire

Si l'on considère une quadrature angulaire à niveau symétrique d'ordre N , l'intégration de la variable angulaire doit se faire sur $N(N + 2)$ directions, correspondant au nombre total de directions dans la sphère unité. La présentation des quadratures LQ_n utilisées dans le traitement de la variable angulaire a déjà été réalisée dans le chapitre 1, nous ne reviendrons pas sur ce sujet.

2.1.3 Intégration de la variable spatiale

On procède dans un premier temps à la discrétisation spatiale de notre géométrie. Le domaine est ainsi divisé en parallélépipèdes de coordonnées $\{i,j,k\}$, les sections efficaces étant gardées constantes dans chaque sous-domaine.

Les dimensions de chaque cellule sont donc :

$$\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}.$$

$$\Delta y_j = y_{j+1/2} - y_{j-1/2}.$$

$$\Delta z_k = z_{k+1/2} - z_{k-1/2}.$$

Pour un volume pour chaque sous-domaine de :

$$V_{i,j,k} = \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k$$

On introduit ensuite un changement de variables en posant :

$$\begin{aligned}
u &= \frac{1}{\Delta x_i} \left[x - \frac{1}{2}(x_{i-1/2} + x_{i+1/2}) \right], \\
v &= \frac{1}{\Delta y_i} \left[y - \frac{1}{2}(y_{i-1/2} + y_{i+1/2}) \right], \\
w &= \frac{1}{\Delta z_i} \left[z - \frac{1}{2}(z_{i-1/2} + z_{i+1/2}) \right].
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Dans la région (i,j,k), l'équation de transport de Boltzmann devient alors :

$$\left[\frac{\mu_n}{\Delta x_i} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} \frac{\partial}{\partial w} + \Sigma_{i,j,k} \right] \Phi_{n,i,j,k}(u, v, w) = Q_{n,i,j,k}(u, v, w) \tag{2.6}$$

Les composantes du terme de source sont désormais :

$$Q_{n,i,j,k}(u, v, w) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_{l,i,j,k}^m(u, v, w) R_l^m(\mu_n, \eta_n, \xi_n) \tag{2.7}$$

On développe les variables dépendantes en terme des polynômes $P_\alpha(u)$, $P_\beta(v)$ et $P_\gamma(w)$.

On peut réécrire les termes de flux et de source en fonction de l'ordre M d'expansion spatiale des polynômes de Legendre :

$$\Phi_{n,i,j,k}(u, v, w) = \sum_{\alpha=0}^M \sum_{\beta=0}^M \sum_{\gamma=0}^M P_\alpha(u) P_\beta(v) P_\gamma(w) \Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)} \tag{2.8}$$

$$Q_{l,i,j,k}(u, v, w) = \sum_{\alpha=0}^M \sum_{\beta=0}^M \sum_{\gamma=0}^M P_\alpha(u) P_\beta(v) P_\gamma(w) Q_{l,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)} \tag{2.9}$$

On a introduit la notation suivante pour les moments des flux et de la source :

$$\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)} = \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \Phi_{n,i,j,k}(u, v, w) \quad (2.10)$$

et :

$$Q_{l,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)} = \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) Q_{l,i,j,k}(u, v, w) \quad (2.11)$$

L'étape suivante de notre procédure de discrétisation est de multiplier l'équation (2.6) par les polynômes normalisés de Legendre.

pour $0 \leq \alpha \leq M$, $0 \leq \beta \leq M$, $0 \leq \gamma \leq M$, on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{\mu_n}{\Delta x_i} \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \frac{\partial \Phi_{n,i,j,k}}{\partial u}(u, v, w) + \\ & \frac{\eta_n}{\Delta y_j} \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \frac{\partial \Phi_{n,i,j,k}}{\partial v}(u, v, w) + \\ & \frac{\xi_n}{\Delta z_k} \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \frac{\partial \Phi_{n,i,j,k}}{\partial w}(u, v, w) + \\ & \Sigma_{n,i,j,k} \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \Phi_{n,i,j,k}(u, v, w) = \\ & \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) Q_{n,i,j,k}(u, v, w). \end{aligned} \quad (2.12)$$

On utilise les notations suivantes pour les moments des flux aux frontières de la cellule :

$$\Phi_{n,i\pm 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)} = \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \Phi_{n,i,j,k}(\pm 1/2, v, w) \quad (2.13)$$

$$\Phi_{n,i,j\pm 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)} = \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dw P_\gamma(w) \Phi_{n,i,j,k}(u, \pm 1/2, w) \quad (2.14)$$

$$\Phi_{n,i,j,k \pm i/2}^{(\alpha,*,\beta)} = \int_{-1/2}^{1/2} du P_\alpha(u) \int_{-1/2}^{1/2} dv P_\beta(v) \Phi_{n,i,j,k}(u, v, \pm 1/2) \quad (2.15)$$

On intègre maintenant l'équation obtenue sur chaque région $\{i,j,k\}$ pour $M = 2$, soit $0 \leq \alpha \leq 2$, $0 \leq \beta \leq 2$, $0 \leq \gamma \leq 2$; afin d'obtenir les équations correspondant aux ordres linéaire (M=0), parabolique (M=1) et cubique (M=2) :

(1)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,0)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,0)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,0)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,0)}) + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,0,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,0,*)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,0,0)}$$

(2)

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,0)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,0)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,0)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,0)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,0)}) + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,0,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,0,*)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,0,0)}$$

(3)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,0)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,0)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,0)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,0)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,0)}) + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,1,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,1,*)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,1,0)}$$

(4)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,1)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,1)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,1)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,1)}) + \sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,0,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,0,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,0,1)}$$

(5)

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,0)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,0)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,0)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,0)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,0)}) + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,0,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,0,*)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,0,0)}$$

(6)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,0)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,0)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,0)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,0)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,0)}) + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,2,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,2,*)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,2,0)}$$

(7)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,2)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,2)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,2)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,2)}) + \sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,0,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,0,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,1)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,0,2)}$$

(8)

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,0)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,0)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,0)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,0)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,0)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,0)}) +$$

$$\frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,1,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,1,*)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,1,0)},$$

(9)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,1)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,1)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,1)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,1)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,1,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,1,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,1,1)},$$

(10)

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,1)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,1)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,0)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,1)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,0,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,0,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,0,1)},$$

(11)

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,1)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,1)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,1)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,1)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,1)} - 2\Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,0,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,1,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,1,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,1,1)},$$

(12)

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,0)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,0)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,0)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,0)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,0)} -$$

$$2\Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,0,0)}) + \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,1,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,1,*)}) +$$

$$\Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,1,0)},$$

(13)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,1)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,1)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,1)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,1)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,2,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,2,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,2,1)},$$

(14)

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,2)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,2)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,2)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,2)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,2)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,1,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,1,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,1)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,1,2)},$$

(15)

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,1)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,1)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,1)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,1)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,0,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,0,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,0,1)},$$

(16)

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,2)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,2)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,0,2)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,2)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,2)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,0,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,0,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,1)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,0,2)}, \quad (17)$$

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,0)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,0)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,0)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,0)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,0)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,0)}) +$$

$$\frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,2,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,2,*)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,2,0)}, \quad (18)$$

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,1)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,1)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,1)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,1)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,1)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,1,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,1,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,0)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,1,1)}, \quad (19)$$

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,1)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,1)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,1)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,1)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,1)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,2,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,2,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,0)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,2,1)}, \quad (20)$$

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,2)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,2)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,2)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,2)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,2)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,1)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,1,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,1,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,1)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,1,2)}, \quad (21)$$

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,0)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,0)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,0)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,0)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,0)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,0)}) +$$

$$\frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,2,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,2,*)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,2,0)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,2,0)}, \quad (22)$$

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,2)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,2)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(0,*,2)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(0,*,2)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(0,1,2)}) +$$

$$\frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(0,2,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(0,2,*)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(0,2,2)}, \quad (23)$$

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,0,2)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,0,2)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,0,2)}) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,2)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,2)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,0,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,0,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,1)}) + \sum_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,0,2)}, \quad (24)$$

$$\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,2)} + \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,2)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,2,2)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(1,*,2)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,2)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,2)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(1,2,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(1,2,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,2)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(1,2,2)}$$

(25)

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,1,2)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,1,2)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,1,2)}) + \sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,2)} + \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(1,*,2)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(2,0,2)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,1,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,1,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,1)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,1,2)}$$

(26)

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,1)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,1)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,1)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,1)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,1)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,1)}) +$$

$$\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,2,*)} + \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,2,*)} - 2\Phi_{n,i,j,k}^{(2,2,0)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,2,1)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,2,1)}$$

(27)

$$\sqrt{5} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,2,2)} - \Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,2,2)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,2,2)}) + \sqrt{5} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\Phi_{n,i,j+1/2,k}^{(2,*,2)} - \Phi_{n,i,j-1/2,k}^{(2,*,2)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,1,2)}) +$$

$$\sqrt{5} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} (\Phi_{n,i,j,k+1/2}^{(2,2,*)} - \Phi_{n,i,j,k-1/2}^{(2,2,*)} - 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,2,1)}) + \Sigma_{n,i,j,k} \Phi_{n,i,j,k}^{(2,2,2)} = Q_{n,i,j,k}^{(2,2,2)}$$

Les composantes discrètes de la source sont écrites en fonction des moments de Legendre :

$$Q_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)} = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l Q_{l,i,j,k}^{(m,\alpha,\beta,\gamma)} R_l^m(\mu_n, \eta_n, \xi_n)$$

Les relations (1)-(27) sont des relations exactes résultant de l'intégration de l'équation (2.6) sur chaque sous-domaine avec $M = 2$.

Les $(M + 1)^3$ relations obtenues comportent $(M + 1)^3$ inconnues pour les flux scalaires $\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)}$ et $(M + 1)^3$ inconnues pour les flux surfaciques $\Phi_{n,i\pm 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)}$, $\Phi_{n,i,j\pm 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)}$, $\Phi_{n,i,j,k\pm 1/2}^{(\alpha,\beta,*)}$, pour chaque région.

Pour fermer le système, on doit introduire $(M + 1)^3$ nouvelles équations. On introduit alors les schémas diamants d'ordre élevé, à partir d'une généralisation à n'importe quel

ordre M du schéma diamant classique.

Pour ce faire, on doit écrire $\Phi_{n,i+1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)}$ en terme de $\Phi_{n,i-1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)}$ et des moments $\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)}$ de telle sorte que l'on annule le terme d'ordre $(M+1)$.

Les relations *aux différences diamant* d'ordre M sont :

$$\Phi_{n,i\mp 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)} = \begin{cases} 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,\beta,\gamma)} - \Phi_{n,i\pm 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)} & \text{si } M = 0 \\ \Phi_{n,i\pm 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)} \mp 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(1,\beta,\gamma)} & \text{si } M = 1 \\ 2\Phi_{n,i,j,k}^{(0,\beta,\gamma)} + 2\sqrt{5}\Phi_{n,i,j,k}^{(2,\beta,\gamma)} - \Phi_{n,i\pm 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)} & \text{si } M = 2 \end{cases}$$

$$\Phi_{n,i,j\mp 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)} = \begin{cases} 2\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,0,\gamma)} - \Phi_{n,i,j\pm 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)} & \text{si } M = 0 \\ \Phi_{n,i,j\pm 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)} \mp 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,1,\gamma)} & \text{si } M = 1 \\ 2\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,0,\gamma)} + 2\sqrt{5}\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,2,\gamma)} - \Phi_{n,i,j\pm 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)} & \text{si } M = 2 \end{cases}$$

$$\Phi_{n,i,j,k\mp 1/2}^{(\alpha,\beta,*)} = \begin{cases} 2\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,0)} - \Phi_{n,i,j,k\pm 1/2}^{(\alpha,\beta,*)} & \text{si } M = 0 \\ \Phi_{n,i,j,k\pm 1/2}^{(\alpha,\beta,*)} \mp 2\sqrt{3}\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,*)} & \text{si } M = 1 \\ 2\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,0)} + 2\sqrt{5}\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,2)} - \Phi_{n,i,j,k\pm 1/2}^{(\alpha,\beta,*)} & \text{si } M = 2 \end{cases}$$

On utilise le signe du dessus dans le cas où respectivement $\mu_n \leq 0$, $\eta_n \leq 0$, $\xi_n \leq 0$ et celui du dessous pour $\mu_n \geq 0$, $\eta_n \geq 0$, $\xi_n \geq 0$.

2.1.4 Stratégie de résolution

En juxtaposant au sein du vecteur flux inconnu les inconnus scalaires et surfaciques, on obtient le système suivant à résoudre :

$$\vec{\Phi}_{n,i,j,k} = \mathbb{S}_{n,i,j,k}^{-1} \vec{Q}_{n,i,j,k}$$

Avec :

- $\vec{\Phi}_{n,i,j,k}$ vecteur flux inconnu contenant les composantes scalaires ($\Phi_{n,i,j,k}^{(\alpha,\beta,\gamma)}$) et surfaciques ($\Phi_{n,i\pm 1/2,j,k}^{(*,\beta,\gamma)}$, $\Phi_{n,i,j\pm 1/2,k}^{(\alpha,*,\gamma)}$, $\Phi_{n,i,j,k\pm 1/2}^{(\alpha,\beta,*)}$).
- $\mathbb{S}_{n,i,j,k}$ matrice de dimension $(M+1)^3 \times (M+1)^3$ contenant les composantes spatiales et angulaires de l'opérateur de transport.
- $\vec{Q}_{n,i,j,k}$ vecteur contenant les termes sources.

- Cas linéaire (M=0).

La matrice $\mathbb{S}_{n,i,j,k}$ se réduit dans ce cas-ci à un scalaire :

$$\mathbb{S}_{n,i,j,k} = \left[\Sigma_{i,j,k} + \frac{2|\mu_n|}{\Delta x_i} + \frac{2|\eta_n|}{\Delta y_j} + \frac{2|\xi_n|}{\Delta z_k} \right]$$

Avec comme terme de source :

$$\vec{Q}_{n,i,j,k} = \left[Q_{n,i,j,k}^{(0,0,0)} + \frac{2\mu_n}{\Delta x_i} \Phi_{n,i-j,k}^{(*,0,0)} + \frac{2\eta_n}{\Delta y_j} \Phi_{n,i,j-k}^{(0,*,0)} + \frac{2\xi_n}{\Delta z_k} \Phi_{n,i,j,k-}^{(0,0,*)} \right]$$

On note que l'on retrouve le schéma diamant classique tel que présenté au chapitre 1.

– Cas parabolique (M=1) .

La matrice $S_{n,i,j,k}$ s'écrit désormais :

$$S_{n,i,j,k} = \begin{bmatrix} \Sigma_{i,j,k} & 2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & 2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & 2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & \dots \\ -2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & 0 & 0 & \dots \\ -2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & 0 & \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & 0 & \dots \\ -2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & 0 & 0 & \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & \dots \\ 0 & -2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & -2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & 0 & \dots \\ 0 & -2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & 0 & -2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & \dots \\ 0 & 0 & -2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & -2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & 2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & 0 & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & 2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & 0 & 0 \\ \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\mu_n}{\Delta x_i} + 6\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} \\ 0 & \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\mu_n}{\Delta x_i} + 6\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & 0 & 0 & 2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} \\ 0 & 0 & \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\eta_n}{\Delta y_j} + 6\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & 0 & 2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} \\ -2\sqrt{3}\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & -2\sqrt{3}\frac{\eta_n}{\Delta y_j} & -2\sqrt{3}\frac{\mu_n}{\Delta x_i} & \Sigma_{i,j,k} + 6\frac{\mu_n}{\Delta x_i} + 6\frac{\eta_n}{\Delta y_j} + 6\frac{\xi_n}{\Delta z_k} & \dots \end{bmatrix}$$

Le terme de source s'écrivant dans ce cas :

$$\vec{Q}_{n,i,j,k} = \left[\begin{array}{c} Q_{n,i,j,k}^{(0,0,0)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(1,0,0)} - 2\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} \Phi_{n,i-j,k}^{(*,0,0)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(0,1,0)} - 2\sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} \Phi_{n,i,j-k}^{(0,*,0)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(0,0,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} \Phi_{n,i,j,k-}^{(0,0,*)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(1,1,0)} - 2\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} \Phi_{n,i-j,k}^{(*,1,0)} - 2\sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} \Phi_{n,i,j-k}^{(1,*,0)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(1,0,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} \Phi_{n,i-j,k}^{(*,0,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} \Phi_{n,i,j,k-}^{(1,0,*)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(0,1,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} \Phi_{n,i,j-k}^{(0,*,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} \Phi_{n,i,j,k-}^{(0,1,*)} \\ Q_{n,i,j,k}^{(1,1,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\mu_n}{\Delta x_i} \Phi_{n,i-j,k}^{(*,1,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\eta_n}{\Delta y_j} \Phi_{n,i,j-k}^{(1,*,1)} - 2\sqrt{3} \frac{\xi_n}{\Delta z_k} \Phi_{n,i,j,k-}^{(1,1,*)} \end{array} \right]$$

On obtient ainsi un système de 8×8 équations à résoudre.

– Cas cubique (M=2).

Dans le cas cubique, la matrice $\mathbb{S}_{n,i,j,k}$ obtenue est de dimension 27×27 et est donc difficilement lisible.

2.1.5 Balayage angulaire et spatial

Les relations précédentes peuvent être résolues directement sans itération en connaissant les flux aux frontières du domaine.

Pour chaque direction $\vec{\Omega}_n$ et pour chaque cellule $\{i,j,k\}$, on détermine les composantes

$\phi_{n,i,j,k}$ à partir de $Q_{n,i,j,k}$ et des flux rentrant aux frontières $\phi_{n,i-,j,k}$, $\phi_{n,i,j-,k}$ et $\phi_{n,i,j,k-}$.

Les flux sortants $\phi_{n,i+,j,k}$, $\phi_{n,i,j+,k}$ et $\phi_{n,i,j,k+}$ sont calculés ensuite à partir des relations diamants généralisées.

Les flux sortants d'une cellule correspondent aux flux rentrants de la cellule avoisinante suivant la direction $\vec{\Omega}_n$.

Le balayage spatial commence aux frontières du domaine pour lesquelles le flux angulaire est connu, par exemple pour des conditions de vide pour lesquelles le flux angulaire est nul, et se poursuit dans la direction $\vec{\Omega}_n$ du neutron.

Dans notre programmation, nous avons sélectionné les côtés X+, Y+ et Z+ comme départ pour le balayage de notre domaine géométrique, de telle sorte que les conditions de vide doivent se trouver préférentiellement assignées à ces côtés.

Les particules se dirigent alors vers les côtés X-, Y- et Z-, pour être réfléchies suivant les conditions d'albedo imposées, puis repartent vers les côtés X+, Y+ et Z+, et ainsi de suite.

Dans le cas où les conditions aux frontières X+, Y+ et Z+ ne sont pas des conditions de vide, les composantes initiales du flux sont alors fixées à 1 ou sont récupérées de la dernière itération interne, afin d'initialiser le balayage spatial.

En géométrie 3D cartésienne, nous n'utilisons pas de méthode de tir, aussi le vecteur flux inconnu doit garder les termes $\phi_{n,i+,j,k}$, $\phi_{n,i,j+,k}$ et $\phi_{n,i,j,k+}$ aux frontières X+, Y+ et Z+, en plus des moments harmoniques sphériques du flux à l'intérieur du domaine $\phi_{l,i,j,k}^m$.

A la fin de chaque itération interne, les moments harmoniques sphériques du flux sont calculés à partir des composantes S_N du flux suivant l'équation (2.4). Ces valeurs servent ensuite à calculer les termes de source de l'itération suivante, qui permettront de calculer les nouvelles composantes du flux, et ainsi de suite jusqu'à convergence de la méthode itérative.

2.2 Implémentation et validation dans DRAGON

Dans cette partie, nous présenterons d'abord le code de réseau DRAGON dans lequel a été programmé la méthode décrite dans la première partie de ce chapitre. Ensuite, nous aborderons la méthodologie appliquée lors du test et de la validation de notre code.

2.2.1 Cadre de travail : le code de réseau DRAGON

Le travail de programmation a été entièrement réalisé dans le code de réseau « DRAGON version 4 (Marleau, G., Hébert, A. & Roy, R. ; 2007a) développé à l'École Polytechnique de Montréal au sein de l'Institut de Génie Nucléaire. La distribution Version 4 comprend les dernières versions de chaque code de physique des réacteurs en cours de développement à l'École Polytechnique de Montréal.

Ce code de cellule est basé sur une architecture entièrement modulaire ; l'interface entre les différents modules étant réalisé par la librairie GANLIB du « GAN generalized Driver » (Roy, R. & Hébert, A. ; 2000).

Dans le cadre de ce travail, deux modules ont été modifiés :

- le module SNT :, qui génère le tracking de la méthode aux ordonnées discrètes,
- le module FLU :, qui résoud l'équation de transport multi-groupe.

Au départ du projet, la méthode S_N était déjà disponible en 1D et 2D, donc l'aspect structurel du travail de programmation n'est pas intervenu. Par contre, il a fallu généraliser en interne dans chaque module le traitement particulier du cas 3D.

2.2.2 Méthodologie de la validation

Afin de tester notre programmation, nous avons réalisé une série d'étude sur des benchmarks relativement simples à un et deux groupes d'énergie. Dans une première approche,

nous avons comparé les résultats sur des géométries 2D pour les solveurs S_N 2D déjà validé et notre nouvelle méthode en 3D. Les deux solveurs doivent montrer une concordance parfaite pour les valeurs convergées, étant donné la similitude dans l'approche de la programmation de la méthode S_N en 2D et en 3D. Dans un deuxième temps, nous avons cherché à comparer les résultats des méthodes S_N et SP_n en 3 dimensions.

Nous avons utilisé des cas-tests relativement simples :

- Un set de benchmarks mono-énergétique anisotrope,
- Un set de benchmarks à deux groupes d'énergie isotrope.

Ces benchmarks sont des problèmes à valeurs propres simplifiés, comprenant au moins un matériau fissile. Si l'on considère que la réaction est isotrope dans le référentiel du laboratoire, la distribution en source peut être écrite de la manière suivante :

$$Q(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \leftarrow \hat{\Omega}') \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \nu \Sigma_f(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \quad (2.16)$$

Avec :

$\Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \leftarrow \hat{\Omega}')$ section efficace macroscopique de diffusion,

k_{eff} , facteur de multiplication effectif,

$\nu \Sigma_f(\vec{r})$, le nombre de neutrons secondaires multiplié par la section efficace macroscopique de fission.

Dans le cas d'un milieu isotrope, la section efficace de diffusion est uniquement une fonction de l'angle de diffusion, l'équation précédente peut donc se réécrire de la manière suivante :

$$Q(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \nu \Sigma_f(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \quad (2.17)$$

On développe ensuite la section efficace de diffusion en polynômes de Legendre :

$$\Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}(\vec{r}) P_l(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \quad (2.18)$$

Avec L représentant l'ordre des polynômes de Legendre. Les valeurs $L = 0$ et $L = 1$ correspondent respectivement à un milieu isotrope et à un milieu linéairement anisotrope. On cherche à évaluer la précision de nos calculs sur la valeur du k_{eff} et sur le taux d'absorption macroscopique. Pour ce faire, on utilisera par la suite les définitions suivantes :

$$- \Delta k_{eff} = |k_{eff} - k_{eff}^{ref}| \times 10^5 \text{ en pcm, parties par cent mille.}$$

$$- \epsilon_i = \frac{\tau_i - \tau_i^{ref}}{\tau_i^{ref}}, \text{ erreur sur la densité du taux de réactions macroscopiques définis par } \tau_i = \sum_t \phi_i.$$

On représente usuellement cette grandeur à l'aide de l'erreur maximale $|\epsilon_{max}| = \max_i |\epsilon_i|$ et par l'erreur moyenne $\bar{\epsilon} = \frac{1}{V_{tot}} \sum_i V_i |\epsilon_i|$.

2.2.3 Comparaison S_N 2D/3D

Dans cette première étape de la validation de la programmation, l'idée a été de comparer sur des cas simples les résultats 2D et 3D. En effet, en dégradant une géométrie 3D, nous pouvons nous ramener à un cas 2D, éventuellement même à des géométries 1D à plaques.

2.2.3.1 Test numéro 1 : comparaison 2D/3D

Dans ce cas précis, le benchmark a été défini dans (Hébert, A. ; 2006b). Il s'agit d'un problème à valeur propre dont les sections efficaces des mélanges sont linéairement anisotropes :

Cette géométrie, présentée à la figure [2.2], est constituée de 5×5 régions dans le plan

Mélange	Σ_t	Σ_s^0	Σ_s^1	$\nu\Sigma_f$
1	0.025	0.013	0.0	0.0155
2	0.025	0.024	0.006	0.0
3	0.075	0.0	0.0	0.0

TAB. 2.1 Benchmark anisotrope : sections efficaces des mélanges

$\{X, Y\}$. On y impose une zone de vide dans le coin de l'assemblage. En ce qui concerne les conditions aux frontières, des conditions de vide sont appliquées en X- et Y-, tandis que l'on fixe des conditions de réflexion en X+ et Y+. Chaque maille fait initialement 40 cm de longueur, que l'on peut par la suite subdiviser de façon régulière en n_{split} .

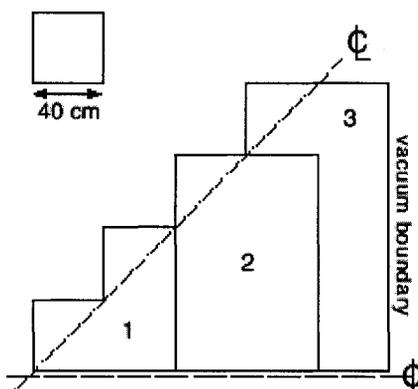


FIG. 2.2 Benchmark anisotrope

Afin de pouvoir traiter cette géométrie en 3 dimensions, on rajoute une dimension suivant Z, de longueur unité afin de conserver le volume et de pouvoir comparer les taux de réactions. On fixe ensuite des conditions de réflexion en Z- et Z+ afin de simuler numériquement des dimensions infinies.

Les calculs ont été faits en deux parties, dans un premier temps en géométrie 2D, puis en géométrie 3D. On introduit désormais les notations suivantes. Dans le cas présent, on compare pour chaque paramètre de discrétisation les valeurs obtenues en 2D et en 3D,

soit :

$$\Delta k_{eff} = |k_{eff3D} - k_{eff2D}| \times 10^5.$$

et :

$$\epsilon_i = \frac{\tau_{i3D} - \tau_{i2D}}{\tau_{i2D}} \text{ en } \%.$$

Les résultats obtenus sont fournis dans le tableau suivant :

M	Subm	k_{eff} 2D	k_{eff} 3D	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
1	$1 \times 1 \times 1$	0.9863894	0.9868124	42	0.42	0.28
1	$3 \times 3 \times 3$	0.9915440	0.9914402	10	0.11	0.08
1	$5 \times 5 \times 5$	0.9919349	0.9918675	6.74	0.05	0.03
2	$1 \times 1 \times 1$	0.9921270	0.9922294	10.24	0.10	0.07
2	$3 \times 3 \times 3$	0.9921548	0.9922458	9	0.10	0.07
2	$5 \times 5 \times 5$	0.9921548	0.9922501	9	0.10	0.07
3	$1 \times 1 \times 1$	0.9921542	0.9921464	0.78	0.00	0.00
3	$3 \times 3 \times 3$	0.9921549	0.9921471	0.78	0.00	0.00
3	$5 \times 5 \times 5$	0.9921549	0.9921472	0.77	0.00	0.00

TAB. 2.2 Benchmark anisotrope : comparaison S_8 2D/3D

On a utilisé dans nos calculs une quadrature angulaire S_8 , M correspondant au degré d'intégration spatial (linéaire, parabolique et cubique). On s'aperçoit au travers de ces premiers résultats que les écarts entre les deux calculs sont très faibles : les différences pour les k_{eff} sont d'environ 10 pcm dans le cas linéaire et parabolique, et inférieur au pcm dans le cas cubique. Les écarts sur les taux de réactions sont quand à eux pratiquement nuls. L'écart décroît logiquement avec l'ordre d'intégration et le raffinement spatial, les valeurs calculées tendant asymptotiquement vers les résultats convergés.

2.2.3.2 Test numéro 2 : Benchmark IAEA 2D.

Nous allons ici comparer de nouveau nos résultats en 2D et en 3D, en utilisant le benchmark isotrope IAEA 2D (ANL, 1977) présentée à la figure [2.3], correspondant à 1/8 de coeur en géometrie 2D cartésienne à deux groupes d'énergie.

Pour approximer numériquement le cas 2D en 3 dimensions, nous avons rajouté une dimension en Z très supérieure à celles en X et Y, avec des conditions de vide aux frontières. Nous pouvons ainsi traiter le benchmark avec notre méthode S_N en 3D. Nous comparons ici les valeurs de k_{eff} pour chaque ordre de discrétisation spatial et angulaire.

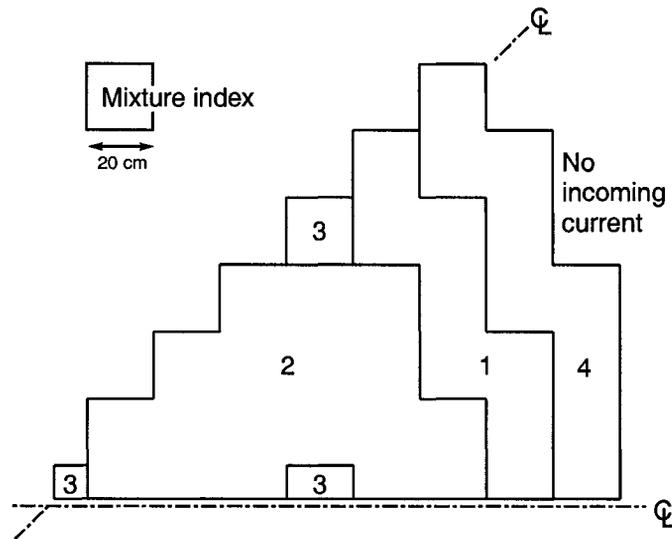


FIG. 2.3 Benchmark IAEA 2D

– Cas linéaire : $M=0$

n	Subm	k_{eff} 2D	k_{eff} 3D	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)
1	$1 \times 1 \times 1$	0.962246	0.9622462	0.02
1	$2 \times 2 \times 2$	0.9705232	0.9705132	1
3	$1 \times 1 \times 1$	0.9630179	0.9630095	0.84
3	$2 \times 2 \times 2$	0.9711748	0.9711754	0.06
5	$1 \times 1 \times 1$	0.9629602	0.9629626	2.4
5	$2 \times 2 \times 2$	0.9710641	0.9710658	0.17

TAB. 2.3 Benchmark IAEA2D : comparaison S_{n+1} 2D/3D pour le cas diamant linéaire avec $n=1,3,5$

– Cas parabolique : $M=1$.

n	Subm	k_{eff} 2D	k_{eff} 3D	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)
1	$1 \times 1 \times 1$	0.9633241	0.9633238	0.03
1	$2 \times 2 \times 2$	0.9704603	0.9704603	0
3	$1 \times 1 \times 1$	0.9645308	0.9645301	0.07
3	$2 \times 2 \times 2$	0.9712398	0.9712400	0.02
5	$1 \times 1 \times 1$	0.9645028	0.9644991	0.37
5	$2 \times 2 \times 2$	0.9711704	0.9711705	0.01

TAB. 2.4 Benchmark IAEA2D : comparaison S_{n+1} 2D/3D pour le cas diamant parabolique avec $n=1,3,5$

– Cas cubique : $M=2$.

n	Subm	k_{eff} 2D	k_{eff} 3D	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)
1	$1 \times 1 \times 1$	0.9630765	9.630762	0.03
1	$2 \times 2 \times 2$	0.9704487	0.9704482	0.05
3	$1 \times 1 \times 1$	0.9643060	0.9643061	0.01
3	$2 \times 2 \times 2$	0.9712283	0.9712281	0.02
5	$1 \times 1 \times 1$	0.9643400	0.9643397	0.03
5	$2 \times 2 \times 2$	0.9711498	0.9711497	0.01

TAB. 2.5 Benchmark IAEA2D : comparaison S_{n+1} 2D/3D pour le cas diamant cubique avec $n=1,3,5$

Dans ces tableaux, n correspond aux ordres des quadratures angulaires choisies (respectivement S_2, S_4 et S_6). Nous avons subdivisé ensuite la géométrie en raffinant le maillage par un facteur 2 (subm=2).

La différence entre les k_{eff} calculés décroît premièrement en fonction de l'ordre d'intégration spatial, du raffinement spatial, et également en fonction de l'ordre de la quadrature angulaire. Comme précédemment, les résultats tendent vers leurs valeurs convergées, et donc l'erreur décroît identiquement pour les cas 2D et 3D.

A la lumière de ces premiers résultats, on peut dès lors supposer que l'on a cohérence de nos 2 méthodes, et que nous avons correctement implémenté notre cas 3D.

2.2.4 Invariance par rotation de la géométrie

Dans le cadre de la validation de notre méthode, il est apparu nécessaire de tester l'invariance par rotation des résultats de notre solveur.

Pour une même géométrie tridimensionnelle cartésienne orientée suivants les trois possibilités du repère, on va ainsi vérifier que les résultats fournis par notre méthode sont identiques.

2.2.4.1 Test numéro 3 : géométrie 3D à 3 plans

Dans un premier temps, on reprend le benchmark anisotrope défini précédemment dans le plan $\{X, Y\}$ en 2D. On va définir une géométrie 3D en rajoutant deux autres plans en $\{X, Y\}$ identiques au premier. Ensuite ces trois plans seront tournés de 90 degrés, pour être parallèles au plan $\{X, Z\}$, enfin après encore une rotation de 90 degrés, on les orientera parallèlement au plan $\{Y, Z\}$. On impose désormais des conditions de vide aux frontières.

On compare les résultats pour chaque ordre d'intégration (diamant, parabolique et cubique), pour un ordre de quadrature angulaire fixé à 6.

Orientation	k_{eff}		
	cas linéaire	cas parabolique	cas cubique
plan X-Y	0.7733045	0.7892788	0.7894073
plan X-Z	0.7733042	0.7892788	0.7894367
plan Y-Z	0.7733042	0.7892788	0.7894167
$max(\delta k_{eff})$ en pcm	0.03	0	2.94

TAB. 2.6 Benchmark anisotrope 3D : test 1 d'invariance par rotation

Concernant l'ordre linéaire et parabolique, on ne remarque pas de différence significative pour les trois orientation (écart relatif de 0.03 pcm pour le schéma diamant linéaire). Pour l'ordre cubique, l'écart relatif sur la valeur du k_{eff} est de 3 pcm. On met en évidence ici un léger problème d'ordre numérique concernant uniquement l'ordre cubique.

2.2.4.2 Test numéro 4 : géométrie 3D à 5 plans.

On reprend la méthodologie appliquée dans le cas précédent, avec cette fois-ci 5 une géométrie comportant 5 plans en $\{X, Y\}$. Similairement, par permutation des trois axes $\{x, y, z\}$ qui correspondent à des rotations composés autour des trois axes, on obtient tour à tour trois configurations.

Orientation	k_{eff}		
	cas diamant	cas parabolique	cas cubique
plan X-Y	0.5704736	0.6006991	0.6014801
plan X-Z	0.5704750	0.6006992	0.6012382
plan Y-Z	0.5704749	0.6006992	0.6012590
$max(\delta k_{eff})$ en pcm	0.14	0.01	22.1

TAB. 2.7 Benchmark anisotrope 3D : test 2 d'invariance par rotation

On obtient dans ce cas là une différence inférieure à 0.1 pcm pour les cas linéaires et paraboliques.

Par contre, l'écart entre les différents résultats pour l'ordre cubique grimpe à 22 pcm, l'ordre de la perturbation numérique étant relié au nombre de régions, plus important dans le cas de cette géométrie.

2.2.5 Comparaison S_N/SP_n .

La deuxième étape de validation a consisté à comparer les résultats fournis par la méthode S_N en 3D avec ceux d'autres méthodes. Nous nous sommes ainsi intéressés en particulier à la méthode SP_n , dont les solutions pour un même ordre d'intégration spa-

tial et angulaire sont connus pour être similaire aux méthodes S_N (Hébert, A. ; 2006c), (Longoni, G. ; 2004).

En particulier, nous nous baserons sur le phénomène de superconvergence qui a été établi dans le cas des méthodes P_n et SP_n utilisant une intégration de type Gauss-Legendre des matrices d'assemblages (Hébert, A. ; 2006b). Par ailleurs, l'équivalence numérique a été établie entre les schémas diamants d'ordres élevés et les méthodes SP_n utilisant la méthode des éléments finis mixtes duaux de Raviart-Thomas, avec une intégration de type Gauss-Legendre des matrices d'assemblages dans (Hébert, A. ; 2006c). Nous chercherons donc à généraliser ce résultat en 3D.

2.2.5.1 Théorie de la méthode SP_n

Le but ici est de réaliser une description très succincte de la méthode des harmoniques simplifiés (SP_n), pour une lecture détaillée, on peut se référer à (Hébert, A. ; 2006b).

Dans le cadre de la résolution de l'équation de transport, la méthode des harmoniques sphériques ou méthode P_n est basée sur un développement en harmoniques sphériques du flux angulaire à l'ordre N , N étant un nombre impair. Les harmoniques sphériques formant une base complète de la sphère unité, on doit retrouver pour $N \rightarrow \infty$ la solution exacte de l'équation de transport.

Le problème est qu'en géométrie 3D, le nombre d'équations P_n couplés croît en $\mathcal{O}((N+1)^2)$. Le nombre d'équations à résoudre est donc très important, le couplage impliquant de surcroît les moment angulaires ainsi que des dérivées spatiales croisées de ces moments.

Afin de réduire le temps de calcul, (Gelbard et al. ; 1959) proposèrent dans les années 60 une approche simplifiée de la méthode des harmoniques sphériques, nommée méthode SP_n .

La procédure appliquée est d'étendre la variable spatiale au cas 3D en substituant les dérivées d'ordre 2 dans les équations P_n 1D par l'opérateur laplacien 3D. En conséquence,

le couplage entre les dérivés spatiales est éliminé, et l'on obtient $(N + 1)$ équations au lieu des $(N + 1)^2$ du cas P_n .

Néanmoins, la conséquence de cette approximation introduite dans l'opérateur de fuite est que la méthode SP_n ne converge pas exactement vers la solution exacte de l'équation de transport quand $N \rightarrow \infty$.

Malgré cela, pour des systèmes idéalisés caractérisés par des milieux homogènes et isotropes, les méthodes SP_n et S_N conduisent à la même solution, pour une même quadrature angulaire et une discrétisation spatiale identique.

De plus, les méthodes SP_n permettent d'obtenir des solutions améliorées par rapport au calcul en théorie de diffusion classique. Par ailleurs, le phénomène de superconvergence, qui correspond fondamentalement à un gain en terme de précision pour une discrétisation spatiale fixée, a été démontré dans (Hébert, A. ; 2006b) pour une intégration de type Gauss-Legendre des matrices d'assemblages.

Ainsi une discrétisation spatiale basée sur la méthode des éléments mixtes-duaux de Raviart-Thomas, avec une intégration de type Gauss-Legendre des matrices d'assemblages mènent à une approche superconvergente de la solution de l'équation de transport, par rapport à une intégration de type analytique.

L'équivalence numérique entre le schéma diamant pour la méthode S_N et une approche mixte-duale, linéaire et superconvergente de la méthode P_n a été démontré en géométrie 1D dans (Hébert, A. ; 2006b). Cependant, on doit garder à l'esprit que l'équivalence formelle entre méthode S_{n+1} et méthode P_n n'est valide que dans le cas de géométrie 1D. Dans les cas 2D et 3D les quadratures angulaires sont capables d'intégrer exactement les relations d'orthogonalité des harmoniques sphériques jusqu'à l'ordre $l = n/2$, ce qui n'est pas suffisant pour observer l'équivalence entre les deux méthodes.

Par comparaison avec la méthode SP_n , le phénomène de superconvergence pour les schémas diamants d'ordres élevés pour les méthodes S_N en 1D et 2D a été montré dans (Hébert, A. ; 2006c). Nous allons étendre ce résultat au cas 3D.

2.2.5.2 Test 5 : comparaison S_{n+1}/SP_n : benchmark IAEA 3D

Le benchmark IAEA3D (ANL, 1977) correspond à 1/8 de coeur complet avec des conditions de vide aux frontières. Il comprend 4 plans suivant Z, tel que décrit à la figure [2.4].

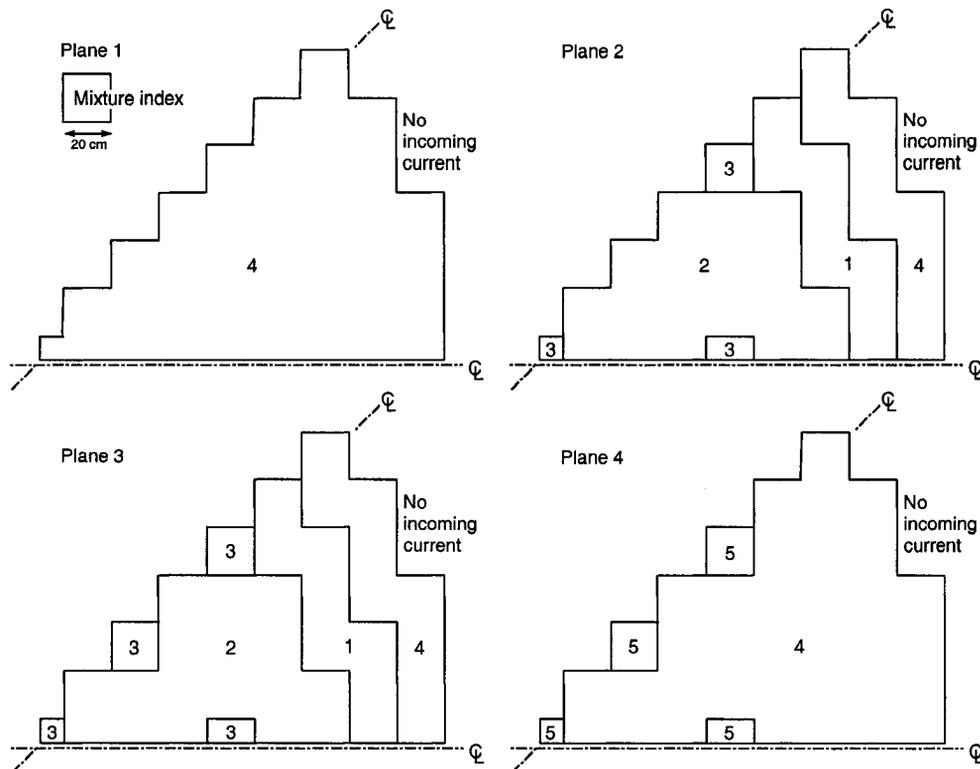


FIG. 2.4 Benchmark IAEA 3D

Nous allons comparer les résultats en faisant varier les paramètres suivants :

- n : ordre de la quadrature angulaire
- $subm$: indice de discrétisation de la géometrie
- l'ordre de l'intégration spatiale : schéma aux différences diamant, parabolique et cubique dans le cas S_N , ordre de la représentation en éléments finis (polynômes linéaires, paraboliques et cubiques) dans le cas SP_n .

Les solutions SP_n sont obtenues à partir de la méthode des éléments finis mixtes-duaux de Raviart-Thomas (Hébert, A. ; 1993), en utilisant une intégration de type Gauss-Legendre

des matrices d'assemblages (éléments finis superconvergentes). Le solveur utilisé ici est le code de calcul de coeur TRIVAC 4 (Hébert, A. ; 2007a).

– Cas linéaire

n	Subm	$k_{eff} S_{n+1}$	$k_{eff} SP_n$	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)
1	$1 \times 1 \times 1$	1.016342	1.018628	228
1	$2 \times 2 \times 2$	1.024337	1.023971	36
1	$4 \times 4 \times 4$	1.025348	1.025004	34
3	$1 \times 1 \times 1$	1.01623	1.019456	322
3	$2 \times 2 \times 2$	1.024506	1.024493	1.3
3	$4 \times 4 \times 4$	1.025529	1.025504	2.5
5	$1 \times 1 \times 1$	1.016124	1.019500	337
5	$2 \times 2 \times 2$	1.024508	1.024482	2.6
5	$4 \times 4 \times 4$	1.025517	1.025497	2

TAB. 2.8 Benchmark IAEA3D : comparaison S_{n+1}/SP_n pour les cas linéaires

– Cas parabolique

n	Subm	$k_{eff} S_{n+1}$	$k_{eff} SP_n$	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)
1	1 × 1 × 1	1.020503	1.025279	477
1	2 × 2 × 2	1.025686	1.025337	34.9
3	1 × 1 × 1	1.020729	1.025775	504
3	2 × 2 × 2	1.025853	1.025828	2.5
5	1 × 1 × 1	1.020700	1.025765	506
5	2 × 2 × 2	1.025823	1.025820	0.3

TAB. 2.9 Benchmark IAEA3D : comparaison S_{n+1}/SP_n pour les cas paraboliques

– Cas cubique

n	Subm	$k_{eff} S_{n+1}$	$k_{eff} SP_n$	$ \Delta k_{eff} $ (pcm)
1	1 × 1 × 1	1.020530	1.025238	470.8
1	2 × 2 × 2	1.025686	1.025354	33.2
3	1 × 1 × 1	1.020834	1.025716	488.2
3	2 × 2 × 2	1.025861	1.025846	1.5
5	1 × 1 × 1	1.020829	1.025709	488
5	2 × 2 × 2	1.025857	1.025836	2.1

TAB. 2.10 Benchmark IAEA3D : comparaison S_{n+1}/SP_n pour les cas cubiques

On s'aperçoit que les méthodes S_N et SP_n convergent vers les mêmes solutions. En effet, le milieu est isotrope et présente peu d'hétérogénéités, l'effet de bruit sur la solution apparaissant dans la méthode SP_n pour n élevé est quasiment négligeable, et les deux méthodes convergent vers la même valeur. L'écart entre les résultats des deux méthodes

décroit très fortement avec le raffinement spatial, on peut donc également conclure que la convergence des deux méthodes est aussi bonne, bien que différente.

À la lumière de ces premiers résultats, on peut dès lors supposer que l'on a cohérence de nos 2 méthodes, et que nous avons correctement implémenté notre cas 3D.

2.3 Implémentation et validation de la méthode DSA

Comme expliqué lors du chapitre 1, les méthodes S_N sont connues pour présenter des vitesses de convergence très faibles quand le rapport de la section efficace de diffusion sur la section efficace totale (« scattering ratio ») du milieu devient proche de 1. La méthode d'accélération retenue dans le code DRAGON est la méthode DSA (*diffusion synthetic Acceleration*). Ce choix se justifie d'abord par sa compatibilité connue avec le schéma diamant, et également par la disponibilité dans le solveur TRIVAC des méthodes de résolution de l'équation issue de l'approximation de la diffusion.

On a ainsi utilisé une approximation P_1 du flux dont les équations harmoniques sphériques du flux sont discrétisées par une méthode des éléments finis de type Raviart-Thomas avec une intégration de type Gauss-Legendre des matrices d'assemblages.

A l'ordre du schéma diamant (linéaire, parabolique ou cubique) correspond l'ordre de discrétisation des éléments finis (polynômes linéaires, paraboliques et cubiques). L'intérêt de la méthode DSA étant de faire converger plus rapidement les itérations sur la source, nous avons testé l'implémentation de notre schéma DSA sur les mêmes benchmarks que précédemment, en comparant le nombre d'itérations internes avec ou sans DSA.

2.3.1 Test 6 : benchmark anisotrope 3D à un plan

Dans un premier temps, nous avons comparé le nombre d'itération pour le benchmark anisotrope 3D défini au paragraphe [2.2.3.1] Le paramètre à observer est la réduction du nombre d'itération interne. Nous avons réalisé les tests pour les trois ordres (linéaire, parabolique et cubique), pour les quadratures angulaires level-symmetric de type 2 S_4 et S_6 .

– Cas linéaire : $M=0$

n	DSA	Itérations externes	Itérations internes
4	sans dsa	12	62
	avec dsa	8	29
6	sans dsa	12	62
	avec dsa	7	28

TAB. 2.11 Test du DSA pour le cas linéaire

– Cas parabolique : $M=1$.

n	DSA	Itérations externes	Itérations internes
4	sans dsa	13	81
	avec dsa	14	54
6	sans dsa	20	88
	avec dsa	13	53

TAB. 2.12 Test du DSA pour le cas parabolique

– Cas cubique : $M=2$.

n	DSA	Itérations externes	Itérations internes
4	sans dsa	20	114
	avec dsa	15	91
6	sans dsa	22	114
	avec dsa	22	99

TAB. 2.13 Test du DSA pour le cas cubique

Les résultats indiquent une nette diminution du nombre d'itération sur la source dans le cas linéaire, la diminution étant moins importante pour les cas paraboliques et cubiques.

2.3.2 Test de l'implémentation du solveur GMRES à l'aide du benchmark NEA 3D

Dans cette partie, nous utilisons le benchmark NEA 3D proposé par (NEA/NSC 2007) afin de valider l'implémentation du solveur GMRES et de son efficacité lorsque employé conjointement au schéma de préconditionnement DSA. La description complète de la géométrie du problème sera réalisée au cours du chapitre suivant, nous y reviendrons donc par la suite. Nous précisons simplement que lors de ce test, nous avons utilisé une géométrie de type 3D cubique, comprenant deux parallélépipèdes emboîtés et une source de neutrons située à l'origine. Afin de mettre en évidence les difficultés de convergence connues pour la méthode S_N , nous avons fait tendre le rapport $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ de l'ensemble du milieu vers 1.

Pour cela, nous avons fixé dans un premier temps les sections efficaces totales des milieux 1 et 2 égales à 1.0, puis fait varier c entre 0.1 et 1.

Dans une deuxième étape, nous avons imposé des sections efficaces pour les milieux 1 et 2 très différentes, soit $\Sigma_1 = 0.1$ et $\Sigma_2 = 5.0$. On obtient ainsi un milieu tridimensionnel fortement hétérogène et optiquement épais, connu pour limiter l'efficacité du schéma DSA à moins d'être utilisé conjointement avec des méthodes de Krylov, d'après (Warsa, J.S et al. ; 2003).

Enfin, nous avons testé l'influence de l'ordre d'intégration spatial sur notre schéma DSA, car des problèmes de cohérence pour les ordres parabolique et cubique sont apparus lors des phases initiales de test de la géométrie du benchmark IAEA3D.

Pour ces trois tests, nous avons rapportés le nombre d'itérations internes en fonctions du rapport $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$. Les quatre possibilités de notre solveur sont :

- Itérations libres, sans préconditionnement DSA ni utilisation du solveur GMRES(k) ;
- Préconditionnement DSA uniquement ;
- Solveur GMRES(k) uniquement ;
- Préconditionnement DSA et solveur GMRES(k).

Pour les deux premiers tests, le schéma diamant linéaire est utilisé. On obtient alors les courbes suivantes :

2.3.2.1 Nombre d'itérations en fonction du coefficient de diffusion

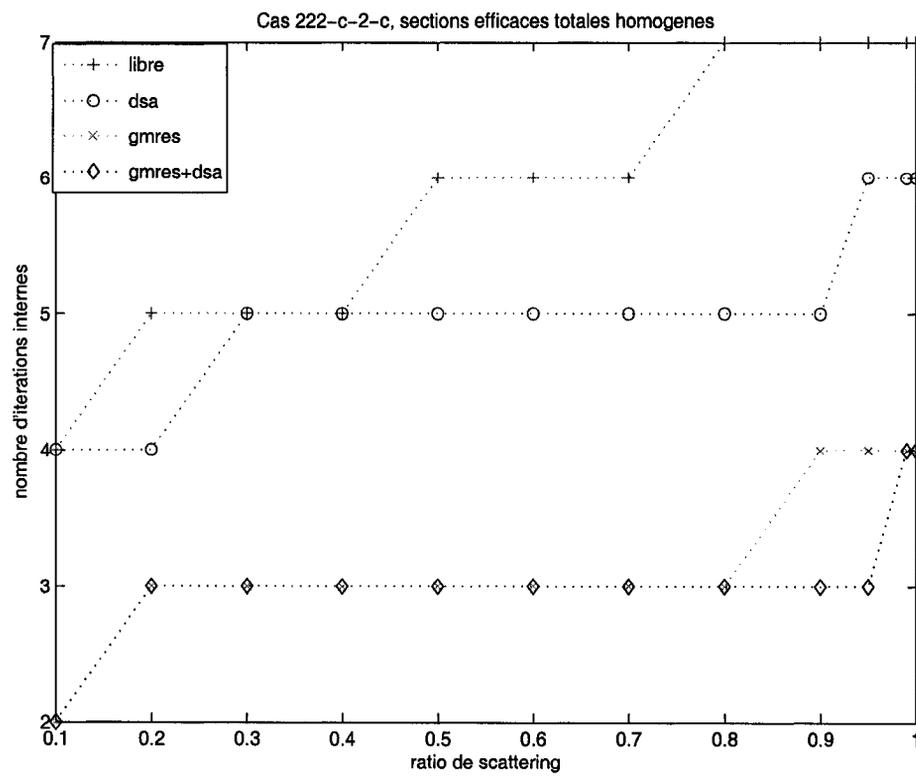


FIG. 2.5 Test GMRES et DSA : cas 222-c-2-c

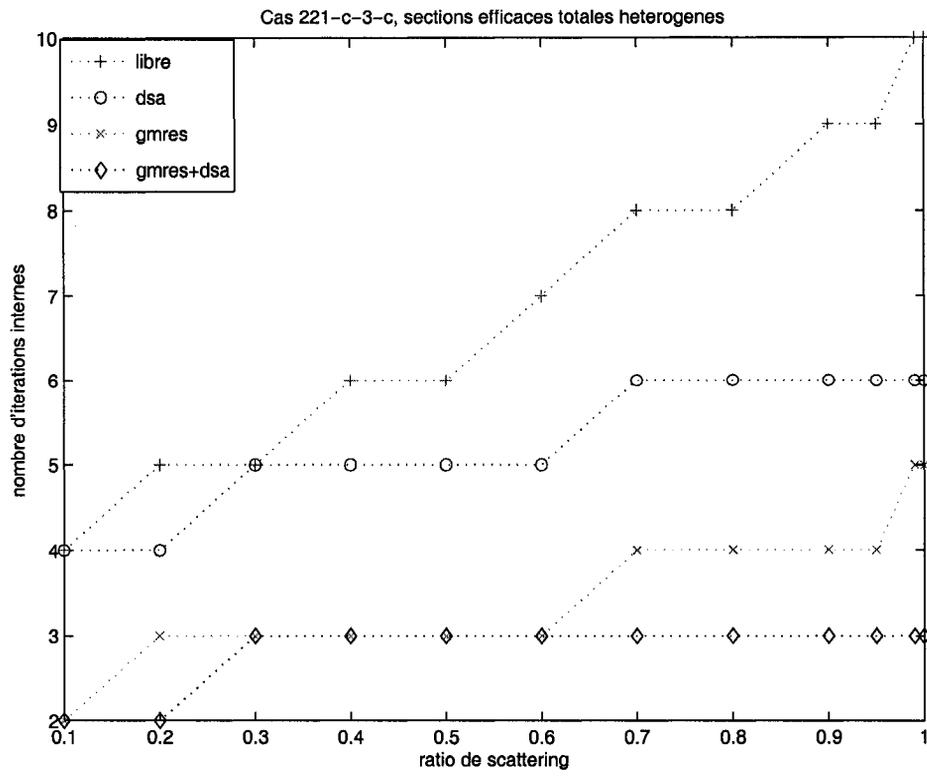


FIG. 2.6 Test GMRES et DSA : cas 221-c-3-c

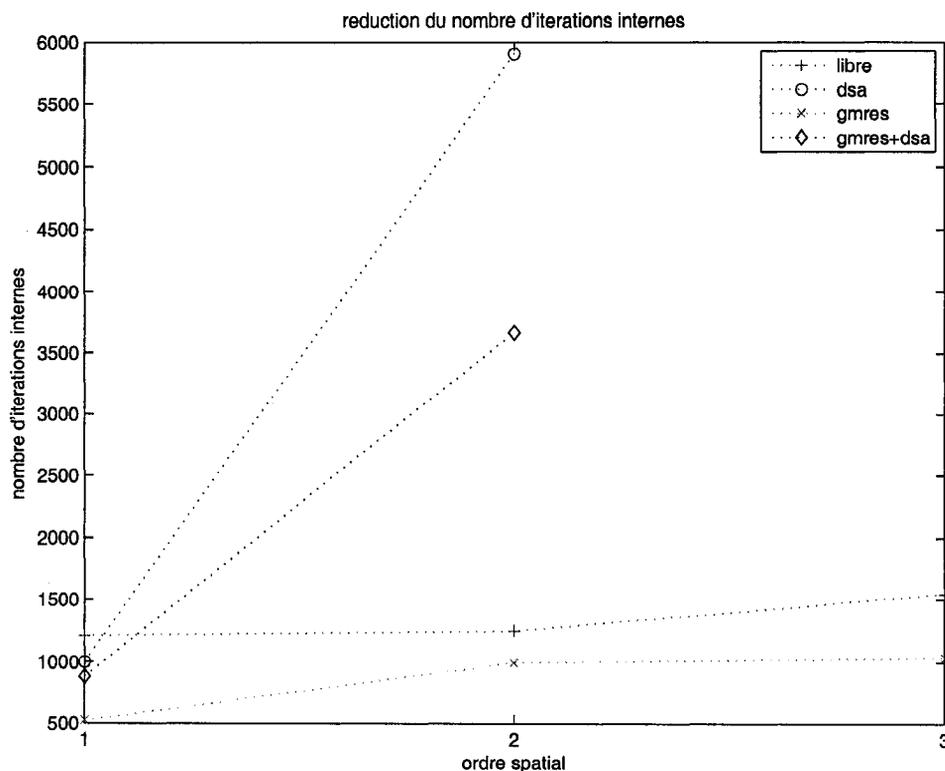


FIG. 2.7 Test GMRES et DSA pour les différents ordres spatiaux : benchmark IAEA3D

2.3.2.2 Analyse des résultats

Comme prévu, on observe une augmentation générale du nombre d'itérations internes lorsque le rapport $c = \frac{\sum_s}{\sum_t}$ s'approche de 1. De plus, le cas hétérogène présente logiquement un plus grand nombre d'itérations que le cas homogène.

La première constatation est que pour le schéma diamant linéaire, l'utilisation du solveur GMRES est très efficace et l'utilisation conjointe du schéma DSA permet encore d'améliorer son action. Le deuxième graphique montre que le nombre d'itérations pour le cas fortement hétérogène est largement réduit par l'utilisation des méthodes de Krylov, comme convenu.

Enfin, le dernier graphique met en évidence un problème de cohérence entre les schémas d'ordres élevés parabolique et cubique avec le préconditionnement DSA. L'utilisation du schéma DSA semble déstabiliser numériquement l'ordre parabolique et cubique, ce phénomène n'apparaissant que dans le cadre de géométries présentant un nombre important de régions. On note cependant que l'utilisation du solveur GMRES(k) tend à restabiliser le schéma DSA.

CHAPITRE 3

ÉTUDE DU BENCHMARK NEA 3D À L'AIDE DU CODE DRAGON

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'étude qui a été réalisée dans le but d'analyser le benchmark NEA3D-TAB-2007 à l'aide du code DRAGON, avec comme solveur la méthode S_N tridimensionnelle décrite dans le chapitre précédent.

3.1 Problématique et but de l'étude du benchmark NEA-3DTAB-2007

Cette étude a été proposée par (NEA/NSC 2007) dans le cadre du groupe d'expertise en transport radiatif 3D de l'OCDE/NEA. L'utilisation de calculs déterministes 3D en transport devenant de plus en plus fréquente, il convient de s'interroger sur la fiabilité des solutions produites. L'exercice proposé a été introduit dans le but d'évaluer les performances des codes de transport déterministes en 3D, ceci pour une variation à grande échelle des paramètres définissant une géométrie simple.

Le benchmark proposé est pour ce faire relativement simple, constitué tel que décrit à la figure (3.1) par deux parallélépipèdes emboîtés, avec une source de neutrons à l'origine. Ce sont les paramètres définissant les dimensions géométriques ainsi que les sections efficaces macroscopiques totales et le coefficient de diffusion des deux milieux que l'on va faire varier suivant une grande échelle de valeurs. En effet, on ne cherche pas dans cette étude à se focaliser sur les erreurs de modélisation du problème, c'est pourquoi la géométrie, ainsi que les données nucléaires ne sont pas sophistiquées. Le but principal est en vérité d'évaluer les codes déterministes selon leur performance du point de vue informatique, c'est-à-dire suivant la cohérence et la qualité des solutions numériques produites, par comparaison avec des solutions de type Monte-Carlo fournies par les or-

ganisateurs de l'exercice.

Les trois critères d'études proposés par Yousry Azmy afin d'illustrer les performances des codes de calculs sont :

- Faire varier sur une grande échelle les paramètres définissant la géométrie et les données nucléaires, afin de faire ressortir des tendances et éventuellement d'arriver à généraliser les résultats pour une certaine classe de problèmes.
- La résolution de l'équation de transport implique une discrétisation des variables spatiales, énergétiques et angulaires. Le problème proposé étant monocinétique, seules la discrétisation spatiale, selon le nombre de cellules de calculs, et la discrétisation angulaire, suivant le nombre d'ordonnées discrètes, vont intervenir. La problématique est de pouvoir s'assurer que nos solutions numériques soient convergées, ce qui n'est pas évident à prouver dans la majorité des calculs. Pour cela, on vérifie qu'étant donné une discrétisation spatiale et angulaire suffisante, une augmentation de ces dernières engendre une décroissance linéaire de l'erreur : la solution numérique est alors considérée comme étant dans le domaine de convergence monotone.
- L'obtention de solutions 3D en transport par des codes de calculs déterministes implique généralement de nombreuses options, et il est souvent difficile pour les simples utilisateurs de bien ajuster tous les paramètres intervenant. C'est pour cela que lors du développement des algorithmes de calculs, les développeurs fixent des paramètres par défaut. Afin de tenir compte de ceci, il est donc demandé d'analyser les résultats produits à l'aides des options par défaut, et par ailleurs de reporter toute utilisation non standard du code.

3.2 Description du benchmark

Tel qu'annoncé précédemment, la géométrie du problème est simple : on considère deux parallélépipèdes imbriqués l'un dans l'autre, avec l'origine du système de coordonnées

cartésiennes fixée comme origine du parallélépipède externe. Celui-ci est d'ailleurs référencé comme le parallélépipède 1, et celui qui est interne est référencé comme le parallélépipède 2.

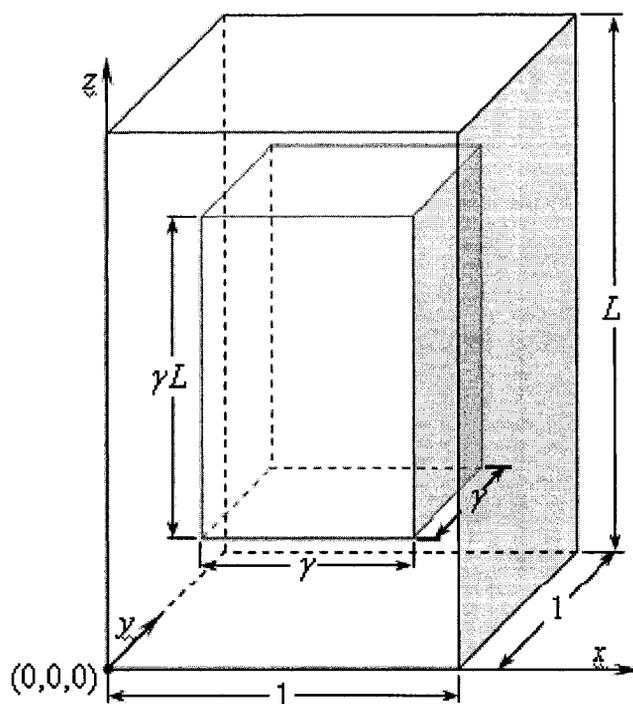


FIG. 3.1 Géométrie du Benchmark NEA 3D

Les six faces du parallélépipède 1 sont entourées de vide, sa base est de dimension unité (1×1), sa hauteur est L . Le parallélépipède 2 est dimensionné d'un facteur $\gamma < 1$ par rapport au premier, et a donc comme dimension $\gamma \times \gamma \times \gamma L$. On note par la suite les sections efficaces macroscopiques totales Σ_1 et Σ_2 , et les coefficients de diffusion c_1 et c_2 , respectivement pour les régions 1 et 2. La source unitaire est localisée dans le parallélépipède 1 au niveau de l'origine du repère, et occupe une région de dimension $(1 - \gamma)/2 \times (1 - \gamma)/2 \times L(1 - \gamma)/2$ tel que décrit à la figure suivante.

La suite de problèmes à traiter est maintenant construite en faisant varier de manière indépendante les différents paramètres $L, \gamma, \Sigma_1, \Sigma_2, c_1, c_2$.

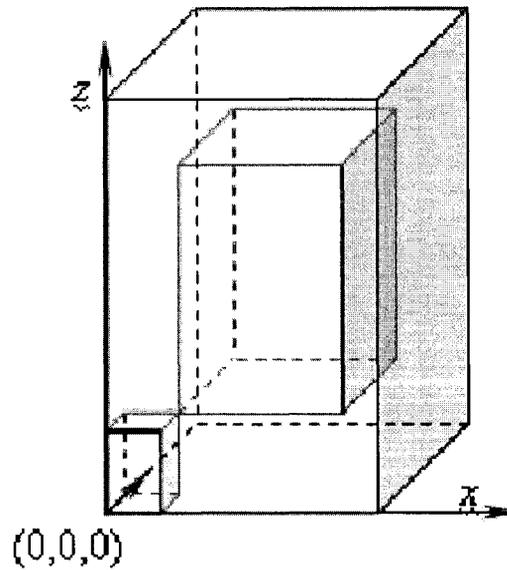


FIG. 3.2 Position de la source unitaire

Paramètre	Valeurs		
L	0.1	1.0	5.0
γ	0.1	0.5	0.9
Σ_1	0.1	1.0	5.0
c_1	0.5	0.8	1.0
Σ_2	0.1	1.0	5.0
c_2	0.5	0.8	1.0

TAB. 3.1 Tableaux des paramètres

On permet ainsi à chaque paramètre de prendre 3 valeurs, ce qui nous donne un total de $3^6 = 729$ cas à traiter. On notera par la suite les différentes configurations suivant la proposition suivante : on associe à chaque paramètre un indice compris dans $\{1, 2, 3\}$, correspondant à sa valeur. Par exemple, le cas 111111 correspond à la première colonne du tableau, 222222 la deuxième et 333333 la dernière.

3.3 Valeurs recherchées

Pour chacune des configurations définies précédemment, nous avons à fournir les flux calculés pour un certain nombre de sous-volumes et de surfaces de la géométrie. On aura au total 23 valeurs de flux pour chaque configuration, évalués suivant 15 sous-volumes et 8 surfaces de la géométrie. On cherche à déterminer ainsi les grandeurs suivantes :

– **Le flux scalaire pour :**

- 1 Le parallélépipède 1 qui n'est pas dans 2 ;
- 2 Le parallélépipède 2 ;

– **Le flux sortant net pour les faces suivantes :**

- 3 $x = 0, y \in [0, 1], z \in [0, L]$;
- 4 $x = 1, y \in [0, 1], z \in [0, L]$;
- 5 $z = 0, x \in [0, 1], y \in [0, 1]$;
- 6 $z = L, x \in [0, 1], y \in [0, 1]$;
- 7 $x = (1 - \gamma)/2, y \in [(1 - \gamma)/2, (1 + \gamma)/2], z \in [L(1 - \gamma)/2, L(1 + \gamma)/2]$;
- 8 $x = (1 + \gamma)/2, y \in [(1 - \gamma)/2, (1 + \gamma)/2], z \in [L(1 - \gamma)/2, L(1 + \gamma)/2]$;
- 9 $z = L(1 - \gamma)/2, x \in [(1 - \gamma)/2, (1 + \gamma)/2], y \in [(1 - \gamma)/2, (1 + \gamma)/2]$;
- 10 $z = L(1 + \gamma)/2, x \in [(1 - \gamma)/2, (1 + \gamma)/2], y \in [(1 - \gamma)/2, (1 + \gamma)/2]$;

– **Le flux scalaire pour les volumes définis par :**

- 11 $x, y \in [(1 - \gamma)/4, (1 - \gamma)/2], z \in [L(1 - \gamma)/4, L(1 - \gamma)/2]$;
- 12 $x, y \in [(1 - \gamma)/2, 1/2], z \in [L(1 - \gamma)/2, L/2]$;

- 13 $x, y \in [1/2, (1 + \gamma)/2], z \in [L/2, L(1 + \gamma)/2]$;
- 14 $x, y \in [(1 + \gamma)/2, (3 + \gamma)/4], z \in [L(1 + \gamma)/2, L(3 + \gamma)/4]$;
- 15 $x \in [(3 + \gamma)/2, 1], y \in [0, (1 - \gamma)/4] z \in [0, (1 - \gamma)/4]$;
- 16 $x \in [(3 + \gamma)/4, 1], y \in [(3 + \gamma)/4, 1] z \in [0, L(1 - \gamma)/4]$;
- 17 $x, y \in [0, (1 - \gamma)/4], z \in [L(3 + \gamma)/4, L]$;
- 18 $x \in [(3 + \gamma)/4, 1], y \in [0, (1 - \gamma)/4], z \in [L(3 + \gamma)/4, L]$;
- 19 $x \in [(3 + \gamma)/4, 1], y \in [(3 + \gamma)/4, 1], z \in [L(3 + \gamma)/4, L]$;
- 20 $x \in [1/2, (1 + \gamma)/2], y \in [(1 - \gamma)/2, 1/2], z \in [L(1 - \gamma)/2, L/2]$;
- 21 $x, y \in [1/2, (1 + \gamma)/2], z \in [L(1 - \gamma)/2, L/2]$;
- 22 $x, y \in [(1 - \gamma)/2, 1/2], z \in [L/2, L(1 + \gamma)/2]$;
- 23 $x \in [1/2, (1 + \gamma)/2], y \in [(1 - \gamma)/2, 1/2], z \in [L/2, L(1 + \gamma)/2]$.

3.4 Étude préliminaire de convergence

Avant de traiter l'ensemble de la suite des géométries du benchmark, il faut justifier que nos résultats numériques soient bien dans le domaine de convergence monotone, en clair que nos calculs soient convergés. La procédure appliquée est celle suggérée par Yousry Azmy, et correspond à trouver les paramètres de discrétisation spatiales et angulaires à partir desquels on observera une décroissance linéaire de l'erreur. On réalisera tour à tour l'étude de convergence pour les paramètres de discrétisation spatiales puis angulaires.

3.4.1 Options disponibles dans notre solveur

Nous avons utilisé dans cette étude le code de réseau DRAGON, les solutions numériques étant obtenues à l'aide de la méthode S_N 3D. Les options disponibles concernant l'intégration des variables spatiales et angulaires sont :

- Ordre d'intégration spatial linéaire (valeur par défaut), parabolique et cubique ; respectivement $M=0$, $M=1$ ou $M=2$.
- Quadrature à niveaux symétriques LQ_N , soit les quadratures angulaires $[S_2, S_4, S_6, S_8, S_{10}, S_{12}, S_{14}, S_{16}, S_{18}, S_{20}]$. L'utilisateur doit dans ce cas fixer l'ordre de la quadrature angulaire.

Les options d'accélération des itérations internes tels que le schéma DSA (valeur par défaut), et le solveur GMRES(k) n'interviennent pas dans l'étude de convergence monotone.

Nous avons réalisé une étude complète pour les 3 colonnes du tableau. En particulier, nous avons traité les cas limites de la suite de benchmark, à savoir ceux définis par la première et dernière colonne (cas 111111 et 333333). On considère en effet que d'un point de vue mathématique, ces derniers correspondent aux valeurs extrêmes des paramètres, ils incluent donc toutes les configurations possibles. Ainsi, si l'on atteint le domaine de convergence monotone pour ces deux cas, on peut légitimement considérer que les résultats numériques obtenues pour toute la suite de benchmarks seront également dans le domaine de convergence monotone.

Nous avons réalisé séparément une étude de convergence pour les flux scalaires et pour les flux surfaciques, car après des tests préliminaires, il s'est avéré que ces derniers nécessitaient des paramètres de discrétisation spatiales mais surtout angulaires plus importants.

3.4.2 Étude préliminaire : le cas 222222

Nous présentons ici l'étude de convergence réalisée pour le cas correspondant aux valeurs de la colonne centrale, soit :

$$L = 1.0; \gamma = 0.5; \Sigma_1 = 1.0; c_1 = 0.8; \Sigma_2 = 1.0; c_2 = 0.8.$$

On cherche à déterminer quels seront les paramètres de discrétisation minimaux afin de s'assurer d'être dans le domaine de convergence monotone. Nous avons utilisé l'option par défaut en ce qui concerne l'intégration de la variable spatiale, à savoir le schéma diamant.

La première étape a consisté à fixer une quadrature angulaire S_{12} , relativement élevée afin d'éviter une mauvaise discrétisation angulaire, et de raffiner l'indice de discrétisation spatial, correspondant aux dimensions de la cellule de calcul. On obtiendra ainsi dans un premier temps l'indice de discrétisation spatial minimal dès que l'on observera une diminution linéaire de l'erreur.

Dans un second temps, on fixera l'indice de discrétisation spatial à une valeur relativement correcte, et on augmentera cette fois-ci l'ordre de la quadrature angulaire, afin de déterminer également l'ordre de discrétisation angulaire minimal. On obtient les courbes suivantes :

3.4.2.1 Cas 222222 : Raffinement spatial pour les flux scalaires

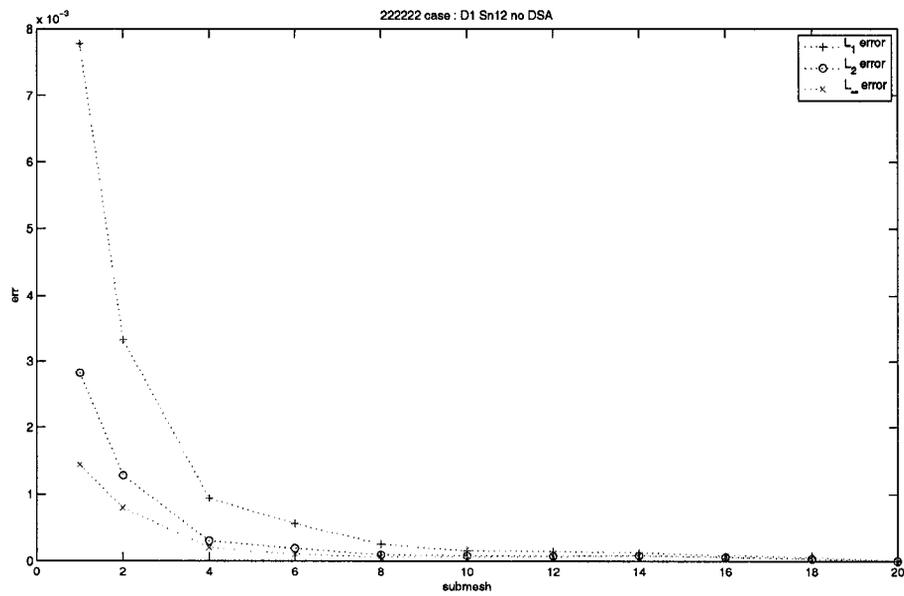


FIG. 3.3 Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires

3.4.2.2 Cas 222222 : Raffinement angulaire pour les flux scalaires

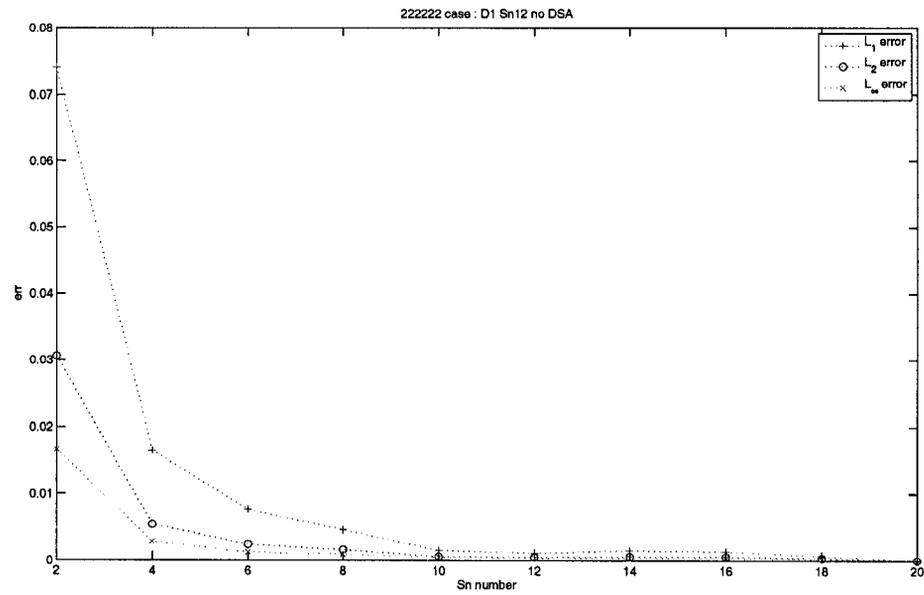


FIG. 3.4 Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux scalaires

3.4.2.3 Cas 222222 : Raffinement spatial pour les flux surfaciques

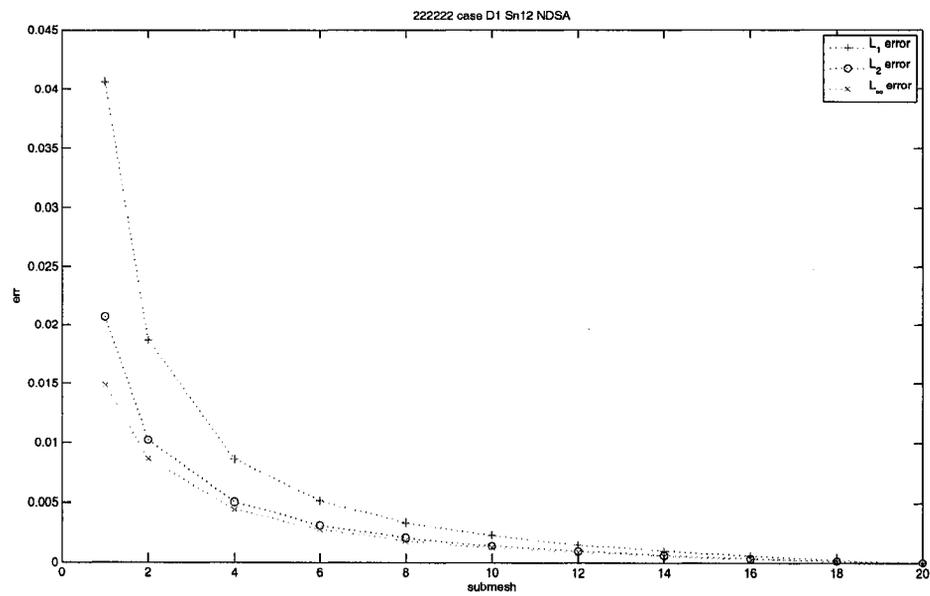


FIG. 3.5 Cas 22222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux surfaciques

3.4.2.4 Cas 222222 : Raffinement angulaire pour les flux surfaciques

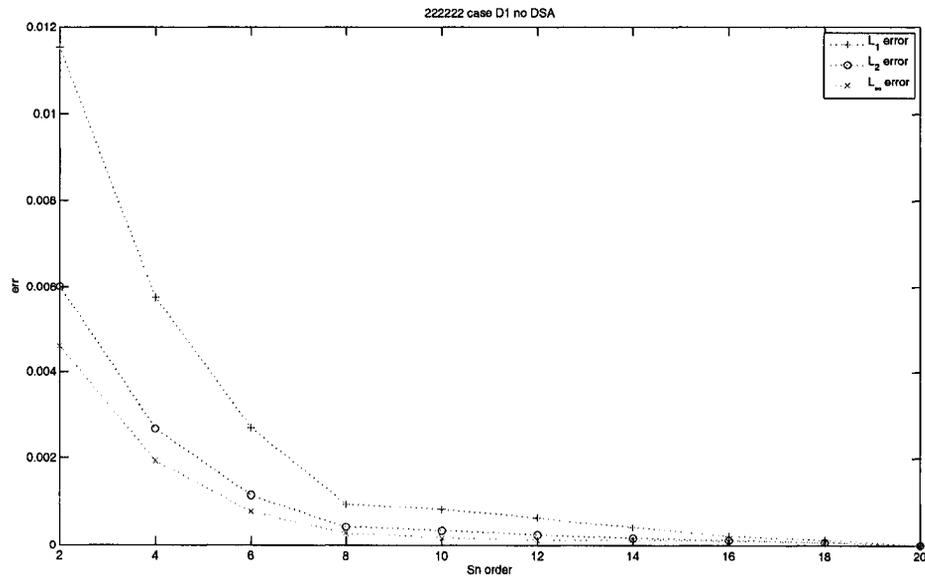


FIG. 3.6 Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques

3.4.2.5 Interprétations des résultats

On s'aperçoit en premier que les indices de discrétisations spatiales et angulaires doivent être plus élevés dans le cas des flux surfaciques. En effet, en ce qui concerne la variable spatiale, le régime monotone est atteint dans le cas des flux scalaires pour une discrétisation spatiale de 8, correspondant à 110592 régions pour notre géométrie. Pour la variable angulaire, on note que l'erreur décroît linéairement à partir de la quadrature S_8 .

Dans le cas des flux surfaciques, on doit avoir au minimum un indice de discrétisation spatiale de la géométrie de 10, soit maintenant 216000 régions. L'ordre de la quadrature angulaire doit quant à elle être désormais au minimum de 10. On prendra lors du traitement entier du benchmark les valeurs de discrétisation les plus importantes, c'est-à-dire celles correspondant au domaine monotone pour les flux surfaciques.

On réalise maintenant la même étude pour les cas 111111 et 333333.

3.4.3 Étude de convergence pour le cas 111111

3.4.3.1 Cas 111111 : Raffinement spatial pour les flux scalaires

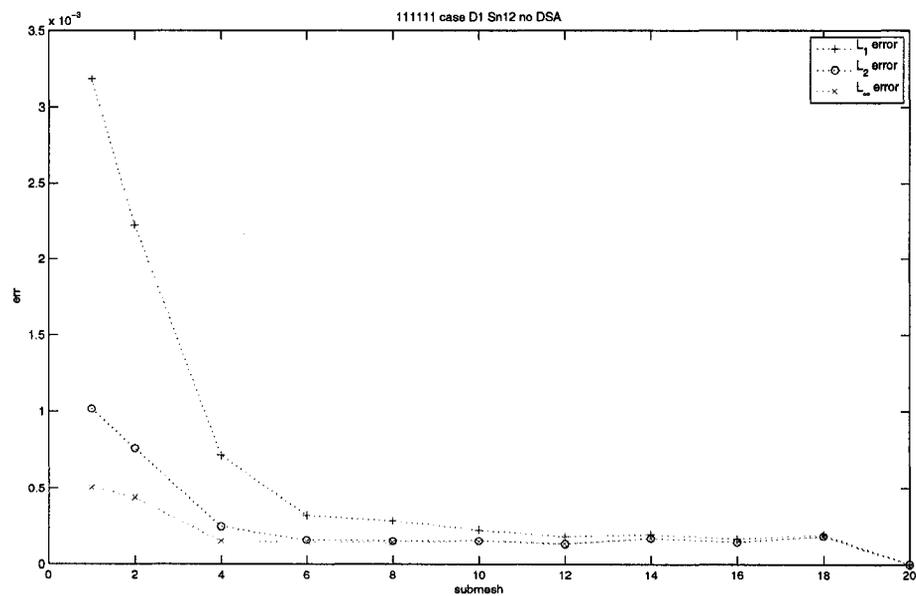


FIG. 3.7 Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires

3.4.3.2 Cas 111111 : Raffinement angulaire pour les flux scalaires

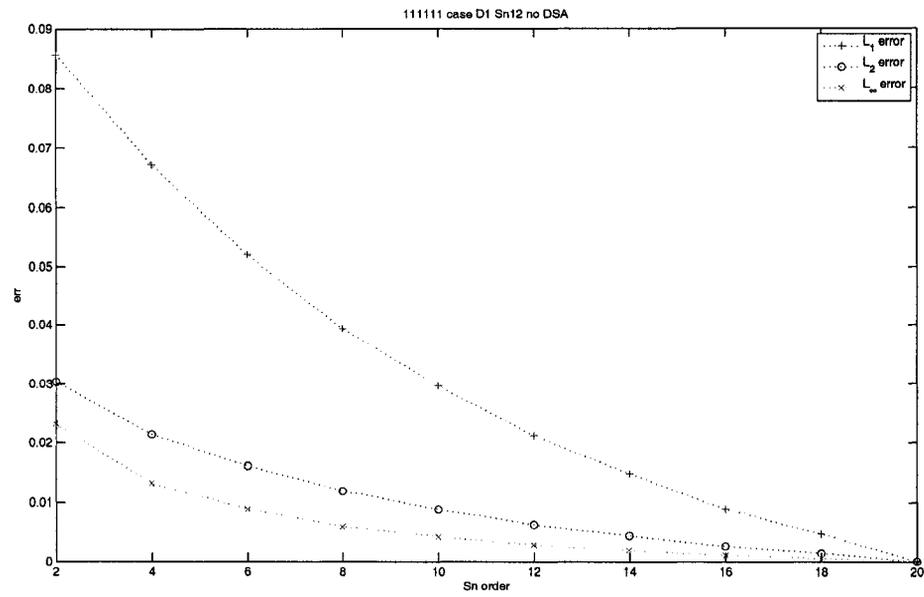


FIG. 3.8 Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux scalaires

3.4.3.3 Cas 11111 : Raffinement spatial pour les flux surfaciques

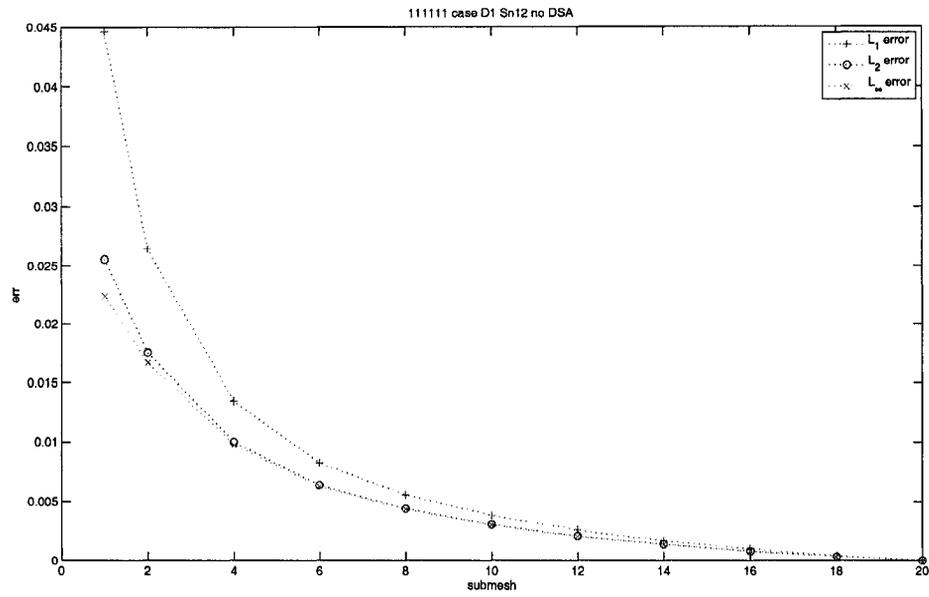


FIG. 3.9 Cas 11111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux surfaciques

3.4.3.4 Cas 111111 : Raffinement angulaire pour les flux surfaciques

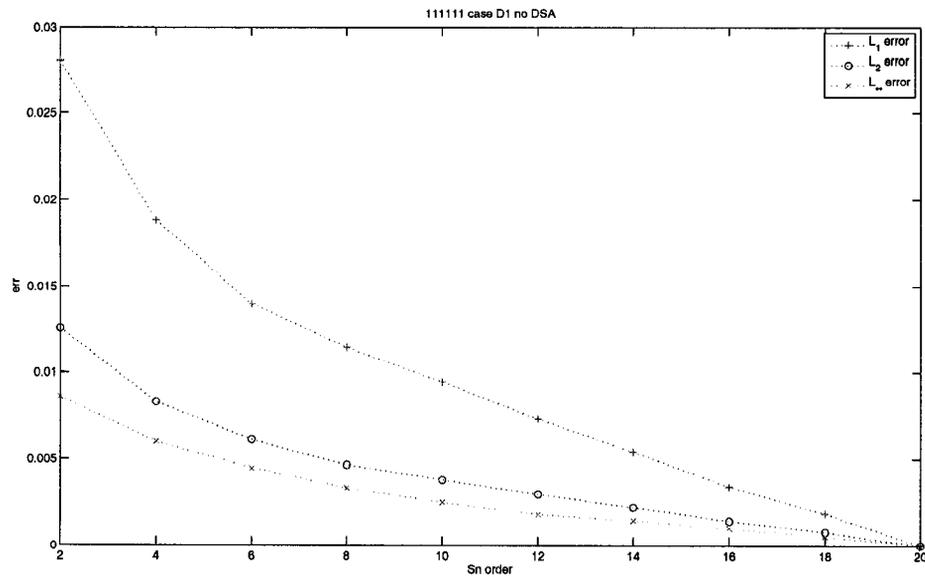


FIG. 3.10 Cas 111111 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques

3.4.3.5 Interprétation des résultats

Comme pour le cas 222222, le domaine de convergence monotone est atteint pour des indices de discrétisation plus élevés pour les flux surfaciques. On obtient au final dans ce cas comme ordre angulaire minimal 8, et comme indice de discrétisation spatial 8, soit 110592 cellules de calculs au minimum.

3.4.4 Étude de convergence pour le cas 333333

3.4.4.1 Cas 333333 : Raffinement spatial pour les flux scalaires

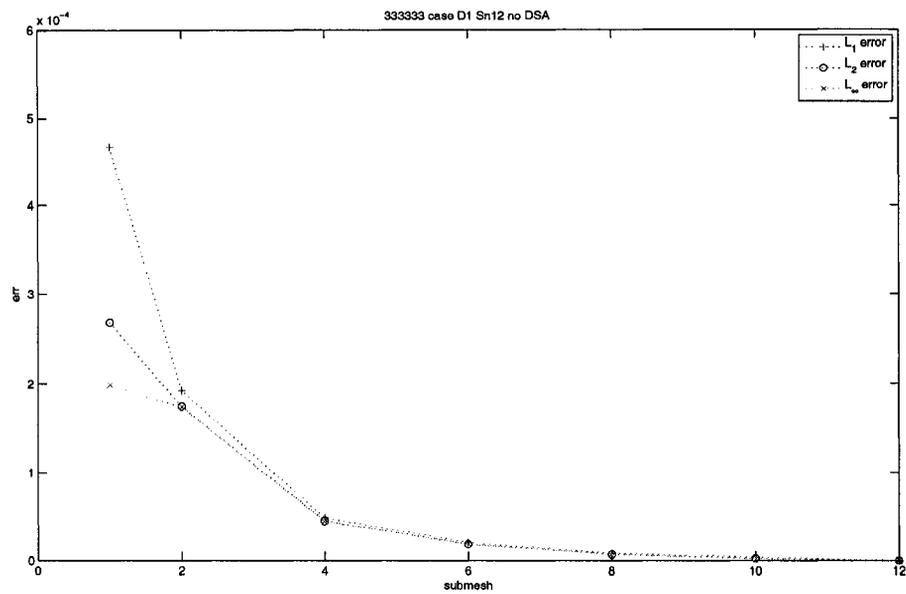


FIG. 3.11 Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires

3.4.4.2 Cas 333333 : Raffinement angulaire pour les flux scalaires

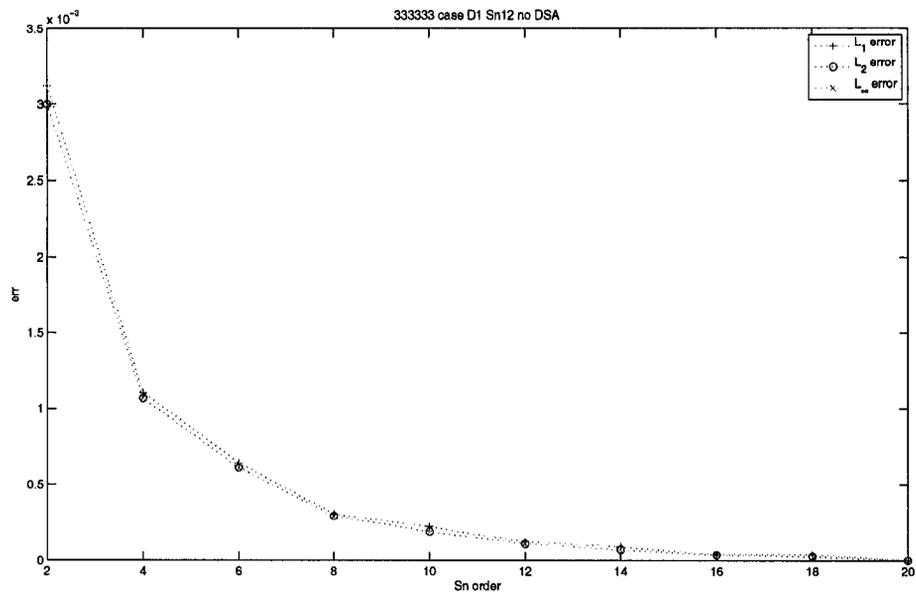


FIG. 3.12 Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux scalaires

3.4.4.3 Cas 333333 : Raffinement spatial pour les flux surfaciques

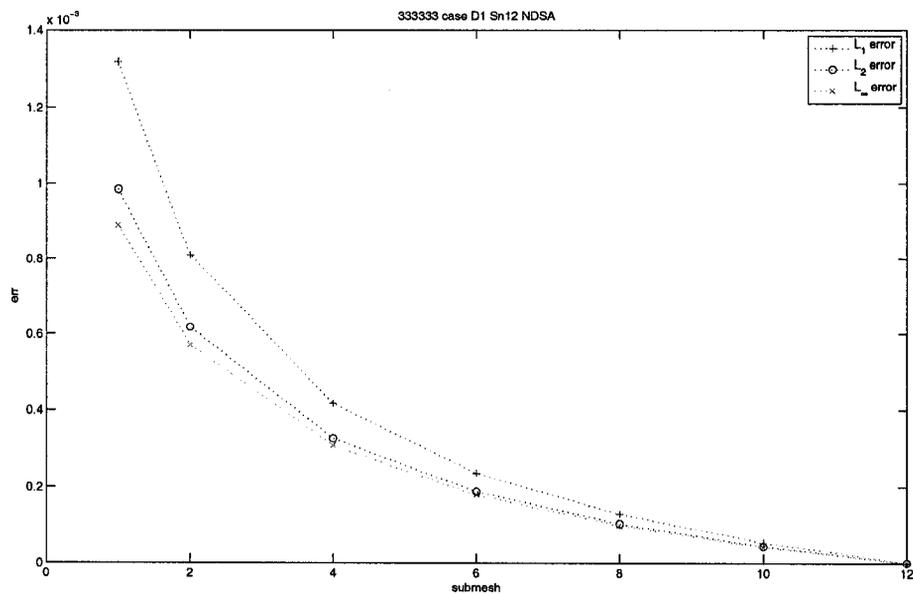


FIG. 3.13 Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux surfaciques

3.4.4.4 Cas 333333 : Raffinement angulaire pour les flux surfaciques

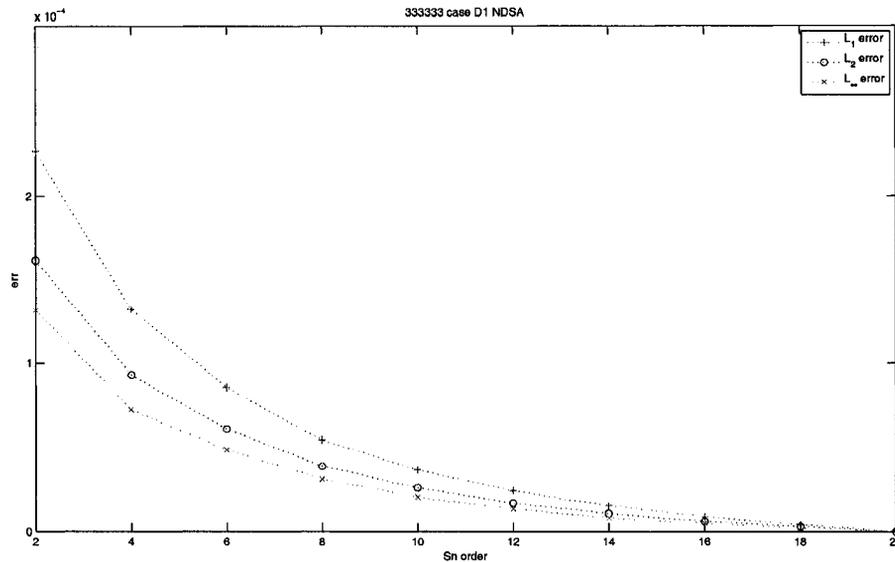


FIG. 3.14 Cas 333333 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques

3.4.4.5 Interprétation des résultats

On obtient également dans ce cas un ordre angulaire minimal de 8, et comme indice de discrétisation spatial 8, soit 1433600 cellules de calculs au minimum. Il est important de constater que c'est ce cas qui nous pose le plus de problèmes en terme de limitation de mémoire. Afin de traiter toutes les configurations possibles avec les mêmes paramètres, il a fallu vérifier que les ordres de discrétisation spatial et angulaire choisis n'entraîneront pas un dépassement de la capacité d'allocation mémoire maximale. L'option DSA introduit par ailleurs une limitation supplémentaire en terme de gestion de mémoire, ceci étant dû à l'allocation de l'espace mémoire supplémentaire pour la résolution de l'équation P_1 du formalisme DSA.

A la lumière des résultats précédents, on remarque une similitude pour les valeurs mi-

nimales de discrétisations angulaire et géométrique pour les 3 cas analysés, soit respectivement de 8 et 8, c'est-à-dire une quadrature S_8 avec une subdivision uniforme de la géométrie d'un facteur 8.

Nous allons désormais réaliser la même étude avec un schéma d'intégration spatial de type parabolique, uniquement pour le cas 222222 étant donné la remarque précédente.

3.4.5 Étude de convergence avec le schéma parabolique

3.4.5.1 Cas 222222 : Étude de convergence avec le schéma parabolique pour les flux scalaires

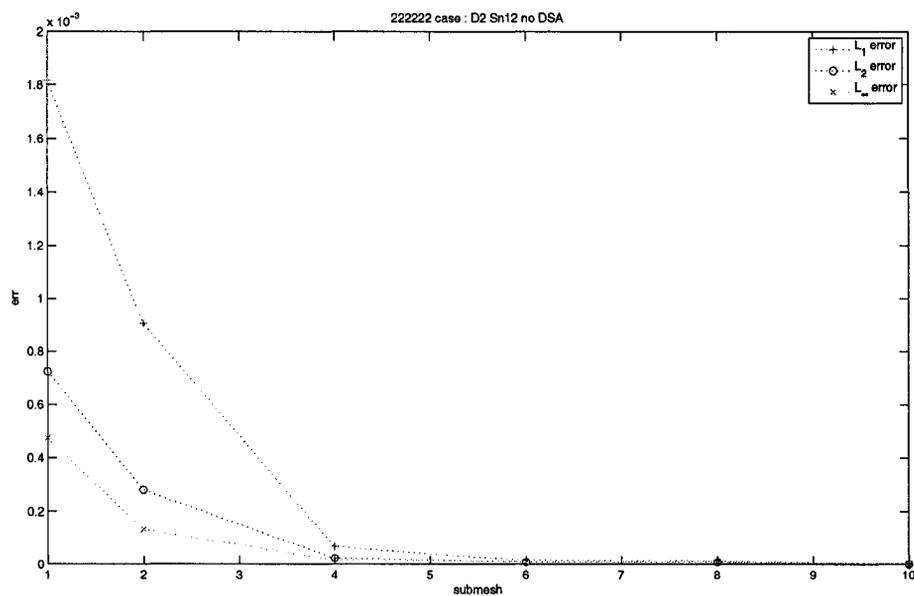


FIG. 3.15 Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement spatial pour les flux scalaires

3.4.5.2 Cas 222222 : Étude de convergence avec le schéma parabolique pour les flux surfaciques

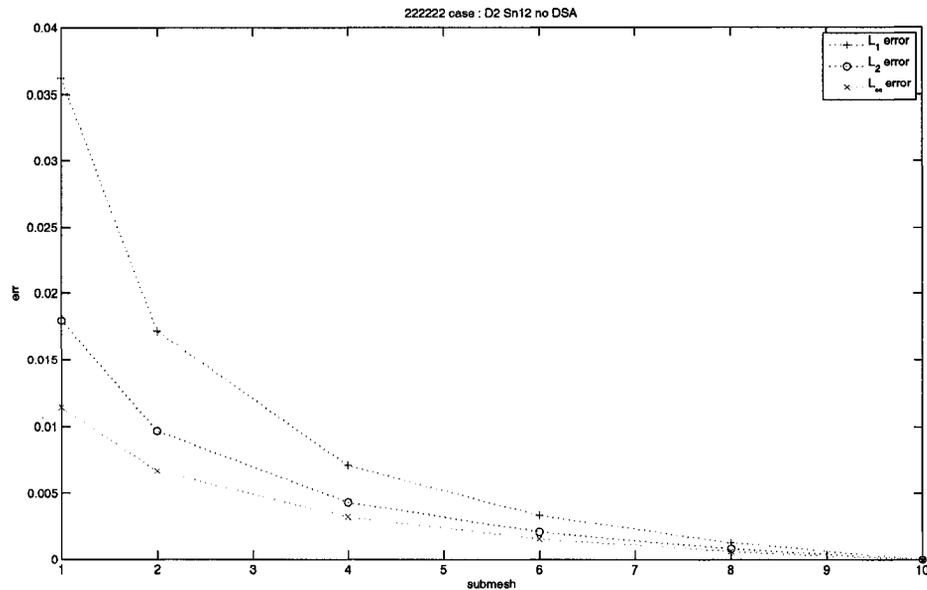


FIG. 3.16 Cas 222222 : évolution de l'erreur en fonction du raffinement angulaire pour les flux surfaciques

3.4.5.3 Interprétation des résultats

Comme attendu, le domaine de convergence monotone est atteint plus rapidement du point de vue spatial, et un indice de discrétisation spatial de 4 suffit dans ce cas là.

3.4.6 Conclusion de l'étude préliminaire de convergence

On peut maintenant sélectionner avec précision les paramètres de notre solveur, afin dans une première approche de traiter entièrement la suite de benchmarks, et également de

s'assurer que nos résultats numériques sont dans le domaine de convergence monotone. Nous devons par ailleurs fournir 3 études complètes, chacune bien entendue devant être dans le domaine monotone. On a ainsi sélectionné les 3 configurations suivantes :

Configuration 1, correspondant aux paramètres par défaut :

- Schéma Diamant Linéaire sans fixup.
- Quadrature S_8 de type LQ_N avec μ_1 optimisé.
- Discrétisation spatiale de la géométrie par un facteur de 8.
- Accélération de la convergence interne par préconditionnement DSA.

Configuration 2 :

- Schéma Diamant Linéaire sans fixup.
- Quadrature S_{12} de type LQ_N avec μ_1 optimisé.
- Discrétisation spatiale de la géométrie par un facteur de 10.
- Pas d'accélération de la convergence interne.

Configuration 3 :

- Schéma Diamant Parabolique.
- Quadrature S_{20} de type LQ_N avec μ_1 optimisé.
- Discrétisation spatiale de la géométrie par un facteur de 4.
- Pas d'accélération de la convergence interne.

3.5 Présentation des résultats

3.5.1 Propriétés numériques du solveur

Les calculs ont été réalisés en simple précision, avec le critère de convergence sur les flux suivant :

$$\frac{\|\vec{\phi}^{(n+1)} - \vec{\phi}^{(n)}\|_{\infty}}{\|\vec{\phi}^{(n)}\|_{\infty}} \leq 10^{-5}$$

Afin de comparer nos résultats vis-à-vis des solutions MCNP de référence, nous avons retenu deux méthodes d'évaluation de l'erreur :

- l'erreur relative locale en pourcentage sur les flux pour les 23 régions par configuration ;
- l'erreur RMS globale par configuration.

L'erreur relative sur les valeurs des flux recherchés nous permettra de comparer région par région, et éventuellement de mettre en évidence certains écarts locaux.

L'erreur RMS nous donnera quant à elle une estimation de l'erreur globale commise pour chaque cas.

3.5.2 Analyse de l'erreur sur nos résultats

Dans cette partie, nous allons présenter quelques résultats donnant l'erreur relative locale pour certaines régions. Nous avons séparés les résultats pour lesquels l'écart relatif est relativement faible pour tous les flux calculés, et les cas pour lesquels certaines régions présentent des valeurs très différentes.

3.5.2.1 Présentation des résultats pour des cas homogènes

On sélectionne à titre d'exemple les cas suivants :

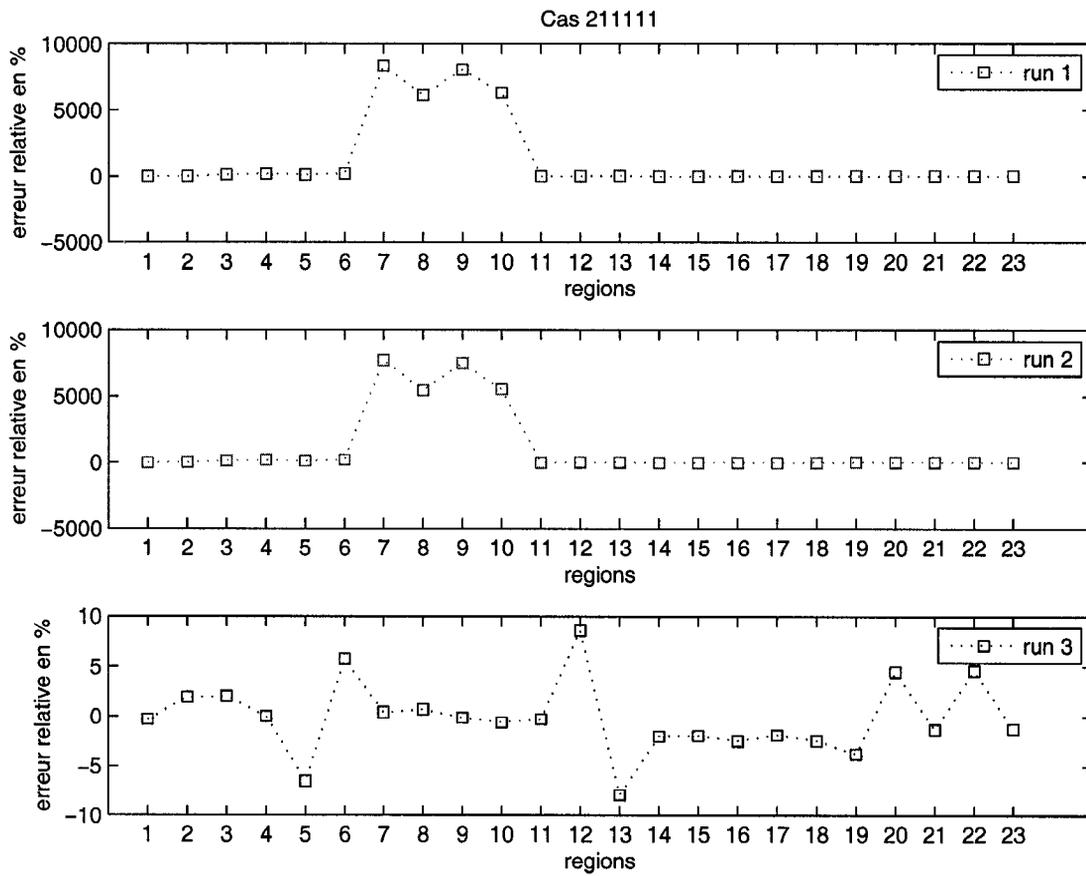


FIG. 3.17 Erreur relative pour le cas 211111

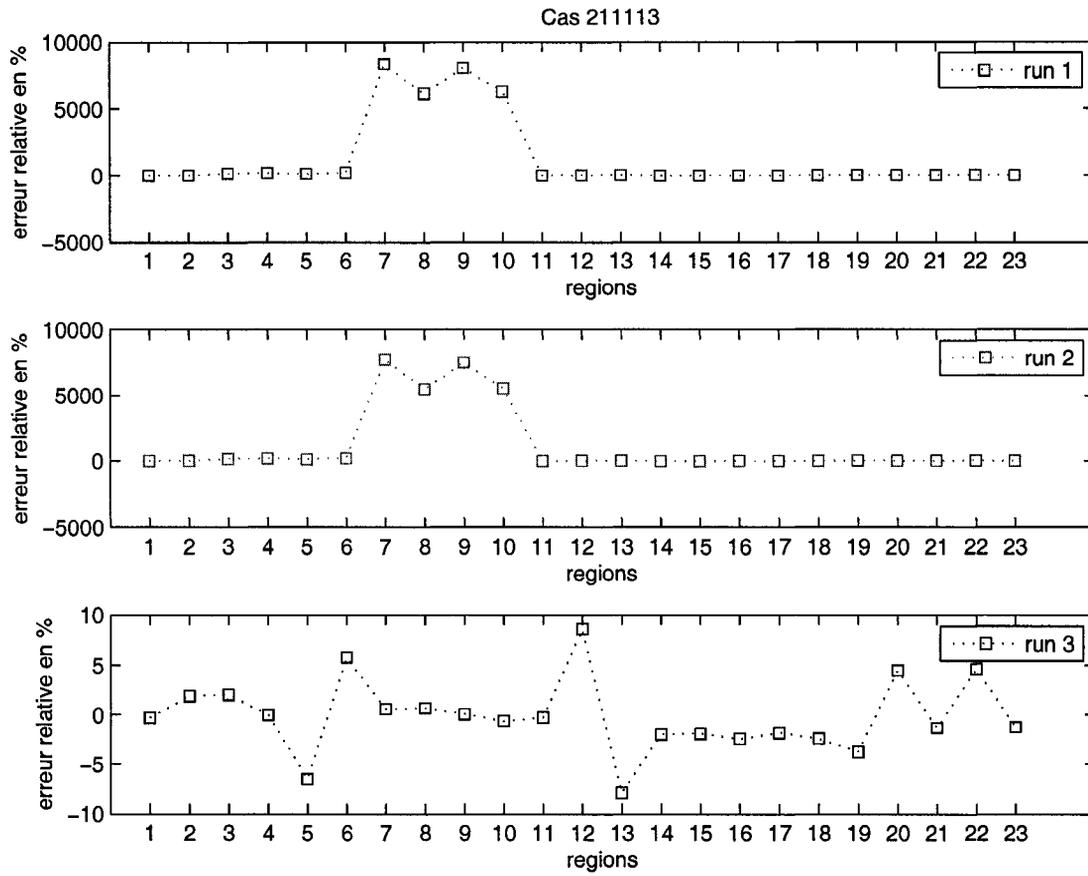


FIG. 3.18 Erreur relative pour le cas 211113

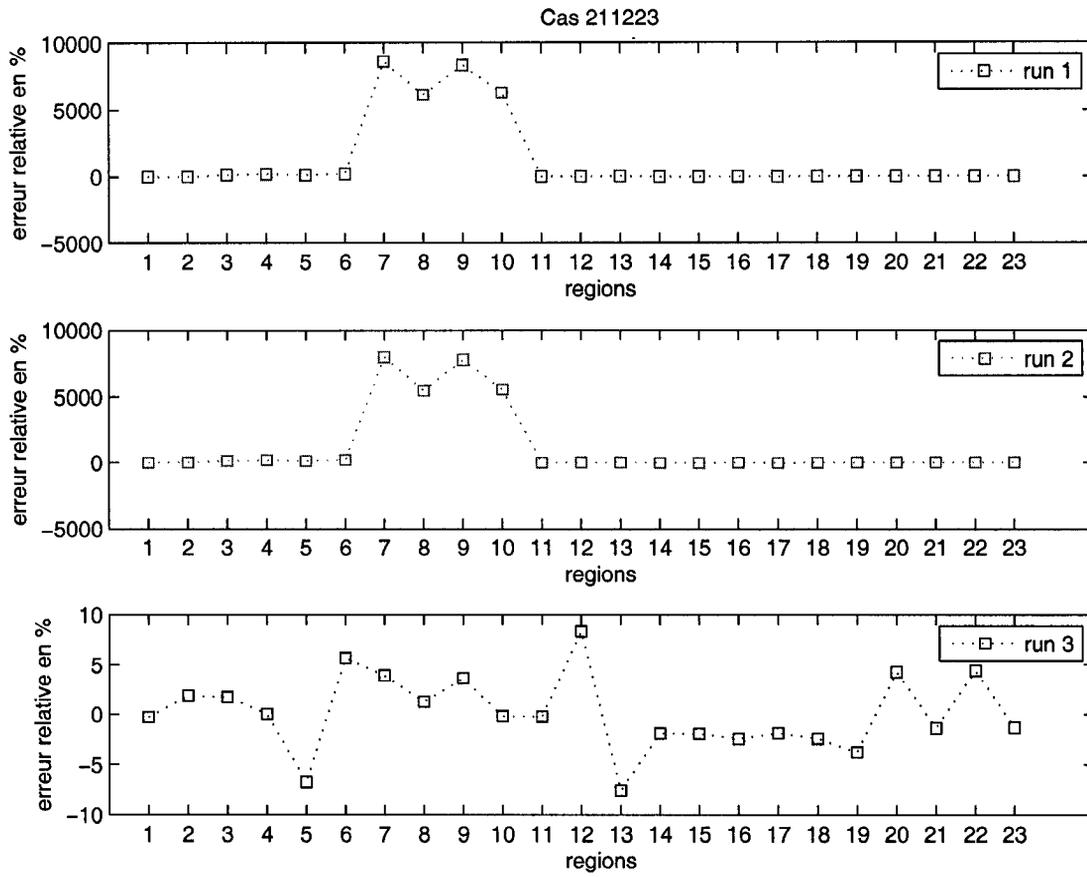


FIG. 3.19 Erreur relative pour le cas 211223

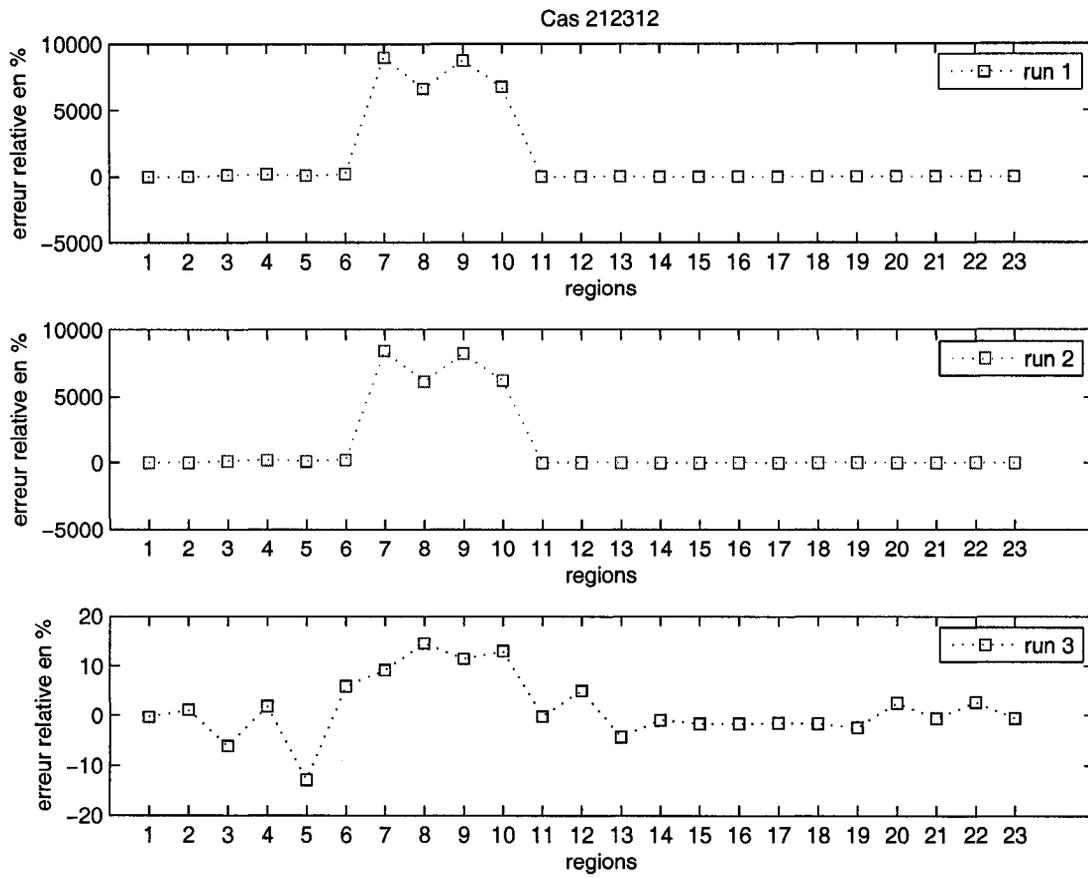


FIG. 3.20 Erreur relative pour le cas 212312

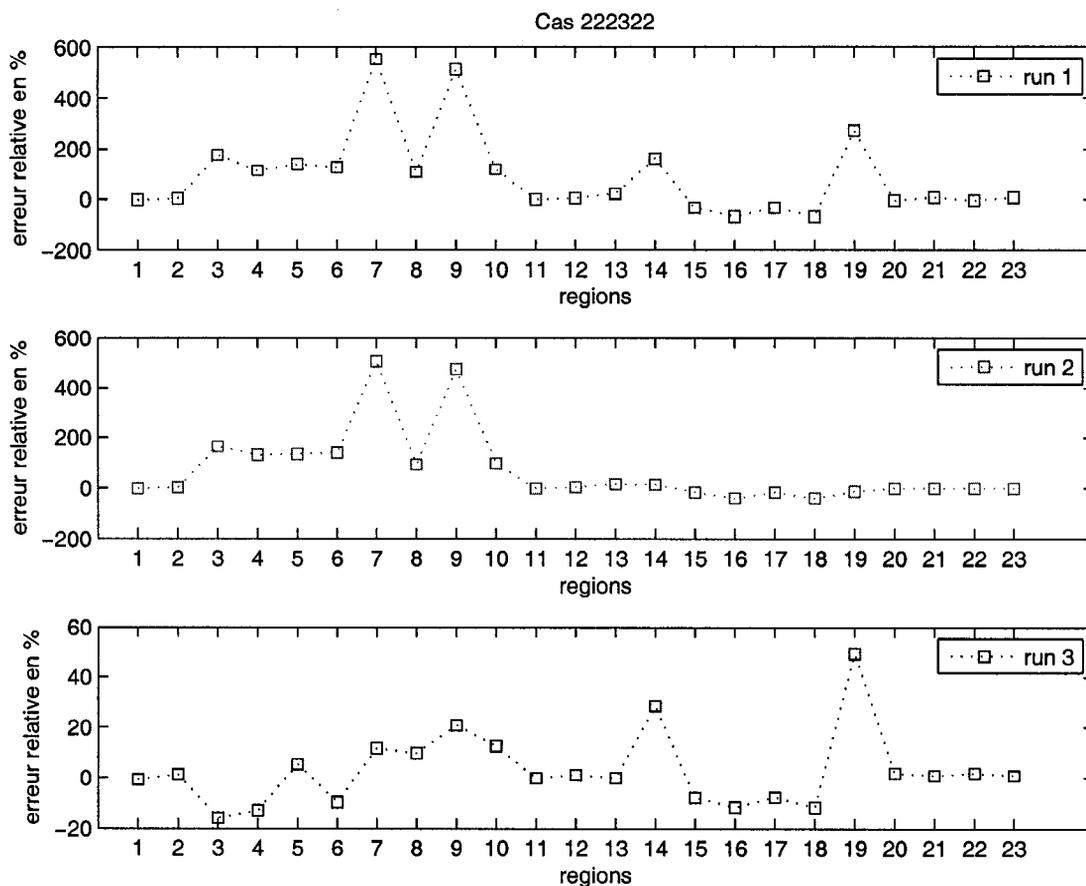


FIG. 3.21 Erreur relative pour le cas 222322

On constate premièrement que les résultats issus des calculs 1 et 2, réalisés en schéma diamant linéaire et pour une quadrature angulaire respectivement S_8 et S_{12} , présentent pour tout les cas traités au moins une région dont l'écart est très important. A l'inverse, les résultats générés en schéma diamant parabolique, avec une quadrature S_{20} présentent des écarts corrects. Il apparait dès lors que les paramètres de discrétisation pour les deux premiers tests ne soient pas suffisants pour traiter correctement la totalité du benchmark. Il est nécessaire alors de vérifier si une augmentation de l'ordre de la quadrature avec le schéma diamant peut mener à une diminution significative de l'erreur relative.

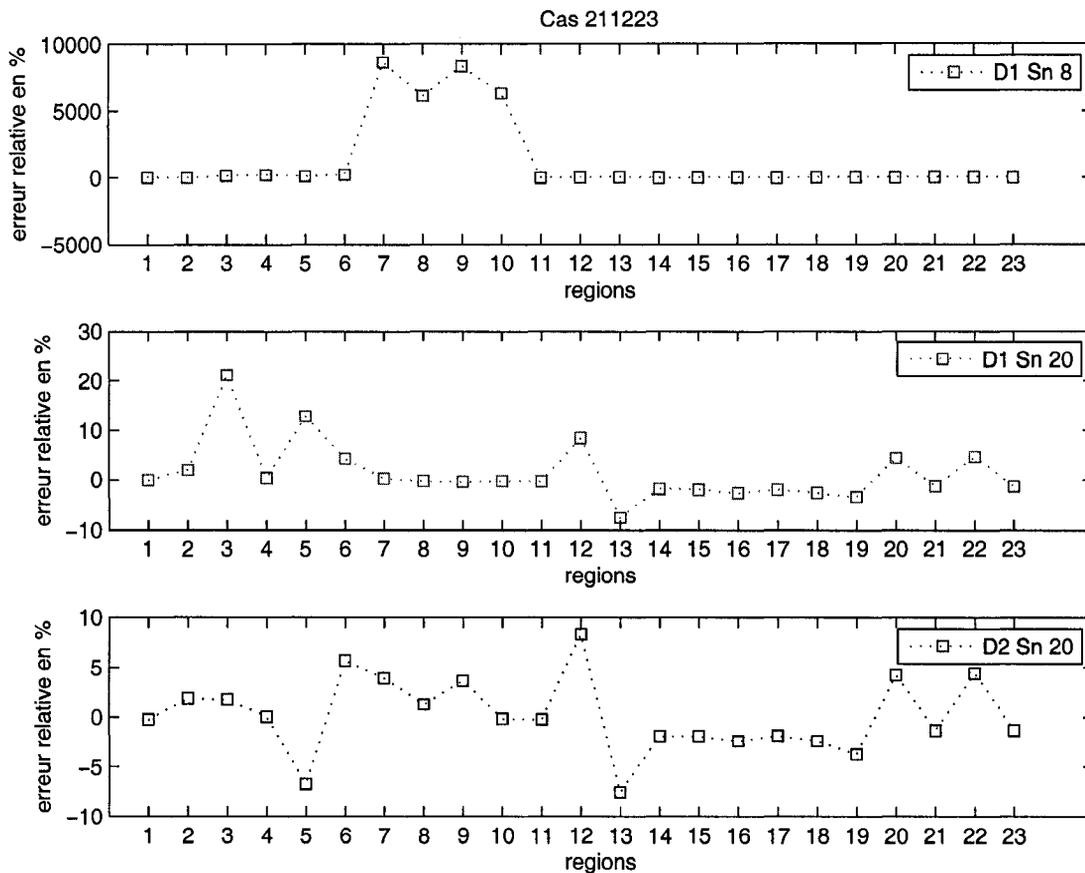


FIG. 3.22 Erreur relative pour le cas 211223 : schéma diamant

Pour ce cas précis, les trois calculs ont été fait respectivement avec les paramètres suivants :

- 1 : Schéma diamant linéaire, quadrature angulaire S_8 et discrétisation spatiale de 8 ;
- 2 : Schéma diamant linéaire, quadrature angulaire S_{20} et discrétisation spatiale de 8 ;
- 3 : Schéma diamant parabolique, quadrature angulaire S_{20} et discrétisation spatiale de 4 .

On s'aperçoit que l'augmentation de la quadrature angulaire fait fortement diminuer l'écart relatif entre nos calculs S_N et les résultats MCNP. Par ailleurs, le schéma diamant parabolique permet comme prévu un gain significatif en terme de précision par rapport au schéma diamant linéaire.

Ces résultats peuvent être généralisés finalement à tous les cas du benchmark en utilisant l'erreur RMS telle que sur le graphique suivant pour les 30 premières configurations du benchmark.

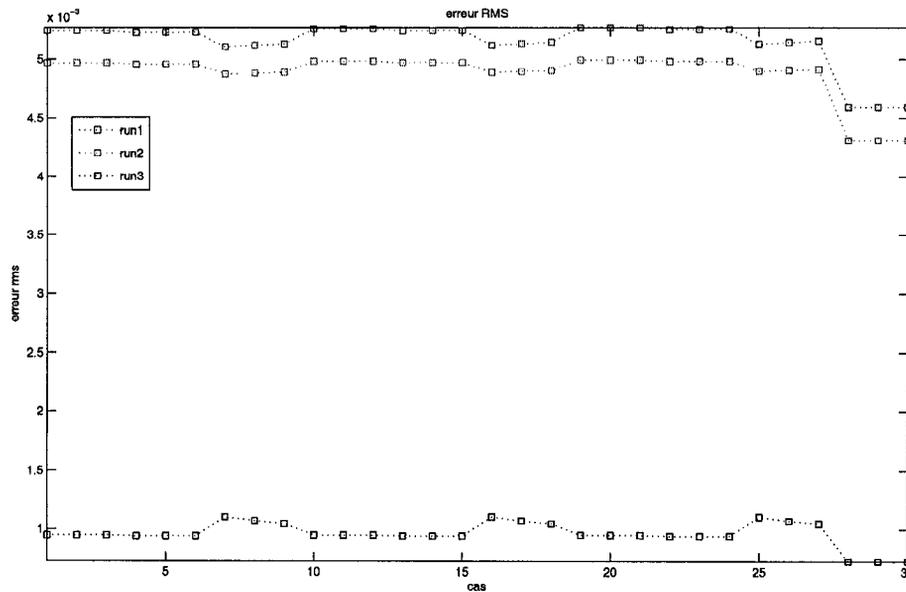


FIG. 3.23 Erreur RMS pour les 30 premiers cas

On s'aperçoit que l'écart RMS est très largement supérieur pour les cas 1 et 2. La première remarque importante est donc que les ordres des quadratures angulaires des calculs 1 et 2 sont trop faibles. Dans ces deux cas, la forte dépendance angulaire du flux dans la majorité des cas est mal prise en compte, et en conséquence nos résultats sont très éloignés.

En tenant compte de cette remarque, nous allons dorénavant uniquement considérer les résultats issus du run 3, qui correspond aux paramètres maximums possibles dans notre solveur pour traiter tout les cas du benchmark en raison des problèmes d'espace mémoire évoqués précédemment.

3.5.2.2 Analyse des cas présentant un fort écart relatif

On peut distinguer à prime abord deux difficultés :

- Les cas à géométries extrêmes, apparaissant quand les paramètres géométriques prennent des valeurs définissant un problème peu physique ;
- Les cas où les sections efficaces et les coefficients de diffusion sont fortement hétérogènes.

Ainsi, les configurations pour lesquelles $L = 0.1$, où l'on obtient une géométrie quasiment plate, et $L = 5$ présentent au moins une région où le flux calculé va être en écart relatif très différent.

Seuls les configurations pour lesquelles $L = 1$, menant à un parallélépipède externe purement cubique, peuvent présenter pour toutes les zones des écarts relatifs corrects. Il apparaît que la majorité des configurations du benchmark entraîne des écarts relatifs supérieurs à 100 % sur au moins une valeur de flux calculée.

Les graphiques suivants illustrent ces phénomènes, dans un premier temps pour les cas 111111 et 311111, où la difficulté est purement géométrique (benchmark plat), ainsi que par les cas 113111 et 313111, présentant une forte hétérogénéité sur les sections efficaces totales ($\Sigma_1 = 5$, $\Sigma_2 = 0.1$).

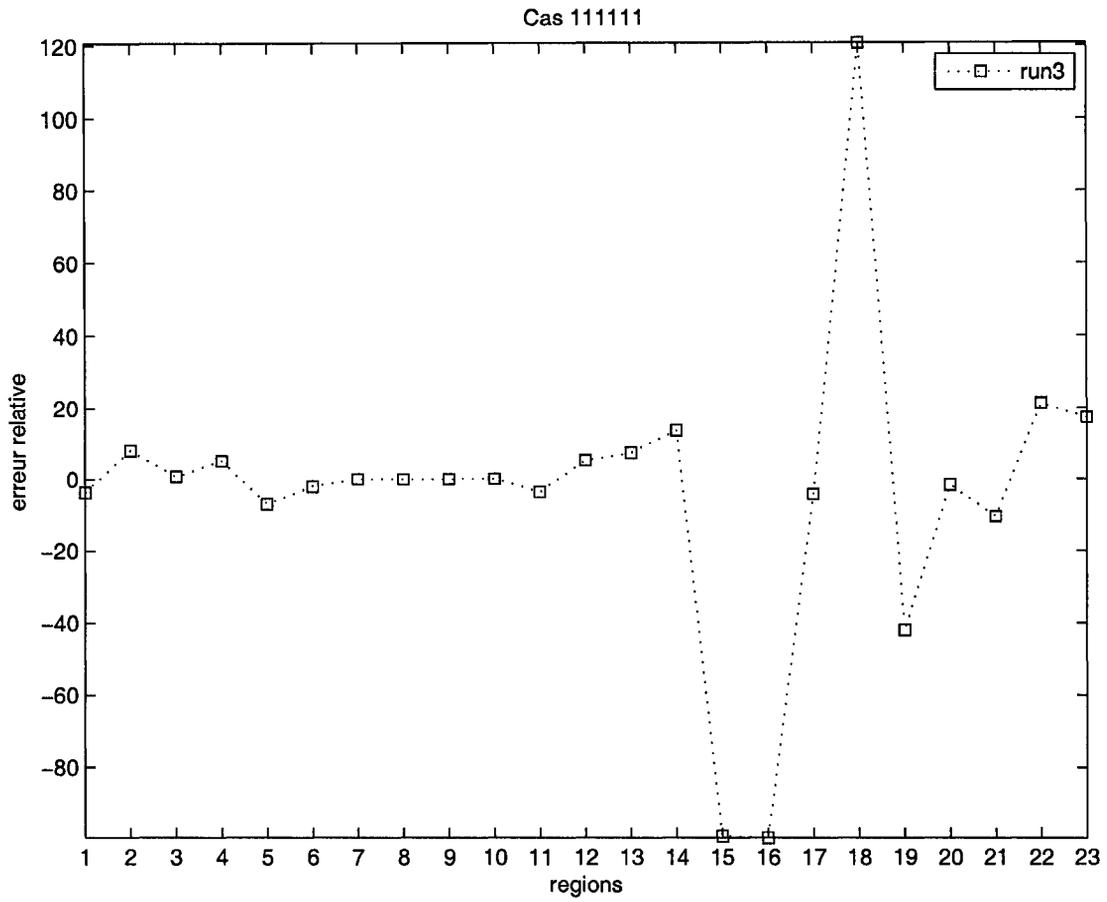


FIG. 3.24 Erreur relative : cas 111111

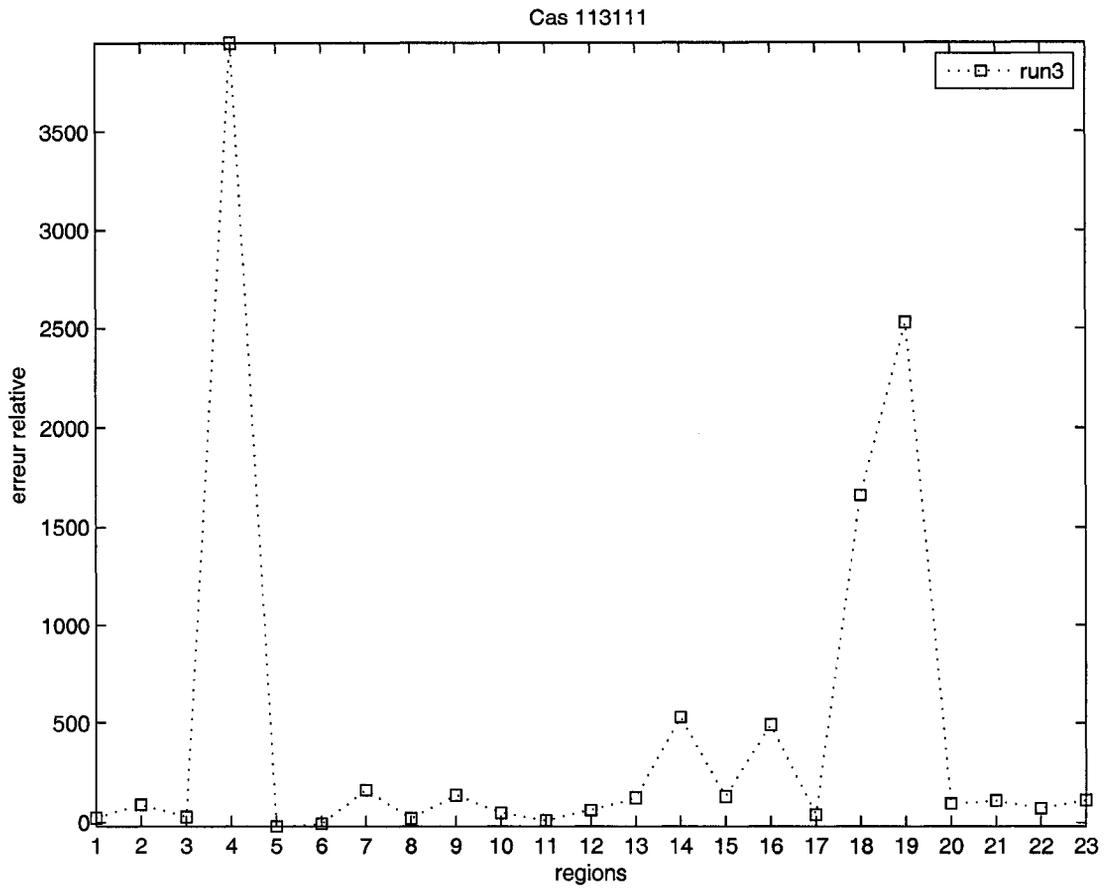


FIG. 3.25 Erreur relative : cas 113111

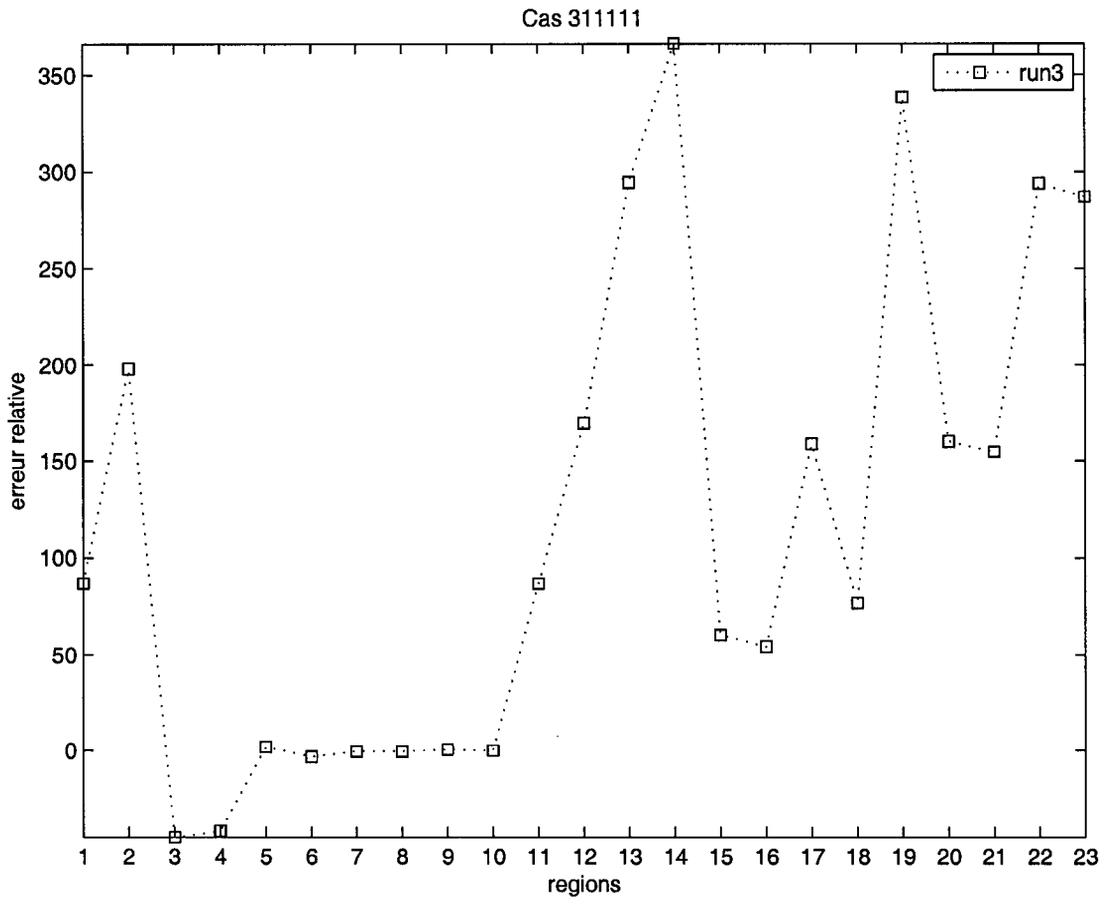


FIG. 3.26 Erreur relative : cas 311111

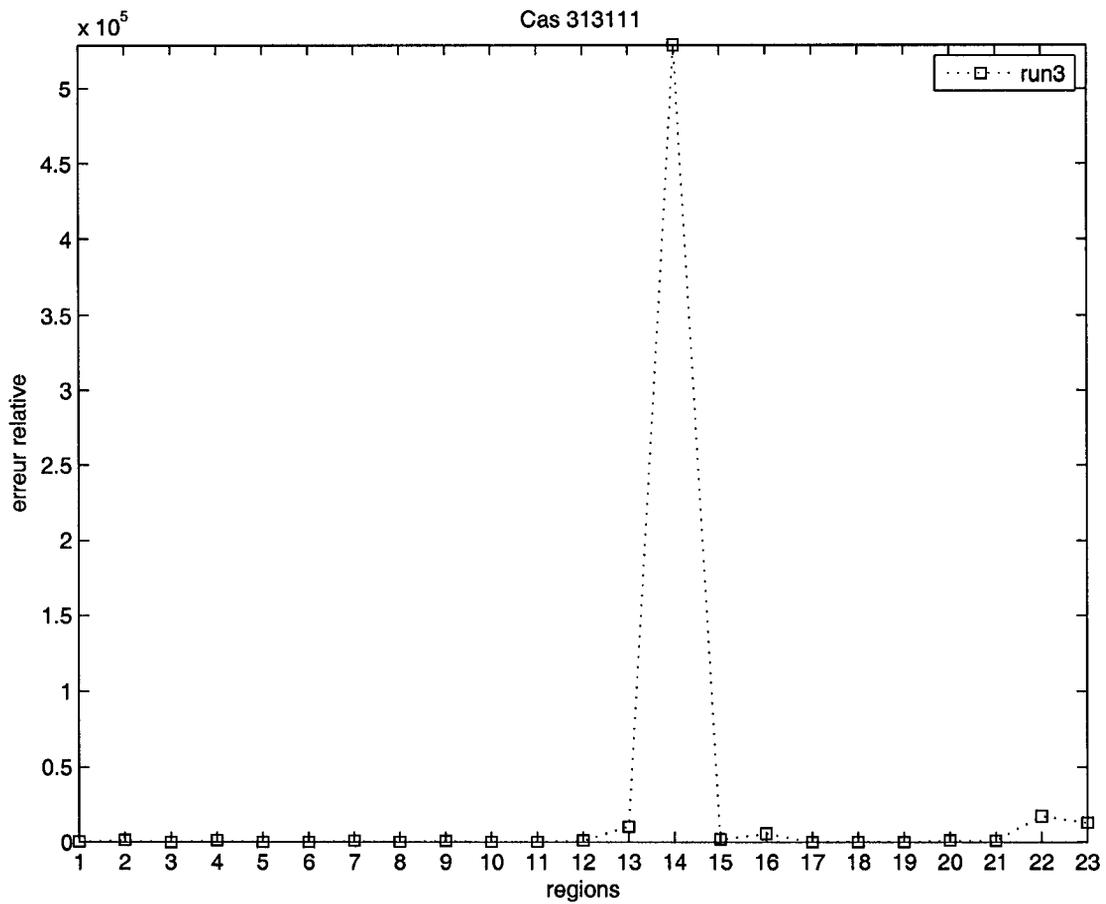


FIG. 3.27 Erreur relative : cas 313111

Ces quatre exemples peuvent être complétés par toute une panoplie de cas similaires, néanmoins les conclusions seront les mêmes : de forts écart relatifs sont présents pour une majorité des configurations de la suite du benchmark. Toutefois, nous retrouvons pour la majorité des cas une amélioration de nos résultats en augmentant l'ordre de raffinement spatial et angulaire de nos calculs.

3.5.2.3 Analyse des résultats présentant un écart croissant avec l'indice de discrétisation

Il apparaît cependant des cas où l'augmentation de nos paramètres de discrétisation entraîne une augmentation de l'écart entre nos résultats S_N et les résultats MCNP. Ceci n'intervient que pour les derniers cas du benchmark présentant des valeurs de flux très faibles dans certaines régions, et pour lesquels les résultats MCNP présentent une erreur statistique relativement conséquente.

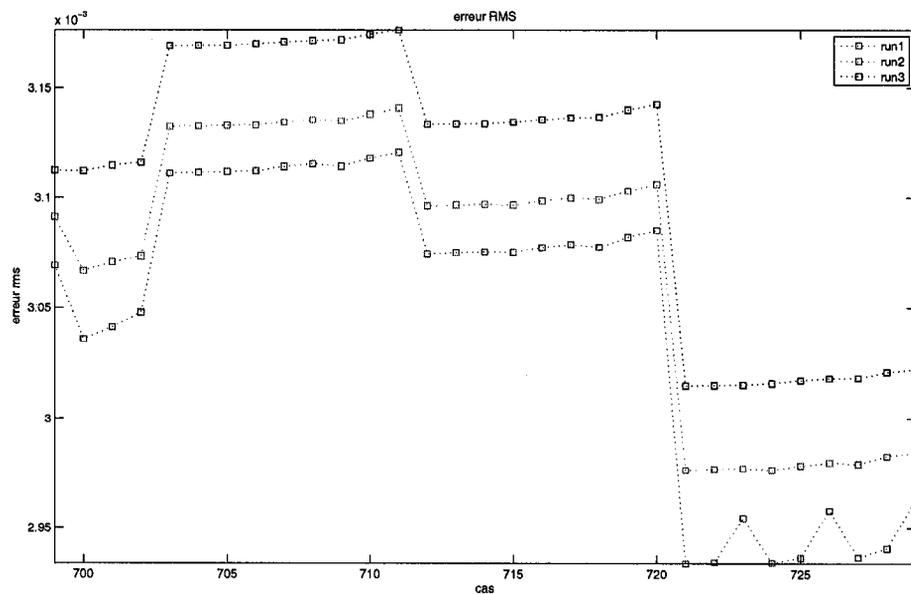


FIG. 3.28 Erreur RMS pour les 30 derniers cas

On peut présupposer un problème de convergence des résultats MCNP, mais ceci sera par la suite réexaminé lors de la publication des solutions de référence finales.

3.6 Conclusion

L'analyse de nos résultats nous pousse à mettre en avant les limitations de notre solveur S_N . La plupart des configurations du benchmark exigent pour être traitées convenablement une discrétisation angulaire maximale, dans notre cas basée sur une quadrature LQ_N de type 2 limitée à l'ordre S_{20} . La localisation de la source, la forte hétérogénéité ainsi que les cas hautement diffusifs font que la plupart des cas du benchmark peuvent mener à observer un effet de raies. Ce phénomène est récurrent dans le cadre des méthodes S_N , et se traduit par l'apparition d'oscillations non physiques pour les valeurs calculées du flux, typiquement dans les conditions décrites précédemment. La cause est principalement un trop bas niveau de discrétisation angulaire. On peut supposer que l'implémentation d'autres types de quadratures permettraient un traitement amélioré de la variable angulaire, et ainsi de mieux prendre en compte la forte dépendance angulaire du flux dans certaines régions.

Par ailleurs, l'ordre d'intégration cubique n'a pu être utilisé de manière systématique, ceci étant dû à un problème de stabilité numérique intervenant dans les cas où les dimensions géométriques sont très faibles.

Il a également été décelé que l'utilisation du schéma DSA conjointement aux schémas d'ordre parabolique et cubique venait perturber numériquement la solution, et entraînait une divergence du solveur.

Il est apparu également une forte limitation en terme d'espace mémoire, empêchant dans certains cas de raffiner très fortement notre géométrie.

Toutefois, dans les configurations les moins extrêmes du benchmark, les résultats S_N présentent des écarts relativement faibles par rapport aux résultats MCNP, soit environ 5 à 10 % au maximum.

Enfin, dans un souci de cohérence la comparaison de nos résultats avec d'autres solveurs S_N tridimensionnels nous sera grandement utile, afin d'éventuellement envisager des améliorations futures.

CONCLUSION

Au cours de ce travail, nous avons implanté une méthode aux ordonnées discrètes tridimensionnelle à ordres élevés dans le cadre de la résolution de l'équation de transport multigroupe.

Le solveur 3D cartésien utilisant le formalisme S_N est maintenant disponible dans le code de réseau DRAGON, et conjointement à ce travail, une attention particulière a été apportée aux méthodes d'accélération de la convergence de la méthode S_N . Ainsi, deux méthodes complémentaires sont désormais implantés :

- Le formalisme DSA, reposant sur une approximation P_1 du flux par la méthode des éléments finis mixtes-duaux de Raviart-Thomas et avec une intégration de type Gauss-Legendre ;
- L'utilisation de méthode de Krylov, dans notre cas le solveur GMRES(k) a été mis en place dans le cadre de la résolution des itérations internes de la méthode S_N .

L'ensemble de ce travail a par la suite été validé, en suivant la procédure suivante :

- Comparaison S_N 2D/3D sur des benchmarks isotropes et anisotropes simples à un ou deux groupes d'énergie ;
- Comparaison S_{n+1}/SP_n en 3D sur des benchmarks isotropes à deux groupes ;
- Comparaison avec des solutions de type Monte-Carlo sur le benchmark NEA3D-TAB-2007.

L'ensemble de la phase de validation a mis en évidence deux problèmes à éventuellement prendre en considération lors de l'utilisation future du solveur S_N 3D :

- Un phénomène de perturbation numérique apparaît de manière ponctuel lors de l'utilisation du schéma cubique, notamment lors de l'utilisation de dimensions très faible.
- Une incohérence entre les schémas DSA et les ordres parabolique et cubique, non systématiques également, qui pourrait être due également à un problème d'ordre numérique.

Néanmoins ces phénomènes n'apparaissent que dans un nombre restreint de cas, et ne devrait pas affecter l'utilisation de notre méthode aux ordonnées discrètes tridimensionnelle lors de travaux futurs.

Enfin il conviendrait de s'interroger sur la possibilité d'implanter des quadratures angulaires plus élevées et d'éventuellement paralléliser notre code, comme cela a été effectué pour la majorité des codes S_N tridimensionnels.

RÉFÉRENCES

ADAMS, M.L. & LARSEN, E.W. (2002) ; Fast Iterative Methods for Discrete Ordinates Particles Transport Calculations, *Progress in Nuclear Energy*. Vol. 40. No. 1. pp. 3-159.

ALCOUFFE, R.E., (1977) ; Diffusion Synthetic Acceleration Methods for the Diamond- Differenced Discrete-Ordinates Equations, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 64, pp. 344-355.

ARGONNE CODE CENTER : Benchmark Problem Book (1977) ; ANL-7416, Supp.2, ID11-A2, Argonne National Laboratory.

BRANTLEY, P.S. & LARSEN, E.W. (2000) ; The Simplified P3 Approximation, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 134, pp. 1-21.

CARLSON, B.G. (1970) ; Transport Theory : Discrete Ordinates Quadrature over the Unit Sphere, Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4554.

CARLSON, B.G. (1971) ; Tables of Equal Weight Quadrature EQN Over the Unit Sphere, Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4734.

CHANDRASEKHAR, S. (1960) ; *Radiative Transfer*, Dover, New York.

DUO, I.J & AZMY, Y.Y. (2007) ; Error Comparison of Diamond Difference, Nodal, and Characteristic Methods for Solving Multidimensional Transport Problems with the Discrete Ordinates Approximation, *Nuclear Science and Engineering* : 156, 139-153.

GELBARD, E., DAVIS, J., & PEARSON J. (1959) ; Iterative Solutions to the Pl and Double-Pl Equations, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 5, pp. 36-44.

GELBARD, E.M., (1968) ; Dans : Greenspan, H., Kelber, C.K., Okrent, D. (Eds) ; *Computing Methods in Reactor Physics*, Gordon and Breach (Chapter 4).

HÉBERT, A. (1993) ; Application of a Dual Variational Formulation to Finite Element Reactor Calculations, *Ann. nucl. Energy*, 20, 823.

HÉBERT, A. (2006a) ; LCM, Guide du Programmeur. Report IGE-296. Institut de Génie Nucléaire, Ecole Polytechnique de Montréal.

HÉBERT, A. (2006b) ; The Search for Superconvergence in Spherical Harmonics Approximations, Nuclear Science and Engineering, 154, 134-173.

HÉBERT, A. (2006c) ; High Order Diamond Differencing Schemes, Annals of Nuclear Energy 33 1479-1488.

HÉBERT, A. (2007a) ; A User Guide for TRIVAC Version 4, Report IGE-293. Institut de Génie Nucléaire, Ecole Polytechnique de Montréal.

HÉBERT, A. (2007b) ; Applied Reactor Physics : notes de cours, IGE-281 ; Institut de Génie Nucléaire, Ecole Polytechnique de Montréal.

KOPP, H.J. (1963) ; Synthetic Method Solution for the Transport Equation. Nuclear Science and Engineering 17, p. 65.

JENAL, J.P., ERICKSON, P. J., RHOADES, W. A., SIMPSON, D.B. & WILLIAMS, M. L. (1977) ; The Generation of a Computer Library for Discrete Ordinates Quadrature Sets, Report ORNL/TM-6023, Oak-Ridge National Laboratory, Tennessee.

LATHROP, K. (1969) ; Spatial Differencing of the Transport Equation : Positivity vs. Accuracy, Journal of Computational Physics, Vol. 4, pp. 475-498.

LEE, C. (1962) ; The Discrete S_N Approximations to Transport Theory, LA-2595, Los Alamos Scientific Laboratory.

LONGONI, G. (2004) ; Advanced quadrature sets, acceleration and preconditioning techniques for the discrete ordinates method in parallel computing environments, PHD thesis, University of Florida.

MARLEAU, G., HÉBERT, A. & ROY, R. (2007) ; A User Guide for DRAGON Version4. Report IGE-294. Montréal : Institut de Génie Nucléaire, Ecole Polytechnique de Montréal. Le code DRAGON Version4 peut être téléchargé sur le site <http://www.polymtl.ca/merlin/>.

NEA/NSC (2007). Expert group on 3D radiations transport benchmarks. Benchmarking the Accuracy of Solution of 3-Dimensional Transport Codes and Methods over a Range in Parameter Space. NEA/NSC Documentation.

PATTON, B. W. (1996); Application of Krylov Subspace Iterative Techniques to the Numerical Solution of the Neutron Transport Equation. PhD thesis, University of Michigan, Ann Arbor.

PETROVIC, B., HAGHIGHAT, A. (1995); New Directional Theta-Weighted S_N Differencing Scheme, Transaction of the ANS, 73 : 195-197.

ROY, R., HÉBERT, A. (2000); The « GAN Generalized Driver ». Rapport IGE-158. Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal.

SAAD, Y., SCHULTZ, M. H. (1986); GMRES : A Generalized Minimal RESidual Algorithm For Solving Nonsymmetric Linear Systems. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 7, 856-869.

WARSA J. S., WAREING, T. A. & MOREL, J.E. (2003); On the Degraded Effectiveness of Diffusion Synthetic Acceleration for Multidimensional SN Calculations in the Presence of Material Discontinuities, Proceedings of the ANS Topical Meeting on Nuclear Mathematical and Computational Sciences : A Century In Review (M&C 2003), Gatlinburg, TN, April 6-11.

ANNEXE I

**ETUDE NUMÉRIQUE DE L'ORDRE DES SCHÉMAS D'INTÉGRATION
SPATIAUX**

I.1 Théorie

Une méthode de résolution numérique donnée est dite convergente asymptotiquement à l'ordre M si l'on a la propriété suivante sur la solution numérique :

$$|\phi_{analytique} - \phi_{numerique}| = \mathcal{O}(\epsilon^M) \text{ avec } \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon = 0 \quad (\text{I.1})$$

Avec ϵ le pas du maillage. On peut encore exprimer l'ordre de convergence à partir de l'erreur globale $e_i = |\phi_{analytique} - \phi_{numerique}|$, soit :

$$e_i = \mathcal{O}(\epsilon_i^M) \Leftrightarrow \exists K > 0 \quad | e_i = K \epsilon_i^M \quad (\text{I.2})$$

Nous allons nous assurer que nos schémas d'intégrations linéaire, parabolique et cubique vérifient cette propriété, c'est-à-dire que l'on obtient bien respectivement :

-

$$e_i = \mathcal{O}(\epsilon_i) \text{ pour le cas linéaire;} \quad (\text{I.3})$$

-

$$e_i = \mathcal{O}(\epsilon_i^2) \text{ pour le cas parabolique;} \quad (\text{I.4})$$

-

$$e_i = \mathcal{O}(\epsilon_i^3) \text{ pour le cas cubique.} \quad (\text{I.5})$$

Pour cela, on reprend le cas test utilisé dans le paragraphe [2.2.3.1]. On raffine le maillage de manière uniforme en X, Y et en Z d'un facteur α et l'on compare l'écart relatif en norme infini sur l'erreur pour les flux calculés. La valeur de référence est prise pour un raffinement maximal, correspondant aux résultats issus des calculs faits avec le schéma cubique et un raffinement spatial de 6. Ceci introduit de fait une approximation dans nos calculs, mais l'on peut néanmoins considérer notre solution S_N issue de ce calcul comme une bonne approximation de la valeur convergée.

On a de fait la relation $e_i = K\epsilon_i^M$, d'où :

$$\log(e_i) = \log(K) + M\log(\epsilon_i) \quad (\text{I.6})$$

Si l'on trace le graphe du logarithme de l'erreur en fonction du logarithme du pas ϵ_i , on doit obtenir une droite dont le coefficient directeur correspond à l'ordre de convergence de notre méthode.

Lorsque l'on subdivise uniformément le maillage initial d'un facteur α , ce qui est équivalent à multiplier le nombre de régions par α^D avec $D=3$ dans le cas d'une géométrie 3D, l'erreur globale est réduite d'un facteur α^{-M} .

En effet, pour un ordre M l'erreur sur les valeurs sera de $\mathcal{O}(\epsilon^M)$, ϵ correspondant au pas du maillage. Si l'on divise ϵ par un facteur α , l'erreur de troncature locale sera désormais de $\mathcal{O}(\frac{\epsilon^M}{\alpha^M})$. Le rapport des deux erreurs de troncature sera alors de $\mathcal{O}(\alpha^{-M})$. Etant donné un schéma d'intégration d'ordre M, on aura pour chaque écart relatif sur les flux ϵ_i les propriétés suivantes :

$$\epsilon_i = \mathcal{O}((N_{regions_i})^{-M}) \Leftrightarrow \exists K > 0 \quad | \quad \epsilon_i = K(N_{regions_i})^{-M} \quad (\text{I.7})$$

Et :

$$\log(\epsilon_i) = \log(K) - M\log(N_{regions_i}) \quad (\text{I.8})$$

Par ailleurs, si l'on raffine uniformément d'un facteur α entre les calculs i et $i + 1$, on aura les relations :

$$N_{regions_{i+1}} = \alpha^3 N_{regions_i} \quad (\text{I.9})$$

D'où :

$$\frac{\epsilon_{i+1}}{\epsilon_i} = \mathcal{O}\left(\left(\frac{1}{\alpha^3}\right)^{-M}\right) \Leftrightarrow \exists K > 0 \quad | \quad \frac{\epsilon_{i+1}}{\epsilon_i} = K\left(\frac{1}{\alpha^3}\right)^{-M} \quad (\text{I.10})$$

On a alors :

$$M \approx \frac{\ln\left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_{i+1}}\right)}{3 \times \ln(\alpha)} \quad (\text{I.11})$$

On peut facilement vérifier à partir des relations (I.8) et (I.11) que nos méthodes numériques possèdent bien les ordres de convergence escomptés. Pour cela nous allons tracer les courbes pour chaque cas de l'erreur en fonction du nombre de régions, en échelle logarithmique.

I.2 Étude du régime monotonique de convergence

Pour déterminer expérimentalement l'ordre de convergence des trois schémas d'intégration spatiaux, il faut d'abord s'assurer que nous sommes bien dans le domaine de convergence monotone pour chaque cas, c'est-à-dire qu'un raffinement donné du maillage permet une décroissance linéaire de l'erreur sur les flux calculés. On remarque à l'aide de la figure suivante qu'une discrétisation de 4 suffit pour s'assurer d'être dans le domaine de convergence monotonique, on va donc prendre les erreurs correspondant à 5,6 puis à 7 subdivisions uniformes de notre géométrie.

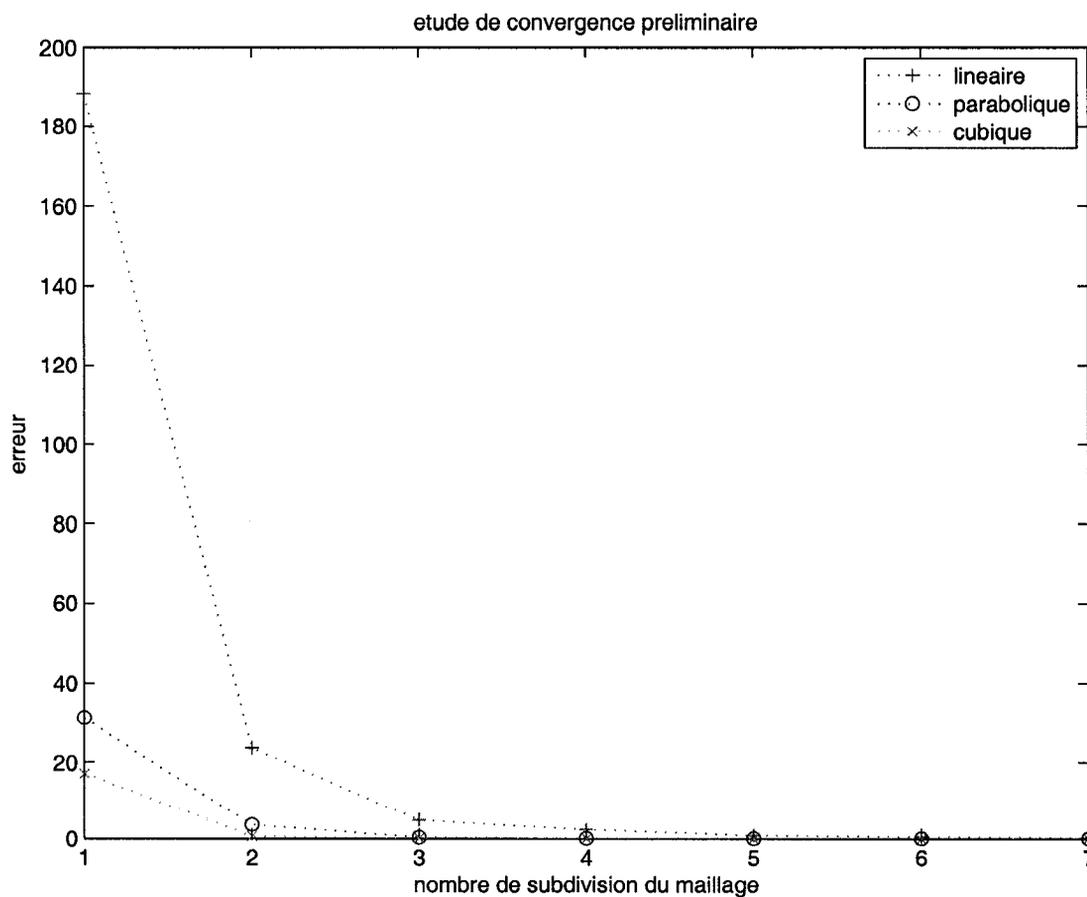


FIG. I.1 Etude de convergence monotonique

I.2.1 Cas linéaire

N_{subm}	5	6	7
erreur relative ϵ_{max}	0.83	0.49	0.28

TAB. I.1 Erreur relative pour le cas linéaire

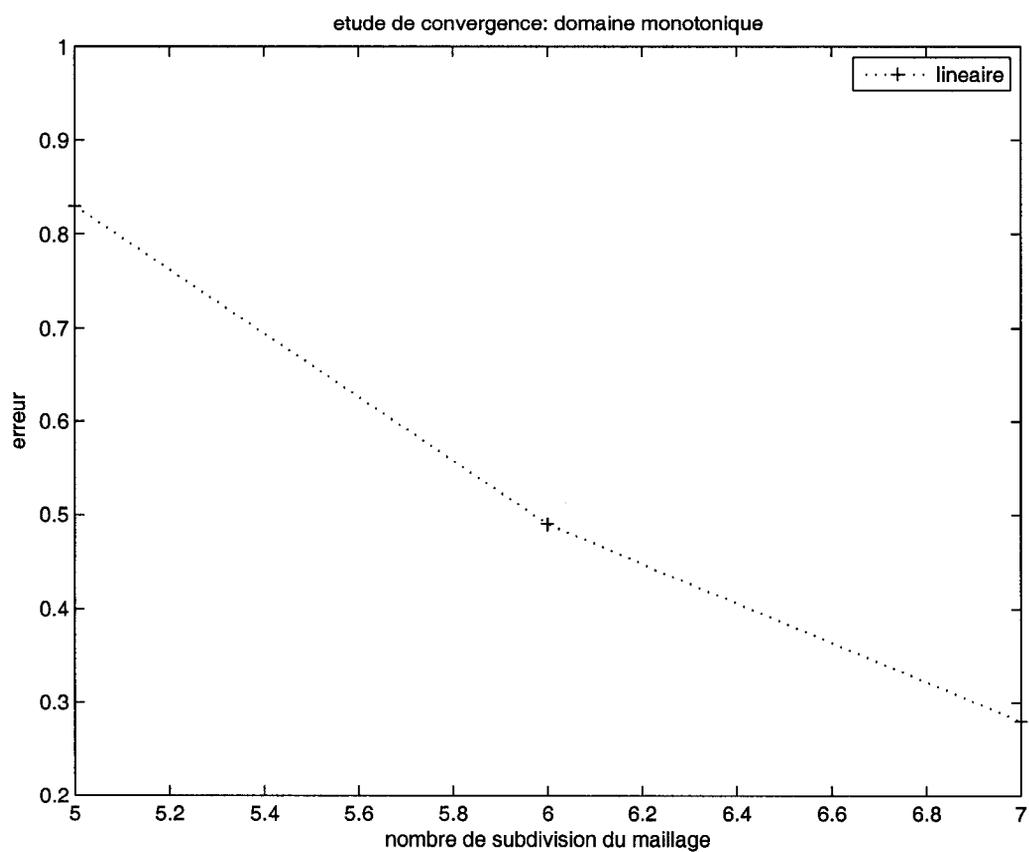


FIG. I.2 Erreur relative pour le cas linéaire

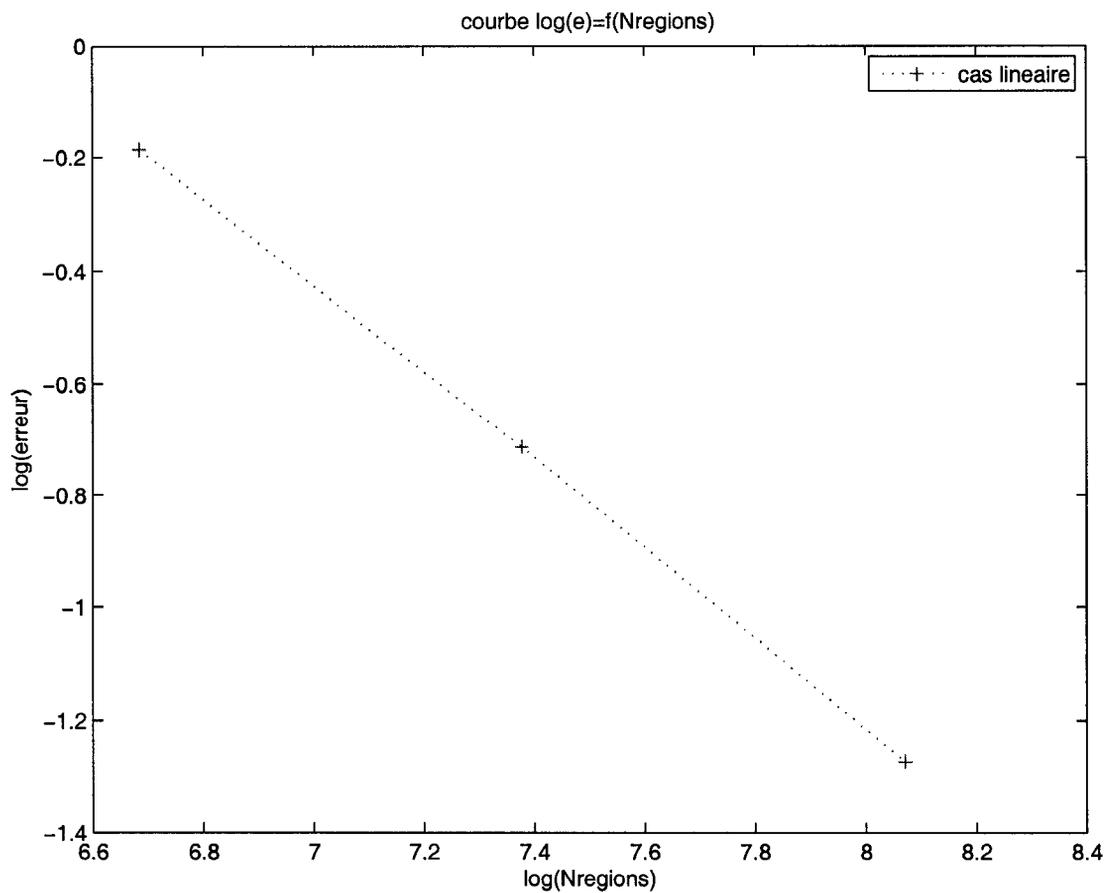


FIG. I.3 Erreur relative pour le cas linéaire : courbe log-log

L'ordre de notre méthode correspond numériquement à la valeur absolue de la pente du graphe. On obtient dans ce cas-ci $M \approx 0.78389$.

I.2.2 Cas parabolique

N_{subm}	5	6	7
erreur relative ϵ_{max}	0.01	0.005	0.0002

TAB. I.2 Erreur relative pour le cas parabolique

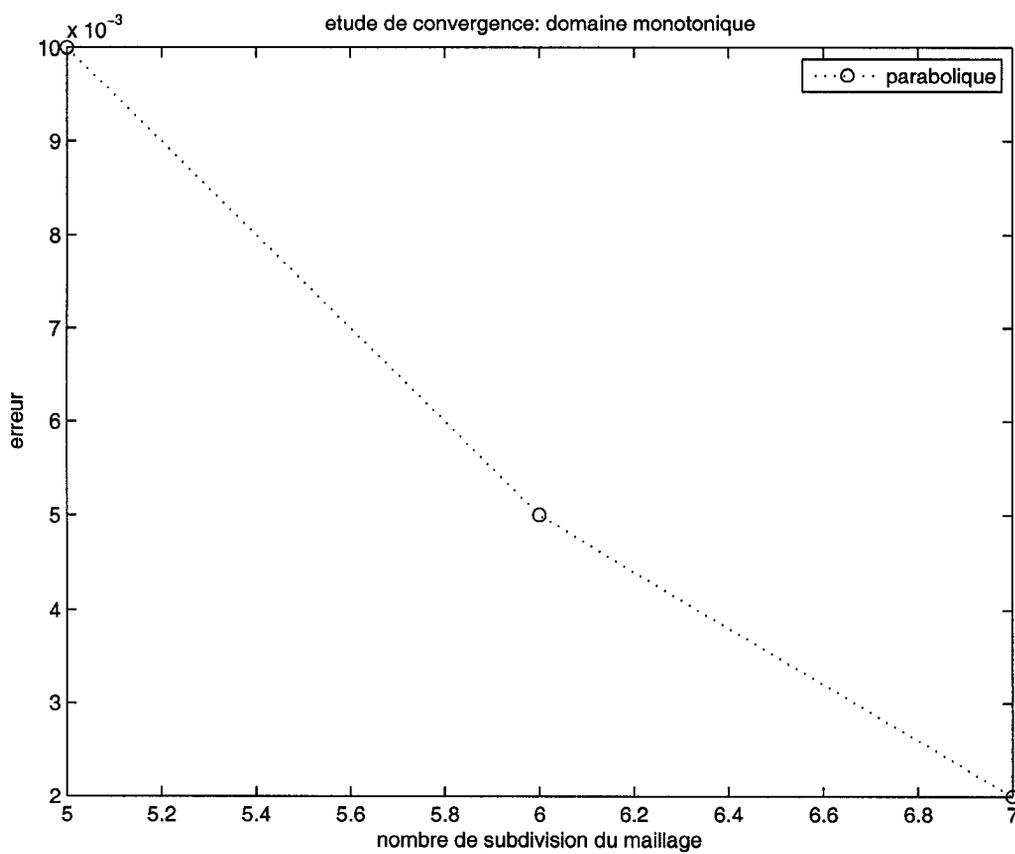


FIG. I.4 Erreur relative pour le cas parabolique

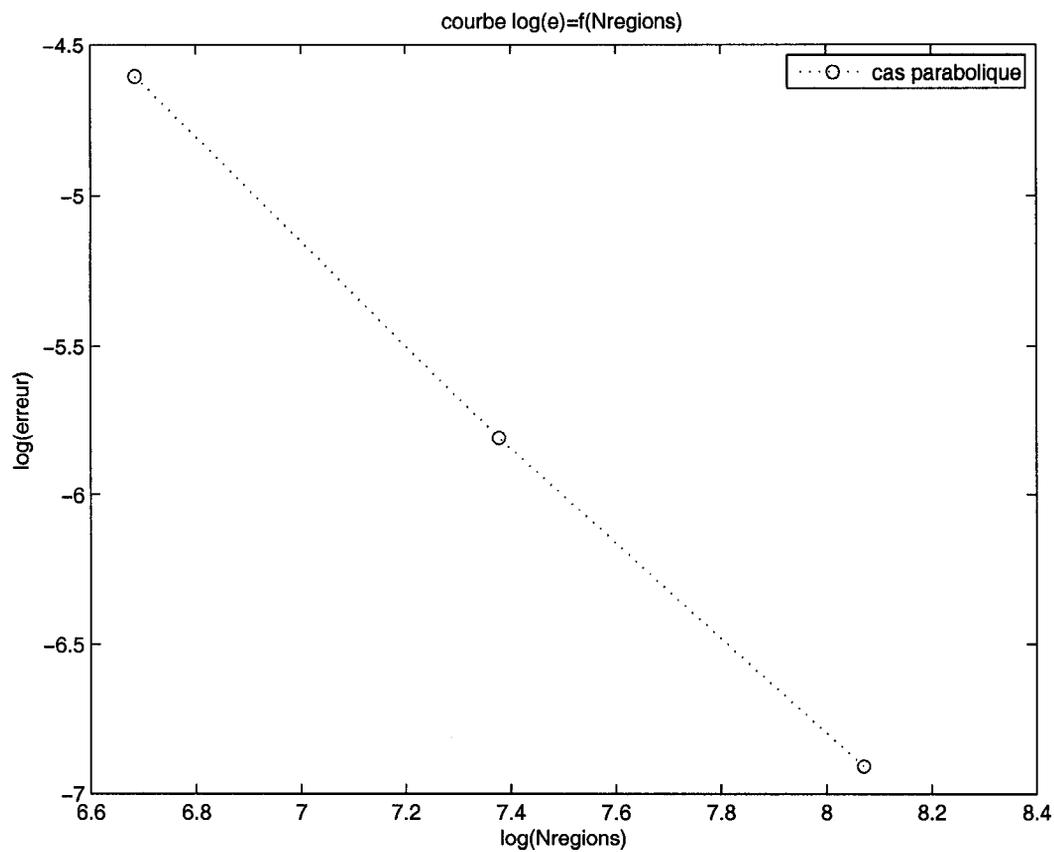


FIG. I.5 Erreur relative pour le cas parabolique : courbe log-log

Le coefficient directeur de la courbe de l'erreur en fonction du nombre de régions est d'environ $M \approx 1.6609$.

I.2.3 Cas cubique

N_{subm}	5	6	7
erreur relative ϵ_{max}	0.03	0.001	0.0

TAB. I.3 Erreur relative pour le cas cubique

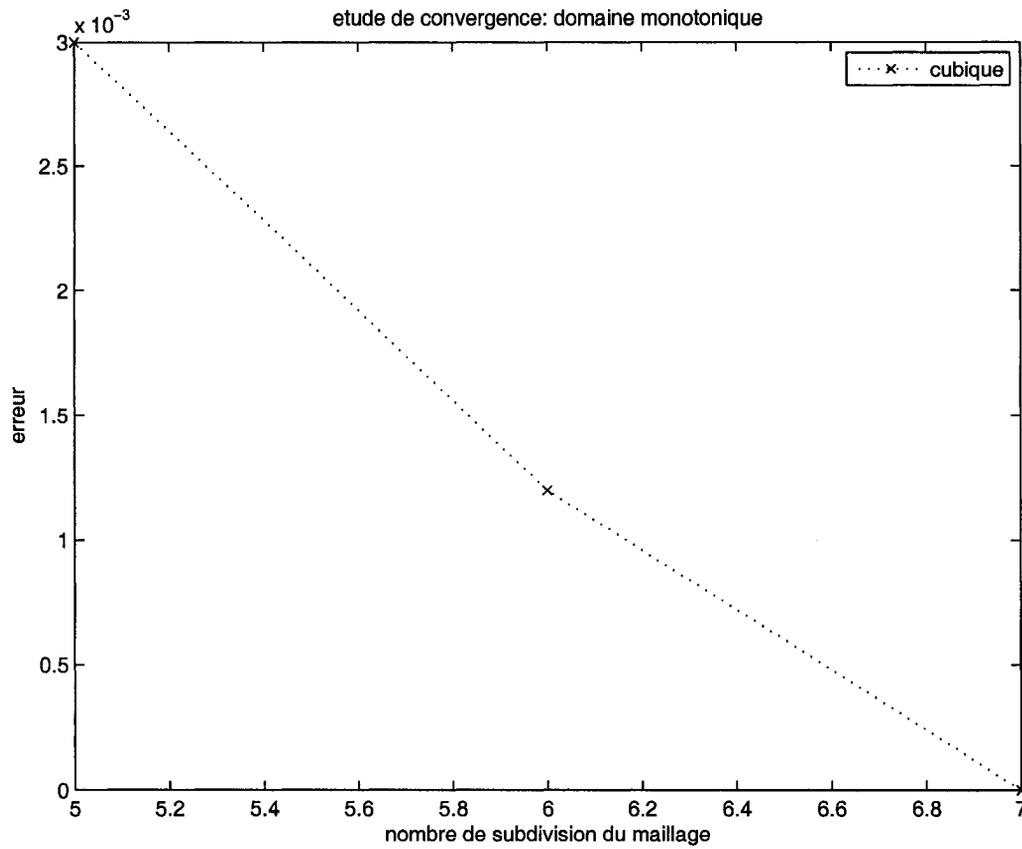


FIG. I.6 Erreur relative pour le cas cubique

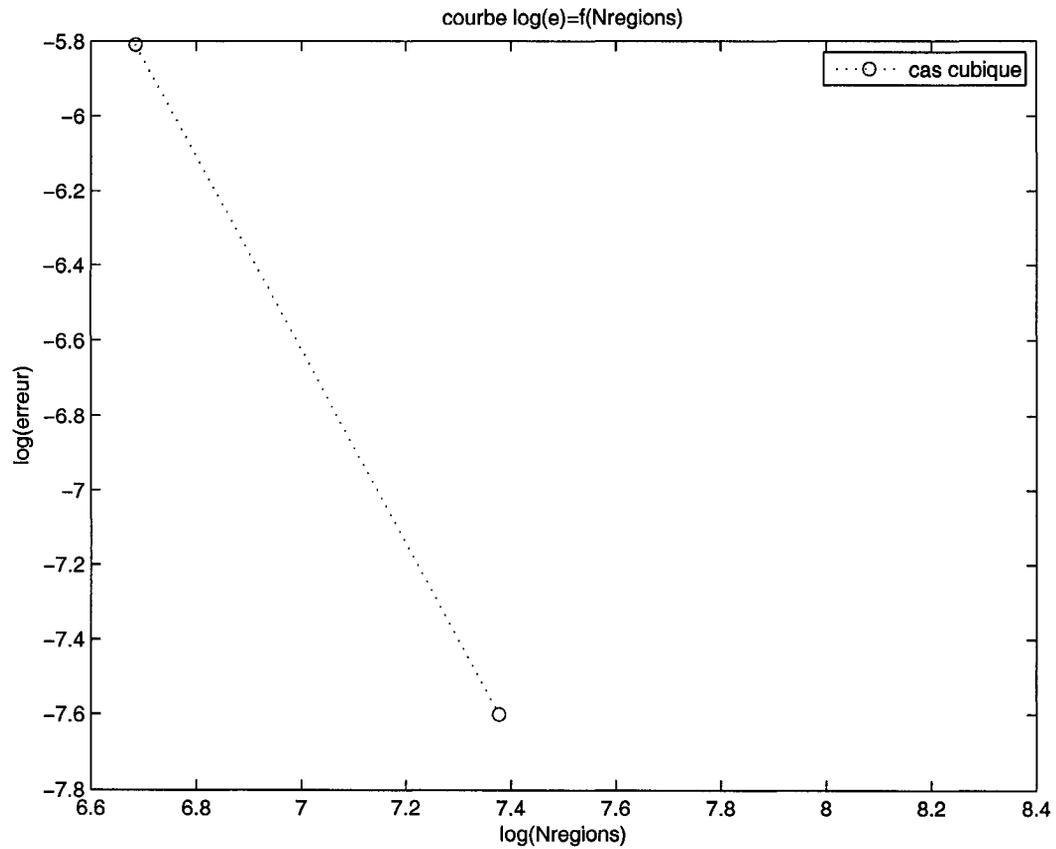


FIG. I.7 Erreur relative pour le cas cubique : courbe log-log

Numériquement, on détermine ici $M \approx 2.584$.

On retrouve au travers de ces résultats les bons ordres de grandeur de nos ordres de convergence, ceci restant avant tout une évaluation expérimentale. Par ailleurs, la dépendance angulaire a été traitée en prenant une quadrature S_{20} , ce qui vient fausser légèrement nos calculs puisque l'on n'intègre pas exactement la variable angulaire. Toutefois, les ordres de grandeurs des schémas linéaire, parabolique et cubique sont retrouvés, et ces calculs peuvent être généralisés sur n'importe quelle géométrie, tel que cela a été fait pour l'analyse du benchmark NEA 3D.