

**Titre:** Résolution de l'équation de transport neutronique par une méthode d'éléments finis basée sur une fonctionnelle mixte-duale  
Title: d'éléments finis basée sur une fonctionnelle mixte-duale

**Auteur:** Claude Fournier  
Author:

**Date:** 1996

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Fournier, C. (1996). Résolution de l'équation de transport neutronique par une méthode d'éléments finis basée sur une fonctionnelle mixte-duale [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.  
Citation: <https://publications.polymtl.ca/8974/>

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

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/8974/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de recherche:** Guy Marleau, & Daniel Rozon  
Advisors:

**Programme:** Non spécifié  
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT NEUTRONIQUE  
PAR UNE MÉTHODE D'ÉLÉMÉNTS FINIS  
BASÉE SUR UNE FONCTIONNELLE MIXTE-DUALE

CLAUDE FOURNIER  
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE MAÎTRE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES  
(GÉNIE ÉNERGÉTIQUE)  
NOVEMBRE 1996



National Library  
of Canada

Acquisitions and  
Bibliographic Services

395 Wellington Street  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada

Bibliothèque nationale  
du Canada

Acquisitions et  
services bibliographiques

395, rue Wellington  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

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

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

0-612-26470-X

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT NEUTRONIQUE  
PAR UNE MÉTHODE D'ÉLÉMENTS FINIS  
BASÉE SUR UNE FONCTIONNELLE MIXTE-DUALE

présenté par: FOURNIER Claude

en vue de l'obtention du grade de: Maître ès sciences appliquées  
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. KOCLAS Jean, Ph.D., président

M. MARLEAU Guy, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. ROZON Daniel, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. ROY Robert, Ph.D., membre

## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier très sincèrement mon directeur de recherche, M. Guy Marleau pour m'avoir orienté tout au long de ce projet. Les nombreuses discussions que nous avons eues se sont avérées des plus enrichissantes. Ses nombreux conseils ont non seulement élevé mes connaissances dans le domaine mais ont aussi contribué à forger mon esprit critique. Je lui exprime toute ma reconnaissance pour son dévouement et surtout pour sa grande disponibilité.

Je remercie mon codirecteur de recherche, M. Daniel Rozon, pour m'avoir donné le goût de poursuivre des études en génie nucléaire. Son enseignement a constitué une aide précieuse, à la fois dans la réalisation de ce projet, mais aussi dans l'exercice quotidien de mon travail d'ingénieur.

Je remercie également M. Alain Hébert pour m'avoir proposé un sujet de recherche stimulant.

Ce travail a été rendu possible grâce à l'aide financière de la fondation Pierre-Jules Crevier de Granby, de l'Institut de Génie Nucléaire de l'école Polytechnique de Montréal et particulièrement d'Hydro-Québec par l'entremise de son programme de bourses d'études en génie nucléaire.

Finalement, ma reconnaissance va également à toutes les personnes qui ont contribué à ce projet par leurs commentaires et leurs suggestions.

## RÉSUMÉ

La connaissance de la densité de neutrons dans le cœur d'un réacteur nucléaire est essentielle à son exploitation, et plus précisément lors d'analyses de sûreté et dans la gestion du combustible nucléaire. La distribution de neutrons dans un réacteur est modélisée par l'équation de transport de Boltzmann.

On résout ici l'équation de transport à l'aide de la méthode des éléments finis. Le principe variationnel utilisé se base sur la fonctionnelle mixte-duale. Les composantes paire et impaire du flux neutronique sont représentées par des polynômes dont on détermine les coefficients par recherche des extrêma de la fonctionnelle. Les composantes angulaire et spatiale de chacune des deux parités du flux sont découplées par factorisation. La dépendance en énergie se traite à l'aide d'une discrétisation multigroupe. Pour chaque groupe, on incorpore dans le terme de source les diffusions provenant des autres groupes.

La composante angulaire de chacune des deux parités du flux s'exprime à l'aide d'harmoniques sphériques (méthode  $P_N$ ). Cette opération permet d'éliminer l'effet de rayon observé lorsque les directions des neutrons sont représentées sous forme de valeurs discrètes (méthode  $S_N$ ). On rend la fonctionnelle stationnaire en utilisant une approximation  $P_N$  d'ordre pair, et des conditions à la frontière de Marshak paires.

On choisit des polynômes de Legendre pour représenter la composante spatiale du flux pair, de façon à minimiser le couplage entre les différents termes. Pour représenter la composante spatiale du flux impair, on utilise un produit de polynômes de Legendre et de Lagrange dans les problèmes à deux dimensions, alors qu'en une dimension on emploie seulement des polynômes de Lagrange. Ceci permet de forcer la continuité, de manière que la dérivée du flux impair existe partout. Les polynômes de Lagrange sont modifiés pour minimiser le couplage

entre les termes.

En deux dimensions, on élimine certains termes de couplage entre les composantes paire et impaire qui font état des disparitions de neutrons par déplacement. Cette approximation, que l'on appelle  $NASP_N$  (Not As Simplified  $P_N$ ), implique que la continuité du flux impair ne doit être forcée que dans une seule direction pour des expansions en harmoniques sphériques d'ordre  $(l, m)$  avec  $m$  pair, et dans l'autre direction lorsque  $m$  est impair.

Les caractéristiques précédentes sont intégrées dans le programme Fortran TR-MXDL. Celui-ci résout l'équation de transport pour des problèmes à une ou à deux dimensions et possédant les caractéristiques suivantes: sources fixes et/ou de fission, un ou plusieurs groupes d'énergie, réflexion ou vide aux frontières et diffusion isotrope ou anisotrope. Les conditions de réflexion sont traitées artificiellement en dépliant la géométrie d'un côté à l'autre de la frontière réfléctrice. Ainsi, TRMXDL ne peut traiter de cas où il y a réflexion des deux côtés d'une même direction.

La comparaison des résultats avec ceux obtenus par d'autres programmes, notamment TRNODL et INTPN, montre l'efficacité de l'approche choisie. En deux dimensions, l'approximation  $NASP_2$  donne de très bons résultats, et se compare avantageusement à l'approximation  $SP_2$ , par exemple. À des ordres plus élevés, et toujours en deux dimensions, l'approximation  $NASP_N$  est plus grossière et on doit interpréter les résultats avec discernement. Néanmoins, la méthode  $NASP_2$  représente une correction avantageuse par rapport à la théorie de la diffusion pour les calculs de réacteur à une et à deux dimensions. Son utilisation constitue donc une alternative aux calculs de diffusion pour les problèmes où l'absorption est importante par rapport à la diffusion.

## ABSTRACT

The knowledge of the neutron distribution in a nuclear reactor core is essential to its operation. It is important, for example, in safety analysis and in fuel management. The neutron distribution is modeled by the Boltzmann transport equation.

In this memoir, we solve the neutron transport equation by using the finite element technique based on the mixed-dual functional. The even and odd parity components of the neutron flux are represented by polynomials whose coefficients are determined by the functional extrema. The angular and spatial components of each parity flux are separated by factorization. The energy dependence is treated by solving the one group transport equation as many times as there are energy groups. The source in each group contains the scattering from the other groups.

The angular component of each parity flux is expanded using spherical harmonics ( $P_N$  method). This eliminates the ray effect that goes with discrete ordinate methods ( $S_N$  methods). We find stationnary points by using an even  $P_N$  expansion and even Marshak boundary conditions.

We use Legendre polynomials for the even parity flux to minimize terms coupling. A product of Lagrange and Legendre polynomials is used to represent the spatial component of the odd parity flux in two dimensions, while only Lagrange polynomials are used in one dimension problems. The interconnectivity of these polynomials insures the odd flux continuity and therefore the existence of the derivative. The Lagrange polynomials are modified in order to maximize the number of zero elements in the coupling matrix.

In two dimensions, some coupling terms between even and odd parity components are eliminated. That brings the  $NASP_N$  (Not As Simplified  $P_N$ ) approximation, which implies that the odd flux continuity is forced in only one direction for

even values of  $m$  in a spherical harmonics expansion of order  $(l, m)$ . The continuity is forced only in the other direction for odd  $m$  values.

The above characteristics are programmed into the TRMXDL Fortran code. TRMXDL solves the transport equation for various problems such as: fixed and/or fission sources, one or more energy groups, reflecting or void boundary conditions, isotropic or anisotropic scattering. Reflective boundary conditions are treated artificially by unfolding the geometry along the reflective surface. Hence, TRMXDL cannot treat problems where there are reflections on both sides along the same axis.

Comparison with results obtained with other programs such as TRNODL and INTPN shows that the chosen approach is valid. In two dimensions, the results obtained with the  $NASP_2$  approximation show less difference compared with a high order  $S_N$  method than the  $SP_2$  approximation. For higher order expansion and in two dimensions, the approximation is less precise and consequently less reliable. Nonetheless, the  $NASP_2$  method is still a good correction to diffusion theory and can be used as an alternative to diffusion approximation in cases where the absorption is important.

## TABLE DES MATIÈRES

<b>REMERCIEMENTS</b> .....	iv
<b>RÉSUMÉ</b> .....	v
<b>ABSTRACT</b> .....	vii
<b>TABLE DES MATIÈRES</b> .....	ix
<b>LISTE DES TABLEAUX</b> .....	xii
<b>LISTE DES FIGURES</b> .....	xiii
<b>LISTE DES ANNEXES</b> .....	xiv
<b>INTRODUCTION</b> .....	1
<b>1 ÉQUATION DE TRANSPORT</b> .....	5
1.1 Composantes paire et impaire .....	5
1.2 Conditions aux frontières .....	8
<b>2 FORMULATION VARIATIONNELLE</b> .....	10
2.1 Principe variationnel et extrémum .....	10
2.2 Fonctionnelle mixte-duale .....	10
2.3 Discrétisation en éléments finis .....	12
<b>3 EXPANSION POLYNOMIALE DES FLUX ET DES SOURCES</b> .....	14
3.1 Expansion angulaire en harmoniques sphériques .....	14
3.1.1 Harmoniques sphériques .....	15
3.1.2 Intégration angulaire .....	17

3.1.3	Equation $P_1$ . . . . .	20
3.2	Expansion spatiale dans un réacteur homogène . . . . .	23
3.2.1	Changement de variables . . . . .	23
3.2.2	Continuité des flux d'un élément à l'autre . . . . .	24
3.2.3	Flux impair . . . . .	24
3.2.4	Flux pair . . . . .	27
3.2.5	Intégration spatiale . . . . .	28
<b>4</b>	<b>ÉLÉMENTS FINIS . . . . .</b>	<b>32</b>
4.1	Fonctionnelle locale . . . . .	32
4.2	Continuité du flux impair . . . . .	33
4.3	Réflexion totale . . . . .	33
4.4	Variables globales . . . . .	34
4.5	Points stationnaires . . . . .	36
<b>5</b>	<b>PROGRAMME TRMXDL . . . . .</b>	<b>37</b>
5.1	Aspects informatiques . . . . .	37
5.2	Numérotation des inconnus . . . . .	37
5.2.1	Géométrie à une dimension . . . . .	37
5.2.2	Géométrie à deux dimensions . . . . .	39
5.2.3	Couplage entre les flux impairs . . . . .	40
5.3	Assemblage des matrices . . . . .	40
5.3.1	Matrices locales . . . . .	40
5.3.2	Matrices globales . . . . .	41
5.3.3	Traitement des réflexions . . . . .	41
5.4	Résolution du système matriciel . . . . .	42
<b>6</b>	<b>RÉSULTATS NUMÉRIQUES ET COMPARAISONS . . . . .</b>	<b>44</b>
6.1	Géométrie à une dimension . . . . .	44

6.1.1	Cas à 1 groupe d'énergie, avec source de fission . . . . .	44
6.1.2	Cas à 1 groupe d'énergie, source de fission et diffusion anisotrope . . . . .	45
6.2	Géométrie à deux dimensions . . . . .	46
6.2.1	Problème de Fletcher . . . . .	46
6.2.2	Problème de Tomašević . . . . .	47
6.2.3	Problème anisotropique de Tomašević . . . . .	49
	<b>CONCLUSION . . . . .</b>	<b>50</b>
	<b>BIBLIOGRAPHIE . . . . .</b>	<b>53</b>
	<b>ANNEXES . . . . .</b>	<b>68</b>

## LISTE DES TABLEAUX

3.1	Continuité de la dérivée: matrice $Z_\nu$ (cas $P_4$ ) . . . . .	56
6.1	Propriétés physiques pour les géométries 1D-A,B,C et D . . . . .	57
6.2	Résultats ( $k_{eff}$ ) pour les géométries 1D-A,B,C,D . . . . .	57
6.3	Propriétés physiques pour la géométrie 1D-RIY . . . . .	58
6.4	Résultats ( $k_{eff}$ ) pour la géométrie 1D-RIY . . . . .	58
6.5	Flux ( $cm^{-2}$ ) à $x = y$ pour le problème de Fletcher . . . . .	59
6.6	Résultats pour le problème de Tomašević . . . . .	60
6.7	Résultats pour le problème de Tomašević avec anisotropie . . . . .	60
B.1	Coefficients $b_1(l, m; l', m')$ . . . . .	74
B.2	Coefficients $b_2(l, m; l', m')$ . . . . .	75

## LISTE DES FIGURES

5.1	Numérotation des inconnus - cas 1-D . . . . .	61
5.2	Numérotation locale des inconnus pairs - cas 2-D . . . . .	62
5.3	Numérotation locale des inconnus impairs - cas 2-D . . . . .	63
5.4	Numérotation globale des inconnus pairs - cas 2-D . . . . .	64
5.5	Numérotation globale des inconnus impairs - cas 2-D . . . . .	65
6.1	Géométries 1-D, 1 groupe d'énergie et source de fission . . . . .	66
6.2	Géométrie 1-D, 1 groupe d'énergie, fission et diffusion anisotrope . .	67

## LISTE DES ANNEXES

<b>A Équations d'Euler-Lagrange</b> . . . . .	<b>69</b>
<b>B Matrices angulaires</b> . . . . .	<b>72</b>
B.1 Produits $\Omega_\nu Y_l^m(\tilde{\Omega})$ . . . . .	72
B.2 Matrices $B_\nu$ . . . . .	73
<b>C Polynômes de Legendre et de Lagrange</b> . . . . .	<b>76</b>
C.1 Polynômes de Legendre . . . . .	76
C.2 Polynômes de Lagrange . . . . .	76
<b>D Dérivation des équations NASP2</b> . . . . .	<b>79</b>

# INTRODUCTION

La connaissance de la densité de neutrons dans le cœur d'un réacteur nucléaire est essentielle à son exploitation. Le calcul de la population de neutrons intervient notamment dans les analyses de sûreté et dans la gestion du combustible nucléaire. Le calcul neutronique est également primordial lors du design du réacteur et de ses composantes.

Le comportement des neutrons est modélisé mathématiquement par l'équation de transport de Boltzmann. Les calculs neutroniques du réacteur impliquent donc sa résolution, sous l'une ou l'autre de ses formes.

## Définition du problème

Dans un réacteur, on caractérise un neutron à partir de sa position, de la direction de son déplacement et de son énergie (ou de sa vitesse). Ces paramètres décrivent le domaine dans lequel se trouve le neutron. La résolution de l'équation de transport de Boltzmann permet de déterminer la densité de neutrons se trouvant dans un certain domaine. L'équation de transport ne fait qu'exprimer le fait que la variation de la population de neutrons en un point est égale aux neutrons apparaissant dans le domaine, moins ceux disparaissant du domaine. On s'intéresse ici au cas stationnaire, c'est-à-dire que la distribution de flux est constante dans le temps, partout dans le réacteur. Par convention, on résout pour le flux neutronique, qui se définit comme le produit de la densité de neutrons par leur vitesse.

Le bilan neutronique est effectué en considérant les diverses interactions que subissent les neutrons. Ces interactions sont fonction des matériaux. La résolution de l'équation de transport doit donc être précédée d'une modélisation du milieu dans lequel on désire connaître la distribution du flux.

## Méthodes de résolution de l'équation de transport

Même pour des milieux très simples, il est très difficile de résoudre l'équation de transport de façon analytique. Puisque, dans la plupart des cas, les milieux sont très hétérogènes, on doit avoir recours à des méthodes de résolution numériques. Deux démarches sont alors possibles: l'approche déterministe et l'approche probabiliste. Parmi les méthodes probabilistes, on retrouve essentiellement la méthode de Monte-Carlo. Elle consiste à suivre l'historique d'un très grand nombre de neutrons, en respectant les lois de probabilité, et à comptabiliser les événements auxquels on s'intéresse. Cette façon de procéder permet de traiter des géométries très complexes. Cependant, elle est coûteuse en temps de calcul et donc on lui préfère, dans la plupart des cas, une approche déterministe.

On peut distinguer les différentes méthodes déterministes, premièrement par la forme sous laquelle se trouve l'équation de transport: intégréo-différentielle ou intégrale. La résolution de l'équation de transport neutronique par discréétisation de sa forme intégrale se fait habituellement à l'aide de la méthode des probabilités de collisions [1, 2, 3]. Cette méthode, très utilisée, a comme inconvénient d'être relativement lourde à appliquer numériquement, puisqu'elle implique habituellement la résolution d'un système matriciel comportant des matrices pleines. La méthode des probabilités de collisions permet toutefois de traiter des régions vides.

Les méthodes de résolution de la forme intégréo-différentielle de l'équation de transport se distinguent, quant à elles, par la représentation qui est faite de ses composantes angulaires: ordonnées discrètes ou harmoniques sphériques. La méthode des ordonnées discrètes (ou méthode  $S_N$ ) [4] consiste à discréétiser les composantes angulaires selon certaines directions. Elle offre un bon compromis entre la précision et le temps de calcul. Cette méthode a cependant comme inconvénient d'introduire des effets de rayons [5] pour des géométries à deux et à trois dimensions.

L'utilisation de méthodes dites  $P_N$  [6, 7], où les composantes angulaires du flux

neutronique sont représentées par une expansion en harmoniques sphériques, permet de pallier cet inconvénient. On peut employer différents types de discréétisation spatiale pour résoudre les équations  $S_N$  et  $P_N$ , le schéma de calcul le plus populaire étant celui des différences finies.

La méthode des éléments finis [8] s'utilise également pour résoudre les équations  $P_N$ . Un principe variationnel est alors appliqué pour résoudre habituellement l'équation de transport du second ordre pair (principe variationnel *primal*) [9, 10, 11, 12]. Précisons qu'on a préalablement effectué une séparation des flux et des sources en composantes paire et impaire. Un principe variationnel *dual* peut aussi servir à trouver une solution à la fois pour les composantes paire et impaire du flux [13]. Le désavantage de cette méthode est que le nombre d'inconnus peut devenir relativement important. Plus récemment, des codes de calculs de réacteur basés sur un principe variationnel mixte-dual ont fait leur apparition [14].

Dans l'industrie, les calculs de flux dans le réacteur s'effectuent habituellement en résolvant l'équation de diffusion, équivalente à une expansion linéaire en harmoniques sphériques (équation  $P_1$ ).

Une approche qui offre un bon compromis entre les théories de transport et celle de diffusion est la méthode  $SP_N$  ( $P_n$  simplifié) [15]; les termes des équations  $P_N$  en une dimension sont généralisés en deux ou en trois dimensions. Cette approximation va chercher une grande partie de la correction de transport sur la théorie de la diffusion, même à des ordres peu élevés, et ce avec un effort de calcul comparable à celui nécessaire à la résolution de l'équation de diffusion.

## Contribution du présent ouvrage

Dans le présent ouvrage, on résout l'équation de transport neutronique en effectuant une expansion en harmoniques sphériques des composantes angulaires du flux et en employant la méthode des éléments finis pour la discréétisation spatiale. On résout à la fois pour les composantes paire et impaire du flux, en utilisant un

principe variationnel mixte-dual. On se sert de la fonctionnelle de Kaplan et Davis [16], qui est une généralisation de la fonctionnelle de Vladimirov [17].

On utilise des produits de polynômes de Lagrange et de Legendre pour représenter les composantes spatiales. De plus, les termes des matrices résultantes seront tous évalués analytiquement. Le choix de la forme des polynômes se fait de façon à simplifier les différents calculs et à minimiser le couplage entre les différents termes.

L'abandon de certains termes de couplage entre les flux pairs et impairs permet d'éliminer certaines inconnues. Il en résulte une méthode semblable à la méthode  $SP_N$ , mais plus proche de la théorie de transport.

## Organisation de la thèse

Le chapitre 1 présente l'équation de transport sous la forme intégro-différentielle. Les sources et les flux sont séparés en leurs composantes paires et impaires. Les différents types de conditions aux frontières sont aussi présentés, fermant ainsi le système. Une description de la formulation variationnelle et de la fonctionnelle utilisée pour résoudre les équations fait l'objet du chapitre 2.

L'expansion en polynômes, des composantes angulaire et spatiale de chacun des termes de la fonctionnelle, est fait au chapitre 3. Le chapitre 4 discute de la méthode des éléments finis, tandis que le chapitre 5 décrit le programme informatique TRMXDL. Ce programme est un code d'éléments finis, utilisant le principe variationnel mixte-dual et permettant de résoudre l'équation de transport sur des géométries cartésiennes à une ou à deux dimensions. Les résultats d'application de la méthode, obtenus grâce à TRMXDL, ainsi que les comparaisons avec d'autres méthodes se trouvent au chapitre 6.

Finalement, les différentes conclusions ainsi que la méthode employée font l'objet d'une évaluation rigoureuse.

## CHAPITRE 1

# ÉQUATION DE TRANSPORT

Dans ce chapitre, on présente le système d'équations à résoudre, soit l'équation de transport neutronique stationnaire, accompagnée de conditions aux frontières. Le flux est exprimé selon ses composantes paires et impaires. On expose le tout sans autres approximations qu'une discrétisation multigroupe en énergie. On se limite cependant à des géométries cartésiennes.

### 1.1 Composantes paire et impaire

On veut connaître la densité  $n$  de neutrons ayant une énergie située entre  $E$  et  $E+dE$ , dont la direction se trouve dans un cône  $d\vec{\Omega}$ , dans un volume  $d^3r$  autour d'un point  $\vec{r}$  se trouvant dans un réacteur à l'état stationnaire. Conventionnellement, on calcule le flux neutronique  $\varphi$  qui est donné par le produit de la densité de neutrons en  $\vec{r}$  et de leur vitesse:

$$\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = v(E)n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (1.1)$$

Le flux est donc défini à l'aide de 6 variables: 3 coordonnées spatiales, 2 coordonnées angulaires et l'énergie. On élimine la dépendance directe en énergie en effectuant une discrétisation multigroupe. Ainsi,

$$\varphi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (1.2)$$

est le flux neutronique associé au groupe  $g$ . Les diverses propriétés des matériaux dont on voudra connaître la population neutronique devront avoir été préalablement moyennées sur la plage d'énergie qui nous intéresse.

Le flux ainsi défini est solution de l'équation de transport à un groupe d'énergie:

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi_g(\vec{r}, \vec{\Omega})) + \Sigma_g(\vec{r})\varphi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \int d^2\Omega' \Sigma_{s,g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \varphi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (1.3)$$

où  $\Sigma_g$  et  $\Sigma_{s,g}$  sont la section efficace totale et la section efficace de diffusion du groupe  $g$  et où  $Q_g$  est une source produisant des neutrons dans le groupe  $g$ .

L'équation (1.3) est une forme simplifiée de l'équation de transport de Boltzmann où l'état stationnaire implique la disparition de la dépendance temporelle.

L'état stationnaire implique que le nombre de neutrons apparaissant dans le domaine (à droite de l'égalité) est le même que le nombre de neutrons disparaissant du domaine (termes de gauche). Rappelons que le flux est caractérisé par trois variables spatiales et deux variables angulaires. Le premier terme à gauche représente les diminutions de flux par migration de neutrons hors du domaine (point  $\vec{r}$ , direction  $\vec{\Omega}$ ), tandis que le deuxième désigne les pertes par collisions (absorptions ou diffusion vers un autre groupe d'énergie). Le dernier terme à droite de l'égalité représente les neutrons arrivant dans le domaine suite à une collision élastique. Finalement, on a inclus dans le terme de source  $Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ , à la fois les sources externes, les fissions et les diffusions provenant des autres groupes d'énergie.

Pour un problème comportant un nombre  $G$  de groupes d'énergie, on doit résoudre  $G$  fois l'équation (1.3), les sources étant recalculées à partir des flux obtenus aux itérations précédentes. Le couplage entre les groupes d'énergie se fait donc à l'aide du terme de source. Afin de simplifier la notation, et puisque la forme générale de l'équation de transport est la même quel que soit le groupe d'énergie, on laissera tomber l'indice  $g$  dans les équations.

En substituant  $\vec{\Omega}$  par  $-\vec{\Omega}$  dans (1.3), on obtient:

$$-(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, -\vec{\Omega})) + \Sigma(\vec{r})\varphi(\vec{r}, -\vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, -\vec{\Omega}) + \int d^2\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, -\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (1.4)$$

Si on s'inspire des équations (1.3) et (1.4), on peut diviser le flux et le terme de source en leurs composantes paire et impaire:

$$\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2}(\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \varphi(\vec{r}, -\vec{\Omega})) \quad (1.5)$$

$$\varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2}(\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \varphi(\vec{r}, -\vec{\Omega})) \quad (1.6)$$

$$Q^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2}(Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) + Q(\vec{r}, -\vec{\Omega})) \quad (1.7)$$

$$Q^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2}(Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) - Q(\vec{r}, -\vec{\Omega})) \quad (1.8)$$

On factorise ensuite le terme de diffusion en composantes spatiale et angulaire à l'aide d'harmoniques sphériques.

$$\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \sum_{k=0}^{\infty} \Sigma_{s,k}(\vec{r}) \sum_{h=-k}^k Y_k^h(\vec{\Omega}) Y_k^h(\vec{\Omega}') \quad (1.9)$$

Les harmoniques sphériques sont définies de la façon suivante:

$$Y_l^m(\vec{\Omega}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \cos(|m|\varphi) P_l^{|m|}(\mu) & \text{pour } m > 0 \\ \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l^0(\mu) & \text{pour } m = 0 \\ \sqrt{\frac{2(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \sin(|m|\varphi) P_l^{|m|}(\mu) & \text{pour } m < 0 \end{cases} \quad (1.10)$$

avec comme relation d'orthogonalité:

$$\int d^2\Omega Y_l^{m'}(\vec{\Omega}) Y_l^m(\vec{\Omega}) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (1.11)$$

et possédant la propriété suivante:

$$Y_l^m(-\vec{\Omega}) = (-1)^l Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad (1.12)$$

$P_l^{|m|}(\mu)$  sont les polynômes de Legendre associés [18]. Il est à noter que ces dernières propriétés des harmoniques sphériques sont indépendantes du système de coordonnées choisi.

En additionnant ou en soustrayant les équations (1.3) et (1.4) on obtient respectivement:

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})) + \Sigma_+[\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega})] = Q^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (1.13)$$

et

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega})) + \Sigma_-[\varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})] = Q^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (1.14)$$

où les opérateurs  $\Sigma_{\pm}[F^{\pm}(\vec{r}, \vec{\Omega})]$  ne sont que:

$$\Sigma_+[F^+(\vec{r}, \vec{\Omega})] = \sum_{k \text{ pair}}^{\infty} (\Sigma(\vec{r}) - \Sigma_{s,k}(\vec{r})) \sum_{h=-k}^k Y_k^h(\vec{\Omega}) \int d^2\Omega' Y_k^h(\vec{\Omega}') F^+(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (1.15)$$

$$\Sigma_-[F^-(\vec{r}, \vec{\Omega})] = \sum_{k \text{ impair}}^{\infty} (\Sigma(\vec{r}) - \Sigma_{s,k}(\vec{r})) \sum_{h=-k}^k Y_k^h(\vec{\Omega}) \int d^2\Omega' Y_k^h(\vec{\Omega}') F^-(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (1.16)$$

Il est à noter que les équations (1.13) et (1.14) ne contiennent aucune approximation, si ce n'est la discrétisation multigroupe en énergie. Avant de résoudre ces deux équations, nous devons fermer le système d'équations en définissant les conditions aux frontières.

## 1.2 Conditions aux frontières

Considérons un parallélépipède de volume  $V$  ayant la surface  $S$  comme frontière et tout point  $\vec{r} = (x, y, z)$  à l'intérieur de  $V$  satisfaisant:

$$x_- \leq x \leq x_+; \quad y_- \leq y \leq y_+; \quad z_- \leq z \leq z_+ \quad (1.17)$$

La surface  $S$  correspond donc à

$$S = \sum_{\nu=1}^3 (S_{-}^{\nu} + S_{+}^{\nu}) \quad (1.18)$$

où  $S_{\pm}^1$ ,  $S_{\pm}^2$  et  $S_{\pm}^3$  sont définies respectivement par les plans  $z = z_{\pm}$ ,  $x = x_{\pm}$  et  $y = y_{\pm}$ . À chacune de ces frontières, on associe un vecteur normal sortant  $\vec{N}_{\pm}^{\nu}$ .

Les conditions sur les surfaces  $S_{\pm}^{\nu}$  (frontières) que nous allons considérer peuvent être de deux types: conditions de vide et conditions de réflexion totale.

Pour les conditions de vide, on a annulation du flux réentrant à la frontière:

$$\varphi(\vec{r}_S, \vec{\Omega}_R) = 0 \quad (1.19)$$

où  $\vec{\Omega}_R$  correspond aux directions allant de l'extérieur du parallélépipède vers l'intérieur.

Les conditions de réflexion s'expriment de la manière suivante:

$$\varphi(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = \varphi(\vec{r}_S, \vec{\Omega} - 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}^{\nu})\vec{N}^{\nu}) \quad (1.20)$$

qui correspond au fait que les neutrons de direction  $\vec{\Omega}$  sont réfléchis dans la direction  $\vec{\Omega} - 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{N})\vec{N}$  à la surface  $\nu$ . Il s'agit ici d'une réflexion miroir.

On peut aussi exprimer ces conditions aux frontières en fonction des flux pair et impair [16], [12]:

1. Vide à  $\vec{r}_S \in S_\pm^\nu$ .

$$\varphi^+(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) + \varphi^-(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\pm^\nu < 0 \quad (1.21)$$

$$\varphi^+(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) - \varphi^-(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\pm^\nu > 0 \quad (1.22)$$

2. Réflexion totale à  $\vec{r}_S \in S_\pm^\nu$ .

$$\varphi^+(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = \varphi^+(\vec{r}_S, \vec{\Omega} - 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\pm^\nu) \vec{N}_\pm^\nu) \quad (1.23)$$

$$\varphi^-(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = \varphi^-(\vec{r}_S, \vec{\Omega} - 2(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\pm^\nu) \vec{N}_\pm^\nu) \quad (1.24)$$

## CHAPITRE 2

# FORMULATION VARIATIONNELLE

Dans cette section, on présente la fonctionnelle mixte-duale. À l'aide des équations d'Euler associées à la fonctionnelle, on montre comment la recherche des extréma permet de résoudre l'équation de transport. Finalement, on présente les restrictions qui devront s'appliquer aux fonctions d'interpolation.

### 2.1 Principe variationnel et extrémum

On utilise la méthode des éléments finis pour discrétiser les équations (1.13) et (1.14). La région d'intérêt, où l'on désire connaître le flux, est divisée en sous-volumes (éléments). Des fonctions d'interpolation sont utilisées pour évaluer les flux et les sources sur chaque élément. Pour minimiser l'erreur sur les coefficients des polynômes d'interpolation, on emploie le principe variationnel suivant:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{F[\vec{X} + \epsilon \delta \vec{X}] - F[\vec{X}]}{\epsilon} \right) = 0 \quad (2.1)$$

pour un ensemble de fonctions  $\vec{X} = (X_1, X_2, \dots, X_n)$  et pour des variations arbitraires  $\delta \vec{X}$ . La fonctionnelle  $F$  doit être choisie de façon telle que  $\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega})$  et  $\varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})$  en soient des points stationnaires par rapport à des variations arbitraires  $\delta \varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega})$  et  $\delta \varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})$  ( $\vec{X} = (\varphi^+, \varphi^-)$ ).

### 2.2 Fonctionnelle mixte-duale

Une telle fonctionnelle a été introduite par Vladimirov [17], puis étudiée par Kaplan et Davis [16]. La fonctionnelle mixte-duale correspond à la forme canonique

de la transformation "involutory" de la fonctionnelle de Vladimirov, soit:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}[\varphi^+, \varphi^-] = & \frac{1}{2} \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \left\{ 2\varphi^+(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\varphi^-) \right. \\
 & + \varphi^+\Sigma_+[\varphi^+] - \varphi^-\Sigma_-[\varphi^-] \\
 & - 2Q^+\varphi^+ + 2Q^-\varphi^- \} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^6 \int_{S_\nu} d^2r \left\{ \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) < 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) \varphi^{-2} \right. \\
 & \left. - \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) > 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) \varphi^{-2} \right\} \tag{2.2}
 \end{aligned}$$

$S_\nu$  est l'un des 6 côtés du parallélépipède de volume  $V$  constituant le domaine.

La fonctionnelle  $\mathcal{F}$  est équivalente à la fonctionnelle  $F_b$  de Davis [19] et à  $F_s^G$  de Kaplan-Davis [16]. Il a été démontré [19] que la fonctionnelle  $\mathcal{F}$  est stationnaire pour une approximation  $P_N$  d'ordre pair ayant des conditions aux frontières de Marshak paires [6]. Une telle approximation s'obtient en faisant une expansion en harmoniques sphériques de la composante angulaire du flux jusqu'à un ordre pair (Chapitre 3).

On peut montrer (annexe A) que le couple  $\varphi^-$  et  $\varphi^+$  est un point stationnaire de la fonctionnelle (2.2) puisque les équations d'Euler suivantes sont satisfaites:

1. Pour une variation par rapport à la composante impaire (équations (1.14) et (A.11)):

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega})) + \Sigma_-[\varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})] = Q^-(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

2. Pour une variation par rapport à la composante paire (équations (1.13) et (A.5)):

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})) + \Sigma_+[\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega})] = Q^+(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

3. Condition de vide (équations (1.21),(A.12) et (1.22),(A.13)):

$$\varphi^+(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) + \varphi^-(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu < 0$$

$$\varphi^+(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) - \varphi^-(\vec{r}_S, \vec{\Omega}) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu > 0$$

Les conditions de réflexion (équations (1.23) et (1.24)) ne font pas partie des conditions naturelles que l'on vient d'énumérer et devront donc être imposées aux fonctions d'essai. Ceci équivaut à restreindre la classe de fonctions qui minimisent la fonctionnelle à celles qui satisfont les conditions de réflexion. Nous verrons au paragraphe suivant que l'on devra aussi forcer la continuité du flux impair.

### 2.3 Discrétisation en éléments finis

On désire solutionner l'équation de transport sur des géométries complexes. On partitionne donc le domaine en "éléments" sur lesquels les propriétés nucléaires ont été homogénéisées. Le parallélépipède de volume  $V$  est donc subdivisé en  $N$  zones de volume  $V_e$  appelées éléments finis. La fonctionnelle (2.2) devient donc la somme de fonctionnelles zonales:

$$\mathcal{F}[\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}), \varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})] = \sum_{e=1}^N \mathcal{F}_e[\varphi_e^+(\vec{r}, \vec{\Omega}), \varphi_e^-(\vec{r}, \vec{\Omega})] \quad (2.3)$$

où  $\mathcal{F}_e[\varphi_e^+(\vec{r}, \vec{\Omega}), \varphi_e^-(\vec{r}, \vec{\Omega})]$  est évidemment semblable en tout point à (2.2) soit:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_e[\varphi_e^+, \varphi_e^-] &= \frac{1}{2} \int_{V_e} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \left\{ 2\varphi_e^+(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi_e^-) \right. \\ &+ \varphi_e^+ \Sigma_{+,e}[\varphi_e^+] - \varphi_e^- \Sigma_{-,e}[\varphi_e^-] \\ &- 2Q_e^+ \varphi_e^+ + 2Q_e^- \varphi_e^- \left. \right\} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^3 \int_{S_{-,e}^\nu} d^2r \int_{\Omega_{-, \nu} < 0} d^2\Omega \Omega_{-, \nu} \varphi_e^{-2} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^3 \int_{S_{+,e}^\nu} d^2r \int_{\Omega_{+, \nu} > 0} d^2\Omega \Omega_{+, \nu} \varphi_e^{-2} \end{aligned} \quad (2.4)$$

où  $\Omega_{\pm, \nu} = \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu$ .  $\varphi_e^\pm$  et  $S_e^\pm$  sont respectivement les flux et les sources à l'intérieur de la zone  $e$ . Le changement de signe de la dernière intégrale vient annuler l'effet

du changement des bornes d'intégration. Le nombre d'intégrales de surface pour chacune des deux directions passe de 6 à 3. En effet, les intégrales sur la surface  $S_-^\nu$  s'annulent lorsque  $\vec{\Omega} \cdot \vec{N} > 0$  tandis que les intégrales sur la surface  $S_+^\nu$  s'annulent lorsque  $\vec{\Omega} \cdot \vec{N} < 0$  [19]. On ne considère ainsi que la face extérieure de chaque surface.

Le partitionnement en sous-volumes a pour conséquence d'introduire de nouvelles surfaces qui ne sont plus associées aux conditions de frontières extérieures. Ainsi pour que (2.3) soit identique à (2.2), il faut que les termes de surfaces soient nuls pour chaque interface de zone. De plus, pour que le gradient du flux impair existe partout, il faut s'assurer que  $\varphi^-$  soit continue partout dans le domaine et donc aussi aux interfaces, et ce, dans toutes les directions. Cette condition n'étant pas assurée par la fonctionnelle, il faudra donc l'imposer aux fonctions d'essai.

## CHAPITRE 3

# EXPANSION POLYNOMIALE DES FLUX ET DES SOURCES

On factorise les flux et les sources selon leurs composantes angulaires et spatiales. Les fonctions d'essai sont donc constituées du produit de deux polynômes, chacun représentant l'une des composantes. Le choix des polynômes est restreint principalement par deux facteurs: continuité aux interfaces et continuité à l'intérieur des éléments. Les polynômes sont aussi choisis de façon à faciliter les divers calculs.

Dans ce chapitre, on effectue premièrement l'expansion et l'intégration des composantes angulaires de la fonctionnelle à l'aide d'harmoniques sphériques. On montre comment une telle expansion, limitée au premier ordre, permet d'obtenir les équations de la diffusion. Par la suite, on utilise des polynômes de Legendre et de Lagrange pour représenter les composantes spatiales. Cela nous permet d'assurer, seulement en partie toutefois, les conditions de continuité qui ne faisaient pas partie des conditions naturelles de la fonctionnelle. On montre que cette approximation constitue cependant une amélioration par rapport à l'approximation de la diffusion.

Pour simplifier les développements, la résolution de l'équation de transport est limitée à des géométries à une ou à deux dimensions.

### 3.1 Expansion angulaire en harmoniques sphériques

On exprime les composantes angulaires du flux et des sources à l'aide d'harmoniques sphériques. On obtient ainsi une bonne compatibilité avec les solutions obtenues à l'aide de la théorie de la diffusion. Une telle expansion a aussi comme avantage de ne pas souffrir des effets de rayons [20].

### 3.1.1 Harmoniques sphériques

Les composantes paire et impaire du flux s'expriment de la façon suivante lorsque l'on fait une expansion en harmoniques sphériques jusqu'à l'ordre  $L$  pair:

$$\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\substack{l=0 \\ l \text{ pair}}}^L \sum_{m=0}^l \varphi_{l,m}^+(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad (3.1)$$

$$\varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\substack{l=0 \\ l \text{ impair}}}^{L-1} \sum_{m=0}^l \varphi_{l,m}^-(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad (3.2)$$

Les harmoniques sphériques  $Y_l^m$  sont telles que définies à l'équation (1.10). Les valeurs de  $m$  sont positives pour assurer la symétrie par rapport aux deux axes principaux en espace ( $z$  et  $x$ ). Les directions de ces axes sont données par:

$$(Y(\vec{\Omega}_z), Y(\vec{\Omega}_x)) = (\cos \theta, \cos \phi \sin \theta) \quad (3.3)$$

Notons que pour un problème à une dimension, seule la valeur  $m = 0$  contribue.

En exprimant les flux sous forme de produits vectoriels, on obtient:

$$\begin{aligned} \varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T \vec{Y}^+(\vec{\Omega}) \\ &= (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T P_P \vec{Y}(\vec{\Omega}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T \vec{Y}^-(\vec{\Omega}) \\ &= (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

où

$$\vec{Y}^+(\vec{\Omega})^T = (Y_0^0, Y_2^0, Y_2^1, Y_2^2 \dots) \quad (3.6)$$

$$\vec{Y}^-(\vec{\Omega})^T = (Y_1^0, Y_1^1, Y_3^0, Y_3^1, Y_3^2, Y_3^3 \dots) \quad (3.7)$$

et

$$\vec{Y}(\vec{\Omega})^T = (Y_0^0, Y_1^0, Y_1^1, Y_2^0, Y_2^1, Y_2^2, Y_3^0 \dots) \quad (3.8)$$

$P_P$  et  $P_I$  sont des matrices de projection qui permettent d'obtenir respectivement les composantes paires jusqu'à l'ordre  $L$  et impaires jusqu'à l'ordre  $L - 1$  d'un

vecteur d'harmoniques sphériques  $\vec{Y}(\vec{\Omega})$ . Ils ont la forme suivante si par exemple  $L = 2$ :

$$P_P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

$$P_I = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

Pour la même valeur de  $L$ , on a:

$$(\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T = (\varphi_{0,0}(\vec{r}), \varphi_{2,0}(\vec{r}), \varphi_{2,1}(\vec{r}), \varphi_{2,2}(\vec{r})) \quad (3.11)$$

et

$$(\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T = (\varphi_{1,0}(\vec{r}), \varphi_{1,1}(\vec{r})) \quad (3.12)$$

Les matrices  $P_P$  et  $P_I$  ont donc les propriétés suivantes:

$$P_P P_P^T = I_{d^+} \quad (3.13)$$

$$P_I P_I^T = I_{d^-} \quad (3.14)$$

où  $I_{d^+}$  et  $I_{d^-}$  sont des matrices identité de dimensions  $d^+ \times d^+$  et  $d^- \times d^-$  respectivement et où  $d^+ = \frac{(L+2)^2}{4}$  et  $d^- = \frac{L(L+2)}{4}$ . Rappelons que l'expansion doit être limitée à un ordre  $L$  pair pour que la fonctionnelle mixte-duale soit stationnaire.

Les sources s'expriment de façon analogue aux flux mais avec une expansion infinie en harmoniques sphériques:

$$Q^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\substack{l=0 \\ l \text{ pair}}}^{\infty} \sum_{m=0}^l Q_{l,m}^+(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) = (\vec{Q}^+(\vec{r}))^T P_+ \vec{Y}(\vec{\Omega}) \quad (3.15)$$

$$Q^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{\substack{l=0 \\ l \text{ impair}}}^{\infty} \sum_{m=0}^l Q_{l,m}^-(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) = (\vec{Q}^-(\vec{r}))^T P_- \vec{Y}(\vec{\Omega}) \quad (3.16)$$

où  $P_{\pm}$  sont des matrices de projections analogues à  $P_P$  et  $P_I$  mais qui produisent toutefois des vecteurs de dimensions infinies. Finalement, l'expression pour les opérateurs  $\Sigma_{\pm}[F(\vec{r}, \vec{\Omega})]$  devient:

$$\Sigma_{\pm}[F(\vec{r}, \vec{\Omega})] = \int d^2\Omega' F(\vec{r}, \vec{\Omega}') (\vec{Y}(\vec{\Omega}'))^T \Sigma_{\pm,a}(\vec{r}) \vec{Y}(\vec{\Omega}) \quad (3.17)$$

où  $\Sigma_{\pm,a}$  sont des matrices diagonales qui ont des termes non nuls correspondant à  $k$  termes ( $\Sigma - \Sigma_{s,k}$ ) pairs ou impairs.

### 3.1.2 Intégration angulaire

En substituant les équations (3.4), (3.5), (3.15), (3.16) et (3.17) dans (2.2) (ou (2.4)), on obtient:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}[\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}), \varphi^-(\vec{r}, \vec{\Omega})] &= \frac{1}{2} \int_S d^2r \int_{4\pi} d^2\Omega \left\{ 2 \left( \varphi^+(\vec{r})^T P_P \vec{Y}(\vec{\Omega}) \right) \right. \\
 &\quad \times (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}) \left( \vec{\varphi}^-(\vec{r})^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega}) \right) \\
 &\quad + \int d^2\vec{\Omega}' \left( (\varphi^+(\vec{r})^T P_P \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right. \\
 &\quad \times \left( (\varphi^+(\vec{r})^T P_P \vec{Y}(\vec{\Omega}'))^T \Sigma_{+,a}(\vec{r}) \vec{Y}(\vec{\Omega}) \right) \\
 &\quad - \int d^2\vec{\Omega}' \left( (\varphi^-(\vec{r})^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right. \\
 &\quad \times \left( (\varphi^-(\vec{r})^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega}'))^T \Sigma_{-,a}(\vec{r}) \vec{Y}(\vec{\Omega}) \right) \\
 &\quad - 2 \left( (Q^+(\vec{r})^T P_+ \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right. \\
 &\quad \times \left( (\varphi^+(\vec{r})^T P_P \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right. \\
 &\quad + 2 \left( (Q^-(\vec{r})^T P_- \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right. \\
 &\quad \times \left( (\varphi^-(\vec{r})^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right) \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\nu}^2 \int_{L_{-\nu}^u} dr \int_{\Omega_{-, \nu} < 0} d^2\Omega \Omega_{-, \nu} \\
 &\quad \times \left( (\vec{\varphi}^-(\vec{r})^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right)^2 \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\nu}^2 \int_{L_{+\nu}^u} dr \int_{\Omega_{+, \nu} > 0} d^2\Omega \Omega_{+, \nu} \\
 &\quad \times \left( (\vec{\varphi}^-(\vec{r})^T P_I \vec{Y}(\vec{\Omega})) \right)^2 \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

où on est passé de trois à deux dimensions. (Le nombre d'intégrales de surface était passé de 6 à 3 à la section 2.3 lorsqu'on a montré que les intégrales de surface étaient non nulles sur un seul des côtés pour chacune des directions.)

Avant d'effectuer l'intégration sur tous les angles, nous allons introduire une nouvelle notation. Ainsi,

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}) = \left( \Omega_z \frac{\partial}{\partial z} + \Omega_x \frac{\partial}{\partial x} \right) = \sum_{\nu=1}^2 \Omega_{\nu} \partial^{\nu} \quad (3.19)$$

où

$$(\Omega_1, \Omega_2) = (\cos \theta, \cos \phi \sin \theta) \quad (3.20)$$

ne sont que les projections sur les axes  $z$  et  $x$  et

$$(\partial^1, \partial^2) = \left( \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (3.21)$$

Après intégration sur les angles, l'équation (3.18) devient:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\varphi^+(\vec{r}), \varphi^-(\vec{r})] &= \sum_{\nu=1}^2 \int_S d^2r (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T Z_{\nu}(\vec{r}) \partial^{\nu} \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \int_S d^2r (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T Z_a^+(\vec{r}) \vec{\varphi}^+(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \int_S d^2r (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z_a^-(\vec{r}) \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \\ &- \int_S d^2r (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T Z^+(\vec{r}) \vec{Q}^+(\vec{r}) \\ &+ \int_S d^2r (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z^-(\vec{r}) \vec{Q}^-(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu}^2 \int_{L_{\nu}^-} dr (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z_{\beta, \nu}^-(\vec{r}) \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu}^2 \int_{L_{\nu}^+} dr (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z_{\beta, \nu}^+(\vec{r}) \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.22)$$

où on a introduit les matrices suivantes:

$$Z_{\nu}(\vec{r}) = P_P A_{\nu} (P_I)^T \quad (3.23)$$

$$Z_a^+(\vec{r}) = P_P \Sigma_{s,+} (P_P)^T \quad (3.24)$$

$$Z_a^-(\vec{r}) = P_I \Sigma_{s,-} (P_I)^T \quad (3.25)$$

$$Z^+(\vec{r}) = P_P(P_+)^T \quad (3.26)$$

$$Z^-(\vec{r}) = P_I(P_-)^T \quad (3.27)$$

$$Z_{\beta,\nu}^-(\vec{r}) = P_I A_\nu B_\nu (P_I)^T \quad (3.28)$$

Les matrices symétriques  $A_\nu$  et  $B_\nu$  sont les mêmes que celles de Marleau [12] et sont décrites brièvement à l'annexe B:

$$\Omega_\nu \vec{Y}(\vec{\Omega}) = A_\nu \vec{Y}(\vec{\Omega}) \quad (3.29)$$

$$B_\nu = \int_{\Omega_{\pm,\nu} > 0} d^2\Omega (\vec{Y}(\vec{\Omega}) \otimes \vec{Y}(\vec{\Omega})) \quad (3.30)$$

où  $\otimes$  est le produit externe de deux vecteurs.

On remarque que les matrices  $Z_a^+(\vec{r})$ ,  $Z_a^-(\vec{r})$  et  $Z_{\beta,\nu}^-(\vec{r})$  sont des matrices carrées de dimensions  $d^+$  pour la première et  $d^-$  pour les deux autres. Les trois autres, soit  $Z_\nu(\vec{r})$ ,  $Z^+(\vec{r})$  et  $Z^-(\vec{r})$  sont rectangulaires. La matrice  $Z_\nu(\vec{r})$  est de dimension  $d^+ \times d^-$ . Puisque  $P_P$  et  $P_I$  projettent des vecteurs de dimensions infinies en des vecteurs de dimensions  $d^+$  et  $d^-$  respectivement, on peut écrire:

$$P_P(P_+)^T \vec{V} = \vec{V}_P^+ \quad (3.31)$$

où  $\vec{V}_P^+$  est formé des composantes paires jusqu'à l'ordre  $L$  du vecteur infini  $\vec{V}$ . On répète la même opération pour projeter les composantes impaires.

On réécrit la fonctionnelle de la façon suivante:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\varphi^+(\vec{r}), \varphi^-(\vec{r})] &= \sum_{\nu=1}^2 \int_S d^2r (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T Z_\nu(\vec{r}) \partial^\nu \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \int_S d^2r (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T Z_a^+(\vec{r}) \vec{\varphi}^+(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \int_S d^2r (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z_a^-(\vec{r}) \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \\ &- \int_S d^2r (\vec{\varphi}^+(\vec{r}))^T \vec{Q}_P^+(\vec{r}) \\ &+ \int_S d^2r (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T \vec{Q}_I^-(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu}^2 \int_{L_\nu^+} dr (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z_{\beta,\nu}^-(\vec{r}) \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu}^2 \int_{L_\nu^+} dr (\vec{\varphi}^-(\vec{r}))^T Z_{\beta,\nu}^-(\vec{r}) \vec{\varphi}^-(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.32)$$

où  $\vec{Q}_P^+(\vec{r})$  et  $\vec{Q}_I^-(\vec{r})$  sont limités respectivement à l'ordre  $L$  et  $L - 1$ .

### 3.1.3 Equation $P_1$

On obtient les équations  $P_1$  à partir des équations d'Euler-Lagrange, en faisant une expansion des flux en harmoniques sphériques, premièrement jusqu'à l'ordre  $L = 2$ , puis en négligeant les termes d'ordre supérieur à 1. On considère le cas où les sources externes sont isotropes ( $Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r})$ ) et où les sections efficaces de diffusion sont linéairement anisotropes. À l'ordre 2 (et toujours en 2 dimensions) on a  $\vec{\varphi}^+(\vec{r}) = [\varphi_{00}(\vec{r}) \quad \varphi_{20}(\vec{r}) \quad \varphi_{21}(\vec{r}) \quad \varphi_{22}(\vec{r})]^T$ ,  $\vec{\varphi}^- = [\varphi_{10}(\vec{r}) \quad \varphi_{11}(\vec{r})]^T = \vec{J}(\vec{r})$  et

$$Z_1(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{15}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

$$Z_2(\vec{r}) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{-1}{\sqrt{15}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

$$Z_a^-(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \Sigma_{tr} & 0 \\ 0 & \Sigma_{tr} \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

$$Z_a^+(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \Sigma_a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Sigma \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

$$Z_{\beta,1}^-(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \frac{3}{8} & 0 \\ 0 & \frac{3}{16} \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

$$Z_{\beta,2}^-(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \frac{3}{16} & 0 \\ 0 & \frac{3}{8} \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

$$(3.39)$$

où  $\Sigma_{tr} = \Sigma(\vec{r}) - \Sigma_{s,1}(\vec{r})$  est la section efficace de transport.

En substituant les matrices ci-haut, la fonctionnelle s'écrit:

$$\mathcal{F}[\varphi^+(\vec{r}), \varphi^-(\vec{r})] = \int_S d^2r \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_{00} \partial^1 \varphi_{10} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_{00} \partial^2 \varphi_{11} \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2}{\sqrt{15}}\varphi_{20}\partial^1\varphi_{10} - \frac{1}{\sqrt{15}}\varphi_{20}\partial^2\varphi_{11} \\
& + \frac{1}{\sqrt{5}}\varphi_{21}\partial^1\varphi_{11} + \frac{1}{\sqrt{5}}\varphi_{21}\partial^2\varphi_{10} + \frac{1}{\sqrt{5}}\varphi_{22}\partial^2\varphi_{11} \\
& - \frac{1}{2}\Sigma_{tr}\varphi_{10}^2 - \frac{1}{2}\Sigma_{tr}\varphi_{11}^2 - \varphi_{00}Q \\
& + \frac{1}{2}\Sigma_a\varphi_{00}^2 + \frac{1}{2}\Sigma\varphi_{20}^2 + \frac{1}{2}\Sigma\varphi_{21}^2 + \frac{1}{2}\Sigma\varphi_{22}^2 \} \\
& - \frac{1}{2} \left\{ \int_{L_1^1} dr \left( \frac{3}{8}\varphi_{10}^2 + \frac{3}{16}\varphi_{11}^2 \right) \right. \\
& + \int_{L_1^1} dr \left( \frac{3}{8}\varphi_{10}^2 + \frac{3}{16}\varphi_{11}^2 \right) \\
& + \int_{L_2^1} dr \left( \frac{3}{16}\varphi_{10}^2 + \frac{3}{8}\varphi_{11}^2 \right) \\
& \left. + \int_{L_2^1} dr \left( \frac{3}{16}\varphi_{10}^2 + \frac{3}{8}\varphi_{11}^2 \right) \right\} \tag{3.40}
\end{aligned}$$

où  $\varphi$  et  $Q$  sont fonction de  $\vec{r}$  seulement.

En cherchant un extrémum par rapport à  $\varphi_{00}$ , on a:

$$\frac{d\mathcal{F}}{d\varphi_{00}} = \int_S d^2r \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} (\partial^1\varphi_{10} + \partial^2\varphi_{11}) + \Sigma_a\varphi_{00} - Q \right\} = 0 \tag{3.41}$$

alors que des extréma par rapport à  $\varphi_{10}$  et  $\varphi_{11}$  donnent:

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{F}}{d\varphi_{10}} &= \int_S d^2r \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}\partial^1\varphi_{00} - \Sigma_{tr}\varphi_{10} \right\} \\
&- \int_{L_1^1} dr \left( \frac{3}{8}\varphi_{10} - \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{00} \right) + \int_{L_2^1} dr \frac{3}{16}\varphi_{10} \\
&+ \int_{L_1^1} dr \left( \frac{3}{8}\varphi_{10} - \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{00} \right) + \int_{L_2^1} dr \frac{3}{16}\varphi_{10} \\
&= 0 \tag{3.42}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{F}}{d\varphi_{11}} &= \int_S d^2r \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}\partial^2\varphi_{00} - \Sigma_{tr}\varphi_{11} \right\} \\
&- \int_{L_1^1} dr \frac{3}{16}\varphi_{11} + \int_{L_2^1} dr \left( \frac{3}{8}\varphi_{11} - \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{00} \right) \\
&+ \int_{L_1^1} dr \frac{3}{16}\varphi_{11} + \int_{L_2^1} dr \left( \frac{3}{8}\varphi_{11} - \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{00} \right) \\
&= 0 \tag{3.43}
\end{aligned}$$

en annulant les termes d'ordre 2.

Les trois intégrales de volume donnent donc les relations suivantes:

$$\frac{1}{\sqrt{3}} (\partial^1 \varphi_{10} + \partial^2 \varphi_{11}) + \Sigma_a \varphi_{00} - Q = 0 \quad (3.44)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{3}} \partial^1 \varphi_{00} - \Sigma_{tr} \varphi_{10} = 0 \quad (3.45)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{3}} \partial^2 \varphi_{00} - \Sigma_{tr} \varphi_{11} = 0 \quad (3.46)$$

d'où

$$\varphi_{10} = -\frac{1}{\sqrt{3} \Sigma_{tr}} \partial^1 \varphi_{00} \quad (3.47)$$

$$\varphi_{11} = -\frac{1}{\sqrt{3} \Sigma_{tr}} \partial^2 \varphi_{00} \quad (3.48)$$

et

$$-\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{3 \Sigma_{tr}} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) + \Sigma_a(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = Q(\vec{r}) \quad (3.49)$$

qui est l'équation de diffusion, avec  $D = \frac{1}{3 \Sigma_{tr}}$ .

On trouve les conditions aux frontières de la même façon, mais en ne gardant que les intégrales de lignes. On peut donc écrire pour  $L_+^1$  et  $L_-^1$ :

$$\frac{3}{8} \varphi_{10} - \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_{00} = 0 \quad (3.50)$$

$$\frac{3}{16} \varphi_{11} = 0 \quad (3.51)$$

et

$$\frac{3}{16} \varphi_{10} = 0 \quad (3.52)$$

$$\frac{3}{8} \varphi_{11} - \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_{00} = 0 \quad (3.53)$$

pour  $L_+^2$  et  $L_-^2$ . En utilisant les équations reliant  $\varphi_{10}$  et  $\varphi_{11}$  à  $\partial^1 \varphi_{00}$  et  $\partial^2 \varphi_{00}$  respectivement et sachant que  $\vec{N}_\nu \cdot \vec{\nabla} = \partial^\nu$  pour  $\nu = 1, 2$ , on obtient:

$$\frac{3}{8 \Sigma_{tr}} \vec{N}_\nu^\pm \cdot \vec{\nabla} \varphi_{00} + \varphi_{00} = 0 \quad (3.54)$$

qui sont les conditions de Marshak pair d'ordre 1, en deux dimensions.

Pour les conditions de Marshak impaires, le facteur  $\frac{3}{8}$  est remplacé par  $\frac{2}{3}$  [20]. Ce facteur vaut  $\frac{1}{\sqrt{3}}$  pour les conditions de Mark [20, 7]. Les conditions de Mark sont habituellement utilisées avec la méthode  $S_n$  (où les harmoniques sphériques sont remplacées par des valeurs discrètes d'angles).

On se réfère habituellement aux conditions de Marshak impaires, simplement en disant conditions de Marshak. La distinction entre les conditions de Marshak paires et impaires provient de Davis [19].

### 3.2 Expansion spatiale dans un réacteur homogène

Pour éliminer toute dépendance spatiale dans la fonctionnelle, on approxime maintenant les composantes spatiales des sources et des flux par des polynômes spatiaux, et on intègre par la suite sur tout l'espace.

#### 3.2.1 Changement de variables

Avant de choisir les polynômes, on effectue le changement de variables suivant:

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{1}{\Delta_1}(z - z_c) & u_2 &= \frac{1}{\Delta_2}(x - x_c) \\ \Delta_1 &= z_1 - z_2 & \Delta_2 &= x_1 - x_2 \\ z_c &= \frac{1}{2}(z_1 + z_2) & x_c &= \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \end{aligned} \tag{3.55}$$

Cela permet d'avoir des valeurs en abscisse et en ordonnée allant de  $-\frac{1}{2}$  à  $\frac{1}{2}$ , et ce quel que soit l'élément.

Les opérateurs deviennent ainsi:

$$\begin{aligned} \partial^\nu &= \frac{\partial}{\Delta_\nu \partial u_\nu} \\ \int d^2 r &= S \int_{-1/2}^{1/2} du_1 \int_{-1/2}^{1/2} du_2 = \int d^2 \rho \\ \int_{L_\pm^\nu} dr &= \Delta_{\epsilon(\nu+1)} \int_{-1/2}^{1/2} du_\nu = \int d\rho \\ \epsilon(\nu + \mu) &= (\nu + \mu - 1 \bmod 2) + 1 \end{aligned}$$

où  $\text{mod}$  est la fonction modulo,  $S = \Delta_1 \Delta_2$  est la surface de la zone.

### 3.2.2 Continuité des flux d'un élément à l'autre

Le choix des polynômes servant à représenter les composantes spatiales de la fonctionnelle est premièrement dicté par les besoins de continuité. On a vu à la section 2.3 que la continuité de la composante impaire du flux n'était pas assurée par la fonctionnelle. On doit donc tenir compte de cette restriction dans le choix des polynômes d'interpolation.

Idéalement, on aimerait utiliser un produit de polynômes de Legendre en  $z$  et en  $x$  pour représenter les composantes paire et impaire du flux. La raison principale est la relation d'orthogonalité suivante:

$$\int_{-1/2}^{1/2} du P_k(u) P_{k'}(u) = \delta_{kk'} \quad (3.56)$$

où  $P_k(u)$  et  $P_{k'}(u)$  sont des polynômes de Legendre respectivement d'ordre  $k$  et  $k'$ . Cette relation d'orthogonalité entre les polynômes de Legendre simplifie les calculs et allège évidemment les matrices. Cependant, l'utilisation de polynômes de Legendre n'assure pas automatiquement la continuité des flux entre deux éléments.

### 3.2.3 Flux impair

On choisit des polynômes de Lagrange de façon à forcer la continuité du flux impair. Les polynômes de Lagrange ont la propriété de pouvoir se connecter d'un élément à l'autre. La continuité est forcée par l'utilisation du même coefficient pour multiplier  $L_K(u)$  dans un élément et  $L_0(u)$  dans le suivant, pour une expansion d'ordre  $K$ . Toutefois, avant de se résigner à recourir à un produit de polynômes de Lagrange comme représentation spatiale du flux impair, examinons de plus près les besoins en continuité.

On a vu à la section 2.3 que  $\varphi^-$  devait être continu pour que son gradient existe presque partout. Le gradient correspond au premier terme de la fonctionnelle (3.22)

et plus particulièrement à la matrice  $Z_v$ . Le tableau 3.1 nous montre les termes non nuls de cette matrice dans le cas  $P_6$ . Un  $x$  suppose une dérivée par rapport à  $x$  et un  $z$ , une dérivée par rapport à  $z$ . On remarque qu'en annulant les termes correspondant aux flux pairs ( $l$  pair) dont la valeur de  $m$  est impaire, il ne reste, pour chaque mode impair, que des termes non nuls dans la même direction. On ne doit alors forcer la continuité que dans une seule direction, quel que soit le mode  $l$  impair.

Ainsi, pour un mode impair ( $l$  impair) dont la valeur de  $m$  est pair, la continuité ne doit être forcée que dans la direction  $z$ . De même, lorsque  $m$  est impair seule la direction  $x$  a besoin de continuité. En négligeant ces termes de couplages, on n'a donc jamais besoin d'utiliser un produit de polynômes de Lagrange en  $z$  et en  $x$ .

Cette approximation, que nous allons effectuer, ressemble à celle que fait Larsen avec ses équations  $SP_N$  (simplified  $P_N$ ) [15]. On a cependant l'avantage ici de négliger moins de termes (voir annexe D); on appellera donc notre méthode  $NASPN$ : "not as simplified  $P_N$ ". L'ampleur de l'approximation augmente évidemment avec l'ordre angulaire. Elle demeure cependant toujours moins importante que dans le cas des  $SP_N$ . Notons que la méthode  $NASPN$ , comme la méthode  $SP_N$ , ne suppose aucune approximation pour des géométries à une dimension car seulement les modes  $m = 0$  sont considérés dans ce cas.

Le flux impair se représente spatialement par un produit de polynômes de Legendre et de Lagrange. On a:

$$\vec{\varphi}^-(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^K \sum_{j=0}^{K-1} \varphi_{1,0}^{i,j} L_i(u_1) P_j(u_2) \\ \sum_{i=0}^{K-1} \sum_{j=0}^K \varphi_{1,1}^{i,j} P_i(u_1) L_j(u_2) \\ \sum_{i=0}^K \sum_{j=0}^{K-1} \varphi_{3,0}^{i,j} L_i(u_1) P_j(u_2) \\ \sum_{i=0}^{K-1} \sum_{j=0}^K \varphi_{3,1}^{i,j} P_i(u_1) L_j(u_2) \\ \sum_{i=0}^K \sum_{j=0}^{K-1} \varphi_{3,2}^{i,j} L_i(u_1) P_j(u_2) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{L}_P^T \vec{\varphi}_{1,0} \\ \vec{L}_I^T \vec{\varphi}_{1,1} \\ \vec{L}_P^T \vec{\varphi}_{3,0} \\ \vec{L}_I^T \vec{\varphi}_{3,1} \\ \vec{L}_P^T \vec{\varphi}_{3,2} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

où

$$\vec{L}_P(u_1, u_2) = \begin{pmatrix} L_o(u_1)P_o(u_2) \\ L_1(u_1)P_o(u_2) \\ \vdots \\ L_K(u_1)P_o(u_2) \\ L_o(u_1)P_1(u_2) \\ L_1(u_1)P_1(u_2) \\ \vdots \\ L_K(u_1)P_{K-1}(u_2) \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

$$\vec{L}_I(u_1, u_2) = \begin{pmatrix} P_o(u_1)L_o(u_2) \\ P_1(u_1)L_o(u_2) \\ \vdots \\ P_{K-1}(u_1)L_o(u_2) \\ P_o(u_1)L_1(u_2) \\ P_1(u_1)L_1(u_2) \\ \vdots \\ P_{K-1}(u_1)L_K(u_2) \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

On représente les sources impaires de la même façon, même si aucune continuité n'est nécessaire dans leur cas. On évite ainsi d'avoir à évaluer des intégrales du type

$$\int_{-1/2}^{1/2} L_n(s)P_m(s)ds \quad (3.60)$$

Notons que les polynômes de Legendre sont développés à un ordre inférieur (de 1) à celui des polynômes de Lagrange. Nous verrons en effet que les polynômes de Lagrange seront dérivés une fois, alors que les polynômes de Legendre ne subiront aucune dérivée. Il n'y aurait donc aucune contribution de la part des termes de Legendre d'ordre supérieur.

Les polynômes de Lagrange utilisés sont décrits à l'annexe C. On montrera à la section 4.2 pourquoi leur forme a été modifiée par rapport à la forme standard que l'on trouve habituellement dans la littérature.

### 3.2.4 Flux pair

Si on utilise un produit de polynômes de Legendre pour représenter la composante spatiale du flux pair, celle-ci s'exprime de la façon suivante:

$$\varphi_{l,m}(\vec{r}) = \sum_{i=0}^{K-1} \sum_{j=0}^{K-1} \varphi_{l,m}^{ij} P_i(u_1) P_j(u_2) \quad (3.61)$$

lorsque l'on fait une expansion jusqu'à l'ordre  $K-1$ . On effectue une telle expansion pour chacun des modes pairs ( $l$  pair).

En exprimant vectoriellement le flux pair, on obtient:

$$\begin{aligned} \vec{\varphi}^+(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} \sum_{i,j=0}^{K-1} \varphi_{0,0}^{ij} P_i(u_1) P_j(u_2) \\ \sum_{i,j=0}^{K-1} \varphi_{2,0}^{ij} P_i(u_1) P_j(u_2) \\ \sum_{i,j=0}^{K-1} \varphi_{2,1}^{ij} P_i(u_1) P_j(u_2) \\ \vdots \\ \sum_{i,j=0}^{K-1} \varphi_{(K-1),0}^{ij} P_i(u_1) P_j(u_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{P}^T \vec{\varphi}_{0,0} \\ \vec{P}^T \vec{\varphi}_{2,0} \\ \vec{P}^T \vec{\varphi}_{2,1} \\ \vdots \\ \vec{P}^T \vec{\varphi}_{(K-1),0} \end{pmatrix} \\ &= (\vec{P}^T \otimes I_{d+}) \vec{\varphi}^+ \end{aligned} \quad (3.62)$$

où

$$\vec{\varphi}_{l,m} = \begin{pmatrix} \varphi_{l,m}^{00} \\ \varphi_{l,m}^{10} \\ \vdots \\ \varphi_{l,m}^{(K-1)0} \\ \varphi_{l,m}^{01} \\ \varphi_{l,m}^{11} \\ \vdots \\ \varphi_{l,m}^{(K-1)(K-1)} \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

et

$$\vec{P}(u_1, u_2) = \begin{pmatrix} P_0(u_1) P_0(u_2) \\ P_1(u_1) P_0(u_2) \\ \vdots \\ P_{K-1}(u_1) P_0(u_2) \\ P_0(u_1) P_1(u_2) \\ P_1(u_1) P_1(u_2) \\ \vdots \\ P_{K-1}(u_1) P_{K-1}(u_2) \end{pmatrix} \quad (3.64)$$

L'expansion en séries des sources paires se fait de la même façon, soit

$$\vec{Q}^+(\vec{r}) = (\vec{P}^T \otimes I_{d+}) \vec{Q}^+ \quad (3.65)$$

Chacun des  $P_i(u)$  est un polynôme de Legendre d'ordre  $i$  en  $u$ . Nous avons vu à la section précédente que l'expansion des polynômes de Legendre jusqu'à l'ordre  $K - 1$  était compatible avec celle faite à partir de polynômes de Lagrange jusqu'à l'ordre  $K$ .

Puisqu'on a besoin de  $K$  points de collocation par élément ( $u_i$ ;  $i = 0, K - 1$ ), il y a donc  $K^n$  inconnus par ordre angulaire pair,  $n$  étant la dimension spatiale.

Une description des polynômes de Legendre se trouve à l'annexe C.

### 3.2.5 Intégration spatiale

L'utilisation des expansions précédentes permet d'écrire la fonctionnelle:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\varphi^+, \varphi^-] &= \sum_{\nu=1}^2 (\vec{\varphi}^+)^T Z_{r,\nu} \vec{\varphi}^- \\ &+ \frac{1}{2} (\vec{\varphi}^+)^T \left( \int d^2 \rho \vec{P} \otimes \vec{P} \right) \otimes Z_a^+ \vec{\varphi}^+ \\ &- \frac{1}{2} (\vec{\varphi}^-)^T Z_{r,a}^- \vec{\varphi}^- \\ &- (\vec{\varphi}^+)^T \left( \int d^2 \rho \vec{P} \otimes \vec{P} \right) \otimes I_{d+} \vec{Q}^+ \\ &+ (\vec{\varphi}^-)^T Z_r^- \vec{Q}^- \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^2 (\vec{\varphi}^-)^T Z_{r,-,\nu} \vec{\varphi}^- \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^2 (\vec{\varphi}^-)^T Z_{r,+, \nu} \vec{\varphi}^- \end{aligned} \quad (3.66)$$

où

$$Z_{r,\nu} = \begin{pmatrix} z_{\nu}^{11} \int d^2 \rho (\vec{P} \otimes \vec{L}_{P\theta\nu}^T) & z_{\nu}^{12} \int d^2 \rho (\vec{P} \otimes \vec{L}_{I\theta\nu}^T) & \dots \\ z_{\nu}^{21} \int d^2 \rho (\vec{P} \otimes \vec{L}_{P\theta\nu}^T) & z_{\nu}^{22} \int d^2 \rho (\vec{P} \otimes \vec{L}_{I\theta\nu}^T) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

$$Z_{r,a}^- = \begin{pmatrix} z_{a,-}^{11} \int d^2 \rho (\vec{L}_P \otimes \vec{L}_P^T) & 0 & \dots \\ 0 & z_{a,-}^{22} \int d^2 \rho (\vec{L}_I \otimes \vec{L}_I^T) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

$$Z_r^- = \begin{pmatrix} \int d^2\rho(\vec{L}_P \otimes \vec{L}_P^T) & 0 & \dots \\ 0 & \int d^2\rho(\vec{L}_I \otimes \vec{L}_I^T) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

$$Z_{r,\pm,\nu} = \begin{pmatrix} z_{\beta,\nu}^{11} \int d\rho(\vec{L}_{P,\pm,\nu} \otimes \vec{L}_{P,\pm,\nu}^T) & z_{\beta,\nu}^{12} \int d\rho(\vec{L}_{P,\pm,\nu} \otimes \vec{L}_{I,\pm,\nu}^T) & \dots \\ z_{\beta,\nu}^{21} \int d\rho(\vec{L}_{I,\pm,\nu} \otimes \vec{L}_{P,\pm,\nu}^T) & z_{\beta,\nu}^{22} \int d\rho(\vec{L}_{I,\pm,\nu} \otimes \vec{L}_{I,\pm,\nu}^T) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.70)$$

et

$$\begin{aligned} \vec{L}_{\alpha\nu} &= \frac{\partial \vec{L}}{\Delta_\nu \partial u_\nu} \\ \vec{L}_{\pm,\nu} &= \begin{cases} \vec{L}(\pm\frac{1}{2}, u_2) & \nu = 1 \\ \vec{L}(u_1, \pm\frac{1}{2}) & \nu = 2 \end{cases} \end{aligned}$$

Les termes  $Z_\nu^{ij}$  correspondent aux éléments de la matrice  $Z_\nu$ , (3.23),  $Z_{\alpha,-}^{ij}$  correspondent aux éléments de la matrice  $Z_\alpha^-$  (3.25), et  $Z_{\beta,\nu}^{ij}$ , aux éléments de  $Z_{\beta,\nu}^-$  (3.28).

On remarque que le type d'intégrale spatiale dépend du couplage entre les modes angulaires. Nous allons examiner individuellement chacun des quatre types d'intégrale en commençant par la plus simple à évaluer, soit celle issue du couplage entre deux composantes paires (flux ou source).

En observant l'équation (3.56) on voit immédiatement que

$$\int d^2\rho \vec{P} \otimes \vec{P} = S I_{K^2} \quad (3.71)$$

où  $I_{K^2}$  est une matrice identité de dimension  $K^2 \times K^2$ , et  $S$  est la surface de l'élément.

Le deuxième type d'intégrale provient du couplage entre deux composantes impaires soit:

$$\begin{aligned} &\int d^2\rho(\vec{L}_a \otimes \vec{L}_a^T) \\ &a = I \text{ ou } P \end{aligned}$$

En définissant la matrice  $R$  telle que

$$\int_{-1/2}^{1/2} L_n(s) L_m(s) ds = R_{n,m} \quad (3.72)$$

on obtient

$$\int d^2\rho(\vec{L}_P \otimes \vec{L}_P) = SR \otimes I_K \quad (3.73)$$

$$\int d^2\rho(\vec{L}_I \otimes \vec{L}_I) = SI_K \otimes R \quad (3.74)$$

On évalue ensuite les intégrales spatiales de la matrice  $Z_{r,\nu}$ . En introduisant la matrice  $V$  où

$$V_{nm} = \int_{-1/2}^{1/2} du P_n(u) \frac{d}{du} L_m(u) \quad (3.75)$$

on obtient alors

$$\int d^2\rho(\vec{P} \otimes \vec{L}_{P\theta 1}^T) = \Delta_2(V \otimes I_K) \quad (3.76)$$

$$\int d^2\rho(\vec{P} \otimes \vec{L}_{I\theta 2}^T) = \Delta_1(I_K \otimes V) \quad (3.77)$$

Les intégrales de types  $\int d^2\rho(\vec{P} \otimes \vec{L}_{P\theta 2}^T)$  et  $\int d^2\rho(\vec{P} \otimes \vec{L}_{I\theta 1}^T)$  ne sont jamais évaluées, puisque, de toute façon, le terme angulaire ( $Z_{r,\nu}$ ) qui les multiplie est supposé nul (voir section 3.2.3).

Il ne reste finalement qu'à évaluer les intégrales de lignes de la matrice  $Z_{r,\pm,\nu}$ . Elles sont de la forme  $\int d\rho(\vec{L}_{a,\pm,\nu} \otimes \vec{L}_{a,\pm,\nu})$  où  $L_a$  est soit  $L_I$  ou soit  $L_P$ . On a

$$\int d\rho(\vec{L}_{a,\pm,1} \otimes \vec{L}_{a,\pm,1}^T) = \Delta_2 \int_{-1/2}^{1/2} du_2 \vec{L}_a(\pm\frac{1}{2}, u_2) \vec{L}_a^T(\pm\frac{1}{2}, u_2)$$

$$\int d\rho(\vec{L}_{a,\pm,2} \otimes \vec{L}_{a,\pm,2}^T) = \Delta_1 \int_{-1/2}^{1/2} du_1 \vec{L}_a(u_1, \pm\frac{1}{2}) \vec{L}_a^T(u_1, \pm\frac{1}{2})$$

Ces intégrales contiennent un terme de Lagrange que l'on évalue à  $\pm 1/2$ . À cause de la forme des polynômes de Lagrange utilisés, ces termes sont nuls, sauf lorsque  $i = 0$  ou  $i = K$  (points de collocation sur une frontière), pour lesquels  $L_i(\pm 1/2) = 1$  (voir l'annexe C). Les polynômes de Legendre ne s'annulent cependant pas à  $\pm 1/2$ .

Les intégrales de lignes deviennent

$$\int d\rho(\vec{L}_{P,\pm,1} \otimes \vec{L}_{P,\pm,1}^T) = \Delta_2 I_K \otimes 1_K \quad (3.78)$$

$$\int d\rho(\vec{L}_{P,\pm,2} \otimes \vec{L}_{P,\pm,2}^T) = \Delta_1 P_{1/2} \otimes R \quad (3.79)$$

$$\int d\rho(\vec{L}_{I,\pm,1} \otimes \vec{L}_{I,\pm,1}^T) = \Delta_2 R \otimes P_{1/2} \quad (3.80)$$

$$\int d\rho(\vec{L}_{I,\pm,2} \otimes \vec{L}_{I,\pm,2}^T) = \Delta_1 1_K \otimes I_K \quad (3.81)$$

où  $1_K$  est une matrice carrée de dimension  $K \times K$  dont les éléments sont tous des 1,  $R$  est la matrice définie à l'équation (3.72), et

$$P_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} P_0\left(\frac{1}{2}\right)P_0\left(\frac{1}{2}\right) & P_0\left(\frac{1}{2}\right)P_1\left(\frac{1}{2}\right) \cdots \\ P_1\left(\frac{1}{2}\right)P_0\left(\frac{1}{2}\right) & P_1\left(\frac{1}{2}\right)P_1\left(\frac{1}{2}\right) \cdots \\ \vdots & \vdots \\ P_{K-1}\left(\frac{1}{2}\right)P_0\left(\frac{1}{2}\right) & P_{K-1}\left(\frac{1}{2}\right)P_1\left(\frac{1}{2}\right) \cdots \end{pmatrix} \quad (3.82)$$

La fonctionnelle (3.66) ne dépend plus que des coefficients  $\varphi_{i,m}^{i,j}$ . Ceux-ci sont les seuls inconnus du système, que l'on va résoudre au chapitre suivant en cherchant les points stationnaires de la "fonctionnelle".

## CHAPITRE 4

# ÉLÉMENTS FINIS

Dans ce chapitre, on montre que certaines restrictions doivent être imposées sur la représentation polynomiale des flux pour permettre des réflexions totales aux frontières ainsi que la continuité du flux impair. On exprime la fonctionnelle à l'aide de variables globales. On établit finalement le système d'équation à résoudre en cherchant les points stationnaires de la fonctionnelle.

### 4.1 Fonctionnelle locale

Avec la méthode des éléments finis [8], on divise le domaine en sous-domaines  $e = 1, N$  de dimension  $S_e$ , à l'intérieur desquels les sources et les sections efficaces sont supposées constantes en espace. On a vu (équation (2.4)) que la fonctionnelle s'écrivait alors comme une somme de fonctionnelles locales. Celles-ci s'expriment à l'aide de (3.66), soit:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_e[\varphi^+, \varphi^-] &= \sum_{\nu=1}^2 (\vec{\varphi}^+(e))^T Z_{e,r,\nu} \vec{\varphi}^-(e) \\
 &+ \frac{1}{2} (\vec{\varphi}^+(e))^T S_e I_{K^2} \otimes Z_{e,a}^+ \vec{\varphi}^+(e) \\
 &- \frac{1}{2} (\vec{\varphi}^-(e))^T Z_{e,r,a}^- \vec{\varphi}^-(e) \\
 &- (\vec{\varphi}^+(e))^T S_e I_{K^2} \otimes I_{d+} \vec{Q}^+(e) \\
 &+ (\vec{\varphi}^-(e))^T Z_{e,r}^- \vec{Q}^-(e) \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^2 (\vec{\varphi}^-(e))^T Z_{e,r,-,\nu} \vec{\varphi}^-(e) \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^2 (\vec{\varphi}^-(e))^T Z_{e,r,+,,\nu} \vec{\varphi}^-(e)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

où  $\vec{\varphi}^+(e)$ ,  $\vec{\varphi}^-(e)$ ,  $\vec{Q}^+(e)$  et  $\vec{Q}^-(e)$  sont les vecteurs formés des coefficients des expansions polynomiales des flux et des sources de l'élément  $e$ .

## 4.2 Continuité du flux impair

On utilise des polynômes de Lagrange afin d'assurer la continuité du flux impair puisque celle-ci ne fait pas partie des conditions naturelles de la fonctionnelle. Pour que le flux  $\varphi^-$  soit le même dans la zone  $e$  et dans la zone  $e'$  à l'interface de deux zones, il faut que

$$\vec{L}_+ \cdot \vec{\varphi}_{l,m}^-(e) = \vec{L}_- \cdot \vec{\varphi}_{l,m}^-(e') \quad (4.2)$$

pour tous les modes impairs de l'expansion en harmoniques sphériques.

On choisit les polynômes de Lagrange  $L$  de façon que seulement une composante de chaque vecteur de zone  $\vec{\varphi}^-(e)$  intervienne dans la relation (4.2):

$$L_j(-1/2, u_2) = \begin{cases} 1 & j = 0 \\ 0 & j > 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

$$L_j(1/2, u_2) = \begin{cases} 1 & j = K \\ 0 & j < K \end{cases} \quad (4.4)$$

L'équation (4.2) devient alors

$$\vec{\varphi}_{l,m}^{K,j}(e) = \vec{\varphi}_{l,m}^{0,j}(e') \quad (4.5)$$

Pour le cas linéaire ( $K = 1$ ), le choix des deux points de collocation est évident:  $u = \pm 1/2$ . Pour un ordre plus élevé, on doit évidemment choisir des points de collocation intermédiaires. Ces points sont choisis de façon à réduire le nombre de termes non nuls de la matrice  $R$  (3.72) et aussi pour que les termes hors diagonale de  $R$  soient anti-symétriques. Une description des polynômes de Lagrange ainsi modifiés se trouve à l'annexe C.

## 4.3 Réflexion totale

Puisque les conditions de réflexion ne font pas partie non plus des conditions naturelles de la fonctionnelle, on les impose en dépliant simplement la géométrie

autour de la frontière. Ceci revient à dupliquer les cellules de l'autre côté de la frontière, ce qui n'est possible cependant que s'il n'y a qu'une réflexion par direction  $\nu$ . Des réflexions sur deux surfaces dans une même direction nous obligeraient à déplier la géométrie une infinité de fois.

Puisque la composante paire du flux n'a jamais de points de collocation sur la frontière réfléctrice, on associe chaque composante de la géométrie dépliée à la composante qui est son image miroir dans la géométrie originelle. On doit toutefois tenir compte de la parité des harmoniques sphériques. Dans le cas d'une géométrie à une dimension, on a

$$\bar{\varphi}_{l,m}^j(z) = (-1)^m \bar{\varphi}_{l,m}^{K-j}(-z) \quad (4.6)$$

La relation précédente s'applique aussi aux composantes impaires du flux qui subissent une réflexion totale. Cependant le cas est légèrement différent, puisque les fonctions d'essai représentant les flux impairs ont des points de collocation sur les frontières. On doit donc s'assurer de ne pas déplier les composantes (points de collocation) se trouvant sur une frontière

$$\bar{\varphi}_{l,m}^i(e) = \bar{\varphi}_{l,m}^{K-i}(-e) \quad (4.7)$$

où l'élément  $-e$  correspond à la réflexion de l'élément  $e$ .

Le nombre total d'inconnus est toujours le même quel que soit le nombre de réflexions.

#### 4.4 Variables globales

On veut exprimer la fonctionnelle (4.1) en fonction des variables globales et non en fonction des variables locales  $\bar{\varphi}^+(e)$  et  $\bar{\varphi}^-(e)$  comme elle est énoncée présentement.

Le nombre de variables globales est évidemment inférieur à la somme des variables locales à cause de la continuité forcée de  $\varphi^-$  qui implique que certains inconnus du flux impair sont communs à deux éléments. En effet, si on désigne chaque

élément par deux variables  $(r, s)$  correspondant à sa position selon les axes  $z$  et  $x$ , on a pour  $l$  impair:

$$\begin{aligned}\varphi_{l,m}^{K,j}(r, s) &= \varphi_{l,m}^{1,j}(r + 1, s) \\ \varphi_{l,m}^{i,K}(r, s) &= \varphi_{l,m}^{i,1}(r, s + 1)\end{aligned}$$

où

$$1 \leq r \leq N_z$$

$$1 \leq s \leq N_x$$

et  $N_z, N_x$  sont les nombres d'éléments en  $z$  et en  $x$ . Certains inconnus sont donc dépendants.

On exprime la fonctionnelle à l'aide de variables globales en se servant de deux matrices de projection  $G^+(e)$  et  $G^-(e)$  de manière que

$$\vec{\varphi}^+(e) = G^+(e)\vec{\varphi}^+ \quad (4.8)$$

$$\vec{\varphi}^-(e) = G^-(e)\vec{\varphi}^- \quad (4.9)$$

La fonctionnelle s'écrit finalement

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[\varphi^+(e), \varphi^-(e)] &= (\vec{\varphi}^+)^T M_{+/-} \vec{\varphi}^- + \frac{1}{2}(\vec{\varphi}^+)^T M_a^+ \vec{\varphi}^+ - \frac{1}{2}(\vec{\varphi}^-)^T M_a^- \vec{\varphi}^- \\ &\quad - (\vec{\varphi}^+)^T M_q^+ \vec{Q}^+ + (\vec{\varphi}^-)^T M_q^- \vec{Q}^- \\ &\quad - \frac{1}{2}(\vec{\varphi}^-)^T M_\beta^- \vec{\varphi}^- - \frac{1}{2}(\vec{\varphi}^+)^T M_\beta^+ \vec{\varphi}^+\end{aligned} \quad (4.10)$$

où on a défini les matrices suivantes:

$$M_{+/-} = \sum_e \sum_{\nu=1}^2 (G^+(e))^T Z_{e,r,\nu} G^-(e) \quad (4.11)$$

$$M_a^+ = \sum_e (G^+(e))^T S_e I_{K^2} \otimes Z_{e,a}^+ G^+(e) \quad (4.12)$$

$$M_a^- = \sum_e (G^-(e))^T Z_{e,r,a}^- G^-(e) \quad (4.13)$$

$$M_q^+ = \sum_e (G^+(e))^T S_e I_{K^2} \otimes I_{d+} \quad (4.14)$$

$$M_q^- = \sum_e (G^-(e))^T Z_{e,r}^- \quad (4.15)$$

$$M_\beta^+ = \sum_e \sum_{\nu=1}^2 (G^-(e))^T Z_{e,r,+, \nu}^- G^-(e) \quad (4.16)$$

$$M_\beta^- = \sum_e \sum_{\nu=1}^2 (G^-(e))^T Z_{e,r,-, \nu}^- G^-(e) \quad (4.17)$$

#### 4.5 Points stationnaires

Les points stationnaires de la fonctionnelle (4.10) s'obtiennent en la dérivant par rapport à  $\varphi^+$  et à  $\varphi^-$ . Ils correspondent à un minimum par rapport à  $\varphi^+$  et à un maximum par rapport à  $\varphi^-$  [16]. On obtient les deux équations matricielles suivantes:

$$M_{+/-} \vec{\varphi}^- + M_\alpha^+ \vec{\varphi}^+ = M_q^+ \vec{Q}^+ \quad (4.18)$$

$$-(M_\alpha^- + M_\beta^- + M_\beta^+) \vec{\varphi}^- + \vec{\varphi}^+ M_\pm = -M_q^- \vec{Q}^- \quad (4.19)$$

Ce système est résolu à la fois pour  $\varphi^+$  et  $\varphi^-$  et ce, pour chaque groupe d'énergie.

## CHAPITRE 5

### PROGRAMME TRMXDL

Le programme TRMXDL (TRansport MiXte-DuaL) résout les équations  $NAS-P_N$  pour des géométries cartésiennes à une ou à deux dimensions. TRMXDL est construit de façon modulaire: lecture de la géométrie, assemblages des matrices systèmes et résolution du système matriciel. Même si TRMXDL n'a été programmé dans aucun environnement existant, sa modularité de même que le format de ses résultats intermédiaires rendent sa transformation éventuelle en modules TRIVAC [21] relativement simple.

#### 5.1 Aspects informatiques

TRMXDL est écrit en FORTRAN-77. Toutes les routines sont originales sauf celles permettant l'allocation dynamique de la mémoire, de même que celles rendant possibles la lecture et l'écriture de données sur un fichier de type XSM [21]. Les données d'entrée, de même que divers résultats, sont en effet sauvegardés numériquement sur un tel fichier. Ils deviennent ainsi accessibles par toutes les routines, tout en ne prenant aucun espace mémoire.

Les routines d'allocation dynamique de la mémoire et celles permettant d'utiliser un fichier XSM proviennent de la librairie Fortran GANLIB [22].

#### 5.2 Numérotation des inconnus

##### 5.2.1 Géométrie à une dimension

Étant donné le découplage entre les variables énergétiques, angulaires et spatiales, le nombre total d'inconnus est égal au produit du nombre de points de collo-

cation, par le nombre de modes angulaires, et par le nombre de groupes d'énergie. On doit cependant tenir compte du fait qu'il y a toujours un mode angulaire pair de plus que le nombre de modes impairs (ex.: ordre 4  $\rightarrow$  3 modes pairs (00,20,40) pour 2 modes impairs (10,30)). Rappelons également que l'expansion en polynômes de Lagrange de la composante impaire du flux est faite à un ordre supérieur à l'expansion en polynôme de Legendre de la composante paire du flux.

On associe  $K$  points de collocation à chaque élément pour une expansion à l'ordre  $K$  de la composante spatiale du flux pair. La position des points de collocation dans l'élément n'est guère importante puisque aucune continuité ne doit être forcée à l'interface des éléments. De plus, les intégrations spatiales sont effectuées analytiquement. Pour illustrer le fait que la continuité du flux pair aux interfaces ne doit pas être forcée, on ne "placera" aucun point de collocation à l'interface de deux éléments (figure 5.1). Le nombre total d'inconnus pour le flux pair, par mode et par groupe d'énergie est donc égal au produit du nombre d'éléments par  $K$ , l'ordre spatial.

À l'ordre  $K$ , on a  $K + 1$  points de collocation par élément, pour la composante impaire du flux. Cependant, l'utilisation de polynômes de Lagrange pour forcer la continuité du flux impair, implique que les inconnus sur les frontières seront communs à deux éléments. Le nombre total d'inconnus pour le flux impair, par mode et par groupe d'énergie, est donc égal à  $(NREG * K + 1)$ , où  $NREG$  est le nombre d'éléments.

Dans TRMXDL, le flux est représenté par un vecteur unique comprenant à la fois les inconnus correspondant à la composante paire du flux et ceux correspondant à la composante impaire. Les inconnus sont numérotés premièrement par groupe d'énergie, puis par région, ensuite par mode spatial et finalement par mode angulaire.

La figure 5.1 illustre premièrement la numérotation locale adoptée pour chacune des deux parités du flux et pour une expansion spatiale à l'ordre 3, lorsqu'il

n'y a qu'un seul groupe d'énergie. La numérotation globale pour chacun des groupes d'énergie est aussi illustrée à la figure 5.1 dans le cas  $P_2$ . Notons que la numérotation des inconnus n'est pas critique pour des géométries à une dimension; la minimisation de la largeur de la diagonale de la matrice système est en effet réalisée dès que la numérotation est effectuée en respectant l'ordre séquentiel des éléments.

### 5.2.2 Géométrie à deux dimensions

En deux dimensions, il n'y a toujours pas de points de collocation sur les frontières dans le cas de la composante paire du flux, puisqu'elle est représentée par un produit de polynômes de Legendre. Le nombre total d'inconnus servant à représenter le flux pair est égal à  $K^2$ , multiplié par le nombre d'éléments, par le nombre de modes angulaires pairs et par le nombre de groupes d'énergie. Les points de collocation sont montrés à la figure 5.2, pour un cas  $P_2$  à une seule région, en utilisant un ordre spatial quadratique.

Pour la composante impaire du flux, les points de collocation ne sont pas les mêmes pour tous les modes. On a vu, à la section 3.2.3, que la continuité de  $\varphi^-$  dans la direction  $u_1$  ne devait être forcée que pour les modes  $m$  pairs. On utilise alors des polynômes de Lagrange en  $u_1$  et des polynômes de Legendre en  $u_2$ . Les points de collocation sont montrés à la figure 5.3, pour un cas  $P_2$  à une seule région (numérotation locale), en utilisant un ordre spatial quadratique.

La numérotation globale en 2 dimensions est faite en balayant la géométrie de gauche à droite, puis de bas en haut. Comme pour les cas à une dimension, les inconnus sont numérotés premièrement par groupe d'énergie, puis par mode spatial et finalement par mode angulaire.

La numérotation globale, pour une géométrie comportant 4 régions, est illustrée aux figures 5.4 et 5.5. À cause du manque d'espace, les deux parités du flux (pair et impair) sont montrées séparément, même si, comme en une dimension, les deux

composantes font partie du même vecteur.

### 5.2.3 Couplage entre les flux impairs

Les polynômes de Lagrange utilisés ont été choisis de façon qu'il n'y ait aucun couplage sauf entre le premier et le dernier terme ( $L_0$  et  $L_K$ ). Ces deux termes correspondent à des points de collocation situés sur une frontière entre deux éléments. Les inconnus servant à représenter le flux impair peuvent donc être séparés en deux groupes indépendants: inconnus sur une frontière et inconnus non sur une frontière. Il serait donc possible d'éliminer, par exemple, les inconnus qui ne touchent pas à une frontière, ceux-ci étant linéairement indépendants des autres inconnus impairs. Cependant, ceci nécessiterait l'inversion partielle de la matrice  $M_{+/-}$ , ce qui serait aussi coûteux en temps de calcul que de résoudre pour l'ensemble des inconnus de la composante impaire du flux. Pour cette raison, TRMXDL ne fait aucune distinction entre les inconnus de la composante impaire.

## 5.3 Assemblage des matrices

### 5.3.1 Matrices locales

Les diverses matrices de couplages spatiaux et angulaires sont premièrement assemblées selon l'ordre des expansions choisi.

Les matrices  $Z_{\tau,\nu}$ ,  $Z_{\tau,\pm,\nu}$  et  $Z_{\tau,-}$  sont ensuite assemblées localement, c'est-à-dire en ne considérant qu'un élément. On suppose alors un élément de surface unitaire. Chacun des termes des matrices sera multiplié par la surface de l'élément (ou la longueur de l'élément dans le cas des intégrales de ligne) lors de l'assemblage global.

L'avantage de procéder de cette façon est qu'il sera possible de modifier la numérotation globale, sans avoir à réévaluer toutes les intégrales. Le fait d'évaluer indépendamment les intégrales angulaires et spatiales permet également d'expérimenter avec le choix des polynômes sans avoir à tout reprogrammer. On note

toutefois que la numérotation est dépendante du type de polynôme utilisé pour représenter la composante spatiale du flux.

### 5.3.2 Matrices globales

Cinq matrices globales sont ensuite assemblées en projetant les matrices  $Z_{\tau,\nu}$ ,  $Z_{\tau,\pm,\nu}$  et  $Z_{\tau,-,\nu}$ , construites pour un élément, sur cinq vecteurs  $G$ , ce qui permet ainsi de passer de la numérotation locale à la numérotation globale. Les cinq matrices correspondent aux couplages entre les inconnus de la composante paire du flux, ceux correspondant à la composante impaire dont la contribution est nulle entre les éléments, et ceux dont la contribution est non nulle. La matrice système est finalement construite à partir de ces cinq matrices.

### 5.3.3 Traitement des réflexions

L'assemblage de la matrice système est dictée directement par les équations (4.18) et (4.19). Les conditions de vide aux frontières sont traitées explicitement dans l'équation (4.19). On a cependant vu que la fonctionnelle ne permettait pas de traiter explicitement les conditions de réflexion.

On reproduit donc artificiellement les conditions de réflexion en dépliant la géométrie d'un côté à l'autre des frontières réflectives. Ceci se fait en additionnant ou en soustrayant chacun des termes de la matrice système pour chacune des réflexions. Les termes sont additionnés ou soustraits, selon la parité des modes angulaires réfléchis.

Puisque chaque inconnu pair n'est couplé qu'avec lui-même, chaque terme couplant des éléments pairs entre eux est simplement multiplié par le nombre de réflexions (+1 pour la géométrie originelle). On doit toutefois tenir compte de la parité des harmoniques sphériques pour tous les autres termes de couplage.

Lors de l'assemblage des matrices de projection de la numérotation locale à globale, on doit également tenir compte que les inconnus impairs sont symétriques

autour de l'origine 0 (à l'ordre 3 par exemple,  $L_0(-u) = L_2(u)$ ), alors que les polynômes de Legendre ne le sont pas.

Ajoutons finalement que, puisque les conditions de réflexions sont traitées par dépliage de la géométrie, il est impossible avec TRMXDL de résoudre des problèmes avec réflexions des deux côtés d'une même direction.

#### 5.4 Résolution du système matriciel

On résout les équations multigroupes à l'aide de l'algorithme suivant:

1. Calcul des sources fixes.

Les caractéristiques des sources fixes (s'il y en a) sont lues sur la géométrie et sont affectées à chaque élément.

2. Calcul des sources paires (sources fixes et sources de fission).

Les sources de fission sont constituées de la somme, sur tous les groupes d'énergie et sur tous les isotopes fissiles, du produit des composantes paires du flux, par  $\nu\Sigma_f$ . On calcule aussi la valeur propre de l'équation, soit  $k_{eff}$ . Cette valeur est donnée par la relation suivante:

$$k_{eff} = \frac{\sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^{NFISS} \sum_{r=1}^{NREG} \varphi^+(r, g) \nu \Sigma_f(r, g, i)}{\sum_{g=1}^G \sum_{r=1}^{NREG} \varphi^+(r, g) (\Sigma(r, g) - \Sigma_{s0}(r, g))} \quad (5.1)$$

où  $G$  est le nombre de groupes d'énergie,  $NFISS$ , le nombre d'isotopes fissiles et  $NREG$ , le nombre d'éléments.

3. Résolution des équations pour chaque groupe d'énergie.

Les sources de diffusion entre les groupes sont calculées et ajoutées aux sources fixes et aux sources de fission. Elles s'obtiennent par produit des flux de groupes (pairs et impairs) et des sections efficaces de diffusion. Le système matriciel est résolu pour chacun des groupes. Des itérations sont faites jusqu'à convergence de tous les groupes.

On résout les équations par décomposition LU, à l'aide d'une routine de la librairie GANLIB. La matrice système a préalablement été compressée (élimination des zéros de part et d'autre de la diagonale), avant d'être soumise à la routine de résolution.

On résout simultanément pour les deux parités du flux. Une tentative de résolution par itération alternative entre les deux composantes a été faite. La convergence était alors beaucoup trop lente et la méthode fut abandonnée.

#### 4. Calcul des flux de cellules.

#### 5. Calcul des sources paires et vérification de la convergence.

Les étapes 2, 3 et 4 sont reprises jusqu'à convergence ou jusqu'à ce que le nombre maximum d'itérations soit atteint.

## CHAPITRE 6

# RÉSULTATS NUMÉRIQUES ET COMPARAISONS

Des calculs sont faits avec TRMXDL sur des géométries à une ou à deux dimensions. Tous les cas simulés, sauf un, sont issus de la littérature.

Les diverses comparaisons avec des résultats connus permettent premièrement de vérifier le bon fonctionnement du programme. Les divers tests sont choisis de façon à couvrir toutes les possibilités de calcul de TRMXDL: sources fixes et/ou de fission, réflexion ou vide aux frontières, anisotropie de diffusion, etc.

Les différents tests permettent également de comparer la précision de la méthode. On cherche, entre autres, à vérifier la validité de l'approche  $NASP_N$ .

### 6.1 Géométrie à une dimension

#### 6.1.1 Cas à 1 groupe d'énergie, avec source de fission

Les premières géométries analysées se trouvent à la figure 6.1. Elles consistent en deux régions contenant un matériau fissile et entourées ou non d'un matériau non fissile, selon la géométrie. Les propriétés physiques des matériaux sont données au tableau 6.1. En simulant premièrement les géométries complètes (1D-A et 1D-C), puis en appliquant une réflexion sur l'une des deux frontières (1D-B et 1D-D), on vérifie que le traitement des réflexions est correct.

Les valeurs propres ( $k_{eff}$ ) obtenues en utilisant différents ordres spatiaux et angulaires sont données au tableau 6.2. On note premièrement que les résultats obtenus à l'aide d'une réflexion sont identiques à ceux obtenus en utilisant la géométrie complète. On remarque également que la convergence est plus rapide en espace qu'en angle (les valeurs P6-linéaire sont plus près des valeurs P6-cubique

que ne le sont les valeurs P2-cubique). La convergence est plus rapide pour les géométries C et D que pour les deux autres géométries, où il y a plus d'absorption.

Des comparaisons ont été faites avec les résultats obtenus en utilisant le programme TRNODL [12]. Les deux solutions semblent converger vers une même valeur lorsqu'on augmente l'ordre des expansions polynomiales. L'écart pour les géométries A et B n'est que de 1 mk entre les solutions P6-cubique de TRMXDL et P7-cubique de TRNODL. Le même écart n'est que de 0.3 mk pour les géométries C et D.

On remarque que les valeurs de  $k_{eff}$  de TRNODL convergent lorsqu'on augmente l'ordre angulaire. Tel que prédit par Kaplan et Davis [16], la direction de la convergence est donc opposée à celle de TRMXDL. TRNODL est en effet construit à partir d'une fonctionnelle dont le point stationnaire correspond à un maximum par rapport à  $\varphi^+$  (et  $k_{eff}$ ). Le point stationnaire de la fonctionnelle mixte-duale correspond plutôt à un minimum par rapport à  $\varphi^+$ . Les solutions obtenues par les deux méthodes encadrent la solution convergée. On peut donc imaginer un nouvelle méthode basée sur la résolution de chacune des fonctionnelles en utilisant un ordre peu élevé pour l'expansion angulaire en harmoniques sphériques; la solution s'obtiendrait par une moyenne pondérée des deux solutions.

L'écart entre la solution obtenue à partir d'un calcul de diffusion fait avec BIVAC [21] et celle de TRMXDL est de 10 mk pour les géométries C et D. L'écart double dans le cas des deux autres géométries. Il est normal que les écarts augmentent entre BIVAC et TRMXDL (et TRNODL) lorsqu'il y a beaucoup d'absorption, puisque la loi de Fick, caractérisant la théorie de la diffusion, n'est alors plus valable.

### 6.1.2 Cas à 1 groupe d'énergie, source de fission et diffusion anisotrope

Le deuxième test de comparaison consiste à analyser la géométrie montrée à la figure 6.2. Ce problème, à un groupe d'énergie et avec diffusion anisotrope,

provient de Riyait [23]. On vérifie le traitement de l'anisotropie dans TRMXDL en utilisant premièrement une section efficace de diffusion  $\Sigma_{s1}$ , puis en résolvant pour le cas isotrope où  $\Sigma^i = \Sigma - \Sigma_{s1}$ ,  $\Sigma_{s0}^i = \Sigma_{s0} - \Sigma_{s1}$  et  $\Sigma_{s1}^i = 0.0 \text{ cm}^{-1}$ . Les sections efficaces se trouvent au tableau 6.3.

On présente au tableau 6.4 les valeurs de  $k_{eff}$  obtenues pour différents ordres angulaires et pour différentes discrétilisations spatiales. On a ainsi utilisé premièrement, un maillage uniforme de 0.5 cm avec des polynômes linéaires (L5) et cubiques (C5), puis un maillage uniforme de 0.25 cm, (L25) et (C25). Finalement, la résolution du problème a été faite en utilisant le maillage non-uniforme de la figure 6.2 (CN).

On remarque premièrement que les résultats sont les mêmes que l'on traite l'anisotropie explicitement ou implicitement, ce qui démontre que le traitement de l'anisotropie dans TRMXDL est correct.

Comme on l'avait remarqué avec les géométries précédentes (1D-A,B,C et D), la convergence spatiale est plus rapide que la convergence angulaire. De plus, on ne remarque aucun écart entre les solutions C25 et C5, ce qui montre que la solution C5 est convergée spatialement. L'augmentation de l'ordre de l'expansion angulaire en harmoniques sphériques nous rapproche de la valeur obtenue par Roy [24] et de celle obtenue avec ANISN [25].

On observe un écart de 2 mk entre le  $k_{eff}$  obtenu à un ordre  $P_6$  (C25) et la valeur 1.5774 obtenue avec ANISN ( $P_{15}$  et  $S_{16}$ ) et celle de 1.5772 obtenue par Roy avec INTPN.

## 6.2 Géométrie à deux dimensions

### 6.2.1 Problème de Fletcher

Le premier problème à deux dimensions provient de Fletcher [9]. La géométrie consiste en une région carrée où  $0.0 \leq x, y \leq 4.0 \text{ cm}$ , dans laquelle se trouve une

source fixe en  $0.0 \leq x, y \leq 1.2 \text{ cm}$ . Les plans où  $x, y = 0.0$  sont réflectifs tandis que des conditions de vide sont appliquées sur les deux autres plans. Les sections efficaces totale et de diffusion sont uniformes sur la région:  $\Sigma = 1.0 \text{ cm}^{-1}$  et  $\Sigma_{s,k} = 0.0 \text{ cm}^{-1}$ . La densité de la source fixe est de  $1.0/1.44 \text{ cm}^{-3}$ . Les calculs sont effectués en utilisant un maillage de  $0.16 \text{ cm}^2$  et des polynômes spatiaux linéaires. Les flux à  $x = y$  pour différents ordres angulaires sont donnés au tableau 6.5.

Étant donné qu'en utilisant des polynômes linéaires on obtient des flux plats dans les éléments, les flux en  $x = y$  sont obtenus en moyennant le flux des régions voisines du point d'intérêt. Cela peut expliquer en partie les écarts observés avec les résultats de Fletcher. On suppose par exemple que le flux en  $x = y = 0.0 \text{ cm}$  est le même qu'en  $x = y = 0.2 \text{ cm}$ , alors qu'il est évident qu'il est plus élevé. Des polynômes linéaires ne devraient être utilisés avec TRMXDL que pour évaluer des flux de cellules (flux moyens sur des éléments).

L'écart avec Fletcher est minimal à  $x = y = 1.2 \text{ cm}$ , soit à l'interface des deux matériaux. Les écarts relatifs augmentent lorsqu'on s'éloigne de la source. Les écarts peuvent s'expliquer, en partie, par la discrétisation spatiale relativement grossière que nous ont imposée les ressources informatiques disponibles.

De plus, dépassé  $x, y = 1.2 \text{ cm}$ , le milieu est purement absorbant et le flux diminue alors très rapidement. Rappelons qu'avec l'approche  $NASP_N$ , certaines directions sont privilégiées lors du calcul du couplage entre  $\varphi^+$  et  $\varphi^-$ . On doit ainsi s'attendre à avoir de moins bons résultats loin des sources, pour des directions entre les axes principaux ( $x = 0 \text{ cm}^{-1}$  et  $y = 0 \text{ cm}^{-1}$ ).

### 6.2.2 Problème de Tomašević

Ce problème aux valeurs propres a été suggéré par Tomašević et Larsen [15]. La géométrie est constituée encore ici d'une région carrée avec  $0.0 \leq x, y \leq 4.0 \text{ cm}$ . Des conditions de vide sont appliquées aux frontières du haut et de droite et des réflexions sont appliquées sur les deux autres frontières. La région centrale, à

$0.0 \leq x, y \leq 1.2$  cm, contient le matériau 1, caractérisé par les sections efficaces suivantes:  $\Sigma = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\Sigma_s = 0.9 \text{ cm}^{-1}$  et  $\nu\Sigma_f = 0.2 \text{ cm}^{-1}$ . Le matériau 2, dans la zone extérieure, est caractérisé par la même section efficace totale, par  $\nu\Sigma_f = 0$  et par  $\Sigma_s = c\Sigma$ .

Le tableau 6.6 contient les écarts relatifs entre les  $k_{eff}$  obtenus avec TRMXDL, en utilisant différents ordres spatiaux et angulaires, et ceux obtenus par une méthode  $S_n$  d'ordre 8 [15]. Des carrés de surface de  $1.0 \text{ cm}^2$  ont été utilisés pour le maillage.

On remarque premièrement que, peu importe l'ordre angulaire utilisé, les écarts avec les  $k_{eff}$  de référence ( $S_8$ ) sont toujours inférieurs à ceux obtenus en utilisant une méthode  $P_1$ . Les écarts pour le cas  $NASP_2$  avec expansion spatiale linéaire sont aussi moins élevés que par la méthode  $SP_2$ .

L'augmentation des écarts avec l'ordre angulaire est attribuable à l'approximation définissant la méthode  $NASP_n$ . Rappelons qu'elle consiste à négliger certains termes de couplage de la matrice  $Z_v$  (tableau 3.1), de façon à ne devoir forcer la continuité du flux impair que dans une seule direction à la fois (voir section 3.2.3). À l'ordre  $P_2$ , 7 termes sur 20 (35%) sont négligés dans la matrice  $Z_v$ . En augmentant l'ordre angulaire, l'approximation  $NASP_n$  devient plus importante. Par exemple, 38% des termes sont négligés à l'ordre 4. L'augmentation de l'ordre spatial produit également une augmentation des écarts relatifs avec le calcul  $S_8$ , ce qui était prévisible puisque la discrétisation spatiale dépend du mode de l'expansion en harmoniques sphériques des composantes angulaires.

Curieusement, seule l'expansion  $P_2$  montre une augmentation (en absolu) des écarts lorsque  $c$  augmente. On conclut donc que lorsqu'il y a beaucoup d'absorption, TRMXDL donne de meilleurs résultats en 2 dimensions avec des expansions angulaires faibles. Les résultats sont meilleurs lorsqu'il y a peu d'absorption pour des expansions d'ordre élevé.

### 6.2.3 Problème anisotropique de Tomašević

On reprend le problème précédent, mais cette fois avec de la diffusion anisotrope. On a  $\Sigma_{s0} = c\Sigma$  et  $\Sigma_{s1} = \frac{1}{2}c\Sigma$  pour le matériau 2. Les écarts avec les résultats provenant de INTPN [24] se trouvent au tableau 6.7 pour les mêmes valeurs de  $c$  que dans le problème précédent. Les maillages suivants sont utilisés de manière à rendre les résultats comparables: carrés de  $0.0625 \text{ cm}^2$  pour INTPN, et pour TRMXDL, des carrés de  $1.0 \text{ cm}^2$  dans lesquels on utilise une expansion spatiale cubique.

Les résultats sont comparables à ceux obtenus au problème précédent, où la diffusion était isotrope. Les écarts avec les valeurs de référence (INTPN) sont légèrement plus élevés. La sensibilité des écarts à la valeur de  $c$  est cependant moins grande.

## CONCLUSION

Les résultats présentés au chapitre précédent démontrent la validité de l'utilisation d'un principe variationnel basé sur la fonctionnelle mixte-duale, pour résoudre l'équation de transport neutronique, sur des géométries cartésiennes complexes à une et à deux dimensions.

L'emploi de la méthode des éléments finis nous permet d'obtenir de bons résultats sans qu'on ait à faire un découpage très fin des géométries à analyser. L'utilisation d'harmoniques sphériques pour représenter la composante angulaire du flux permet de diminuer le couplage entre les différents modes angulaires; il en résulte des matrices moins denses. De plus, cela n'introduit pas d'effets de rayons.

Pour représenter la composante spatiale du flux impair, l'utilisation de polynômes de Lagrange modifiés permet de découpler les termes n'ayant aucune contribution sur les frontières des éléments et ceux ayant une contribution non nulle. De façon à économiser l'espace mémoire, cette manière de procéder pourrait servir à diminuer le nombre d'inconnus, au prix toutefois de l'augmentation du temps de calcul (il serait, en effet, nécessaire d'inverser certaines matrices). Le recours aux polynômes de Legendre permet, en plus de diminuer le couplage entre les différents ordres spatiaux, d'avoir directement les flux intégrés sur les éléments parmi les inconnus du système.

La comparaison des résultats d'application obtenus avec TRMXDL, avec des résultats provenant d'autres méthodes, montre le bon fonctionnement du programme dans la résolution de problèmes variés: sources fixes et/ou sources de fissions, réflexion ou vide aux frontières et diffusion isotrope ou anisotrope. La méthode ne permet cependant pas de résoudre de problèmes où il n'y a pas d'absorption ( $\Sigma = \Sigma_s$ ), pas plus que les problèmes avec des zones vides, évidemment.

Les résultats, pour des géométries à deux dimensions, sont meilleurs lorsque l'expansion en harmoniques sphériques est d'ordre faible. Ceci s'explique par le fait que certains termes de couplage entre les composantes paire et impaire sont négligés. La méthode résultante, que l'on a baptisée  $NASP_N$ , se situe entre les méthodes  $P_N$  et  $SP_N$ , quant à l'approximation faite. Puisque les modes spatiaux dépendent des modes angulaires, on obtient également de meilleurs résultats lorsque l'ordre spatial est faible. L'approximation  $NASP_2$  semble donner de meilleurs résultats que l'approximation  $SP_2$ . Paradoxalement, pour une expansion en harmoniques sphériques d'ordre 2, les résultats sont meilleurs lorsque la diffusion est faible par rapport à l'absorption.

La méthode  $NASP_2$  constitue une alternative valable aux calculs de diffusion pour des géométries à une et à deux dimensions. En utilisant des polynômes linéaires, le nombre d'inconnus par région est relativement faible et l'effort de calcul devrait être du même ordre que pour les calculs de diffusion. La méthode  $NASP_2$  permet d'aller chercher une partie de la correction de transport. De plus, la méthode semble performante justement là où les calculs de diffusion ne sont plus valides, soit lorsqu'il y a peu de diffusion.

Certaines améliorations pourraient être apportées à TRMXDL. Ainsi, puisque la continuité de la composante impaire du flux n'est forcée que dans une seule direction à la fois (selon que la valeur  $m$  du mode  $l, m$  de l'expansion en harmoniques sphériques est paire ou impaire), il pourrait être envisageable d'utiliser une méthode ADI pour résoudre le système matriciel. Les itérations se feraient alors en alternant entre les modes impairs dont  $m$  est pair et ceux dont  $m$  est impair et en résolvant chaque fois pour le flux pair. On pourrait ainsi augmenter la vitesse de convergence de la méthode. La compatibilité du système avec une méthode ADI reste cependant à vérifier.

Tel que prévu, la convergence angulaire de TRMXDL est de direction opposée à celle de TRNODL, puisque le flux correspond à un minimum par rapport à la

fonctionnelle mixte-duale et à un maximum par rapport à la fonctionnelle de second ordre de parité paire (TRNODL). On peut donc imaginer une méthode de résolution de l'équation de transport basée sur la recherche des points stationnaires de chacune des deux fonctionnelles en utilisant un ordre angulaire faible. La solution s'obtiendrait par une moyenne pondérée des deux résultats. Il faudrait cependant étudier la convergence de chacune des méthodes, de manière à en déduire la pondération permettant d'obtenir la solution la plus juste possible.

Finalement, il serait intéressant que TRMXDL puisse résoudre des problèmes à trois dimensions. Il n'y aurait aucun problème au niveau de la fonctionnelle, puisque nous avons déjà montré sa validité en trois dimensions. On devrait cependant reconsidérer l'utilisation d'un produit de polynômes de Legendre et de Lagrange pour représenter la composante spatiale du flux impair. Cette représentation est reliée à l'approximation  $NASP_N$ , et il est loin d'être évident qu'elle soit valide en trois dimensions, même à l'ordre  $P_2$ . La programmation de la méthode en trois dimensions devrait alors être repensée depuis l'étape de la numérotation des inconnus jusqu'à celle de la résolution du système matriciel.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] ASKEW, J.R. (1972). Review of the status of collision probability methods. *Proc. Sem. Numerical Reactor Calculations*, International Atomic Energy, Vienne, 185-196.
- [2] EMENDORFER, D. (1974). Physics assumptions and applications of collision probability methods. *Proc. ANS conf. Mathematical Models and Computational Techniques for Analysis of Reactor Systems*, Ann Arbor, Mich. CONF-730414-P2, U.S. Atomic Energy Commission.
- [3] KAVENOKY, A. (1981). Status of integral transport theory. *Proc. ANS/ENS Int. Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems*, Munich, Germany, April 27-29, European Nuclear Society.
- [4] CARLSON, B.G., LATHROP, K.D. (1963). Transport theory - The method of discrete ordinates. *Methods in Computational Physics*, Vol. 1, Academic Press, New York.
- [5] HENRY, A. F. (1975). *Nuclear reactor analysis*. MIT Press, Cambridge.
- [6] MARSCHAK, R. (1947). Note on the spherical-harmonics method as applied to the Milne problem. *Nucl. Sci. Eng.*, 71, 443.
- [7] DAVISON, B. (1957). *Neutron theory transport*. Oxford University Press, London.
- [8] SABONADIÈRE, J.C., COULOMB, J.L. (1986). *La méthode des éléments finis*. Hermès, Paris.

- [9] FLETCHER, J.K. (1983). The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. *Nucl. Sci. Eng.*, 84, 33.
- [10] DeOLIVEIRA, C.R.E. (1986). An arbitrary geometry finite element method for multigroup neutron transport with scattering. *Progress in Nuclear Energy*, 18, 227.
- [11] PALMIOTTI, G., CARRICO, C.B., LEWIS, E.E. (1993). Variational nodal transport methods with anisotropic scattering. *Nucl. Sci. Eng.*, 115, 233.
- [12] MARLEAU, G., RULKO, R., ROY, R., HÉBERT, A. (1996). *Finite element solution for the even-parity transport equation with spherical harmonic expansions*. IGE-214, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [13] HÉBERT, A. (1993). Application of a dual variational formulation to finite element reactor calculations. *Ann. Nucl. Energy*, Vol. 20, No 12, 823-845.
- [14] FEDON-MAGNAUD, C., LAUTARD, J. J., AKHERRAZ, B., WU, G.J. (1995). Coarse mesh methods for the transport calculation in the cronos reactor code. *Proc. ANS Int. Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses*, Portland, Oregon, April 30-May 4, American Nuclear Society.
- [15] TOMAŠEVIĆ, D., LARSEN, E. W. (1992). The simplified P2 correction to the multidimensional diffusion equation. *Deterministic Methods in Neutral and Charged-Particle transport*, 232-234.
- [16] KAPLAN, S., DAVIS, J. A. (1967). Canonical and involutory transformations of the variational problems of transport theory. *Nucl. Sci. Eng.*, 28, 166-176.

- [17] VLADIMIROV, V. S. (1963). *Mathematical problems in the one-velocity theory of particle transport*. Atomic Energy of Canada Limited, Ontario; traduit de *Trans. V. A. Steklov Mathematical Institute*, 61 (1961).
- [18] MARGENEAU, H., MURPHY, G.M. (1956). *The mathematics of physics and chemistry*. D. Van Nostrand Company, London.
- [19] DAVIS, J. A. (1966). Variational vacuum boundary conditions for a PN approximations. *Nucl. Sci. Eng.*, 25, 189-197.
- [20] LEWIS, E.E., MILLER, W. F., Jr. (1984). *Computational methods of neutron transport*. John Wiley & Sons.
- [21] HÉBERT, A. (1994). *A User's guide for TRIVAC-3*. IGE-161, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [22] HÉBERT, A., ROY, R. (1994). *A Programmer's guide for the GAN generalized driver - FORTRAN-77 version*. IGE-158, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal.
- [23] RIYAIT, N.S., ACKROYD, R. T. (1987). The finite-element method for multi-group neutron transport: anisotropic scattering in 1-D slab geometry. *Ann. Nucl. Energy*, 14, 113.
- [24] ROY, R. (1990). Anisotropic scattering for integral transport codes. Part 1. Slab assemblies. *Ann. Nucl. Energy*, 17, 379.
- [25] ENGLE, W. W. (1967). *A user's manual for ANISN, a one-dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering*. Report K-1693, Union Carbide, Oak Ridge.

Tableau 3.1: Continuité de la dérivée: matrice  $Z_\nu$  (cas  $P_4$ )

	1	3	5
(0,0)	z x	0 0 0 0	0 0 0 0 0 0
(2,0)	z x	z x 0 0	0 0 0 0 0 0
(2,1)	x z	x z x 0	0 0 0 0 0 0
(2,2)	0 x	0 x z x	0 0 0 0 0 0
(4,0)	0 0	z x 0 0	z x 0 0 0 0
(4,1)	0 0	x z x 0	x z x 0 0 0
(4,2)	0 0	0 x z x	0 x z x 0 0
(4,3)	0 0	0 0 x z	0 0 x z x 0
(4,4)	0 0	0 0 0 x	0 0 0 x z x

1. z: terme non nul pour la dérivée en z

2. x: terme non nul pour la dérivée en x

Tableau 6.1: Propriétés physiques pour les géométries 1D-A,B,C et D

Matériau	$\Sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\Sigma_{s0}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\nu\Sigma_f$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
1	1.00	0.50	0.50
2	0.50	0.45	0.00

Tableau 6.2: Résultats ( $k_{eff}$ ) pour les géométries 1D-A,B,C,D

Géométrie		linéaire	quadratique	cubique
1D-A,B	P2	0.823009	0.828915	0.829238
	P4	0.816618	0.823098	0.823433
	P6	0.815971	0.822258	0.822254
	TRNODL P3	0.802145	0.820541	0.820813
	TRNODL P5	0.802537	0.821011	0.821398
	TRNODL P7	0.802569	0.821056	0.821487
	BIVAC	0.8000		
1D-C,D	P2	0.869266	0.870621	0.870748
	P4	0.867649	0.868826	0.868954
	P6	0.867588	0.868626	0.868747
	TRNODL P3	0.858035	0.868068	0.868168
	TRNODL P5	0.858273	0.868254	0.868408
	TRNODL P7	0.858282	0.868262	0.868442
	BIVAC	0.8583		

Tableau 6.3: Propriétés physiques pour la géométrie 1D-RIY

Matériaux	$\Sigma$ ( $cm^{-1}$ )	$\Sigma_{s0}$ ( $cm^{-1}$ )	$\Sigma_{s1}$ ( $cm^{-1}$ )	$\nu \Sigma_f$ ( $cm^{-1}$ )
1	1.00	0.50	0.5000	1.0
2	1.20	0.60	0.1200	0.3
3	1.25	0.75	0.1125	0.0

Tableau 6.4: Résultats ( $k_{eff}$ ) pour la géométrie 1D-RIY

Géométrie	P2	P4	P6
L5	1.59816	1.58356	1.58151
C5	1.59694	1.58185	1.57950
L25	1.59724	1.58228	1.58001
C25	1.59694	1.58185	1.57951
CN	1.59694	1.58186	1.57951

Tableau 6.5: Flux ( $cm^{-2}$ ) à  $x = y$  pour le problème de Fletcher

Position $x = y$ (cm)	P2	P4	P6	Fletcher
0.0	0.537286	0.542688	0.546037	0.568331
0.4	0.516591	0.514863	0.517000	0.544784
0.8	0.450909	0.422399	0.414328	0.453374
1.2	0.164979	0.165957	0.165923	0.166535
1.6	0.017658	0.026745	0.029630	0.035268
2.0	0.006673	0.008540	0.008491	0.013791
2.4	0.002534	0.002828	0.002591	0.005767
2.8	0.000964	0.000955	0.000829	0.002538
3.2	0.000364	0.000318	0.000270	0.001162
3.6	0.000111	0.000099	0.000080	0.000548
4.0	0.000035	0.000044	0.000030	0.000264

Tableau 6.6: Résultats pour le problème de Tomašević

c	$k_{eff}$	Erreur relative (%)							
					linéaire			cubique	
		$S_8$	$P_1$	$SP_2$	$P_2$	$P_4$	$P_6$	$P_2$	$P_4$
0.99	0.92135	-4.63	0.62	-0.91	-1.45	-1.53	-1.31	-1.90	-2.00
0.95	0.86663	-5.34	1.10	-0.92	-1.59	-1.66	-1.35	-2.10	-2.21
0.90	0.82022	-6.21	1.62	-0.86	-1.72	-1.81	-1.34	-2.32	-2.46
0.85	0.78763	-6.99	2.07	-0.76	-1.83	-1.94	-1.31	-2.52	-2.69
0.80	0.76331	-7.68	2.46	-0.66	-1.91	-2.04	-1.26	-2.68	-2.89
0.70	0.72907	-8.83	3.13	-0.44	-2.01	-2.17	-1.16	-2.96	-3.22
0.60	0.70581	-9.75	3.69	-0.22	-2.06	-2.25	-1.06	-3.16	-3.49

1. Les résultats  $P_1$  proviennent de la référence [15].

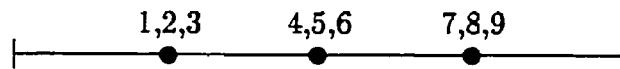
Tableau 6.7: Résultats pour le problème de Tomašević avec anisotropie

c	$k_{eff}$	Erreur relative (%)		
		INTPN	$P_2$	$P_4$
0.99	0.76864	-1.34	-2.27	-2.42
0.95	0.74210	-1.35	-2.36	-2.51
0.90	0.71862	-1.31	-2.47	-2.62
0.85	0.70181	-1.25	-2.56	-2.73
0.80	0.68925	-1.17	-2.63	-2.83
0.70	0.67195	-0.99	-2.74	-2.99
0.60	0.66077	-0.79	-2.81	-3.10

### Numérotation locale

( $P4$ , ordre spatial cubique)

Composante paire du flux

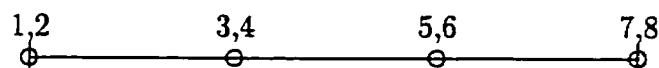


1,4,7: mode 0, 0

2,5,8: mode 2, 0

3,6,9: mode 4, 0

Composante impaire du flux



1,3,5,7: mode 1, 0

2,4,6,8: mode 3, 0

### Numérotation globale

(3 régions,  $P2$ , ordre spatial quadratique)

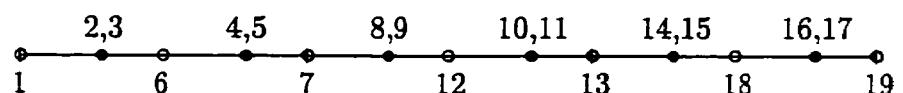
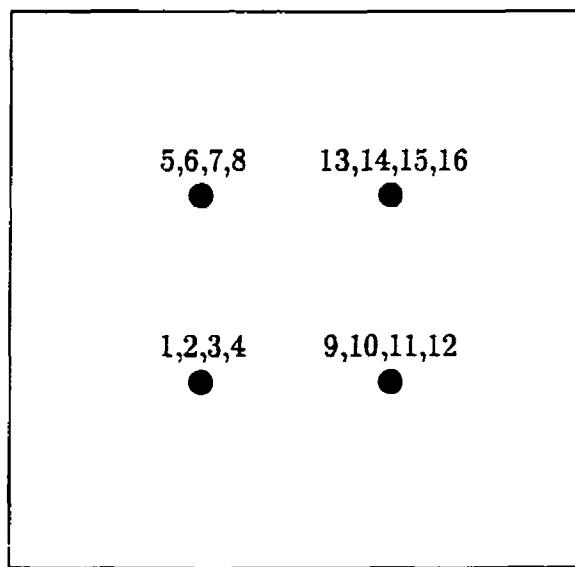


Figure 5.1: Numérotation des inconnus - cas 1-D

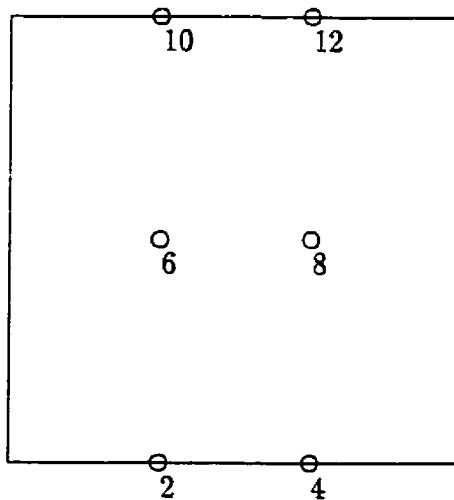
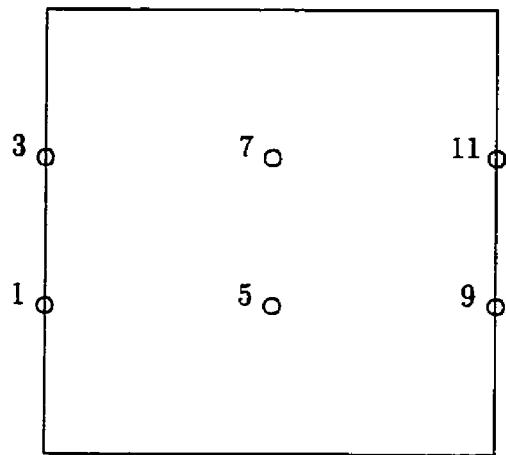
*P2, ordre spatial quadratique*



1,5,9,13: mode 0,0  
2,6,10,14: mode 2,0  
3,7,11,15: mode 2,1  
4,8,12,16: mode 2,2

Figure 5.2: Numérotation locale des inconnus pairs - cas 2-D

$P2$ , ordre spatial quadratique



1,3,5,7,9,11: mode 1,0  
2,4,6,8,10,12: mode 1,1

Figure 5.3: Numérotation locale des inconnus impairs - cas 2-D

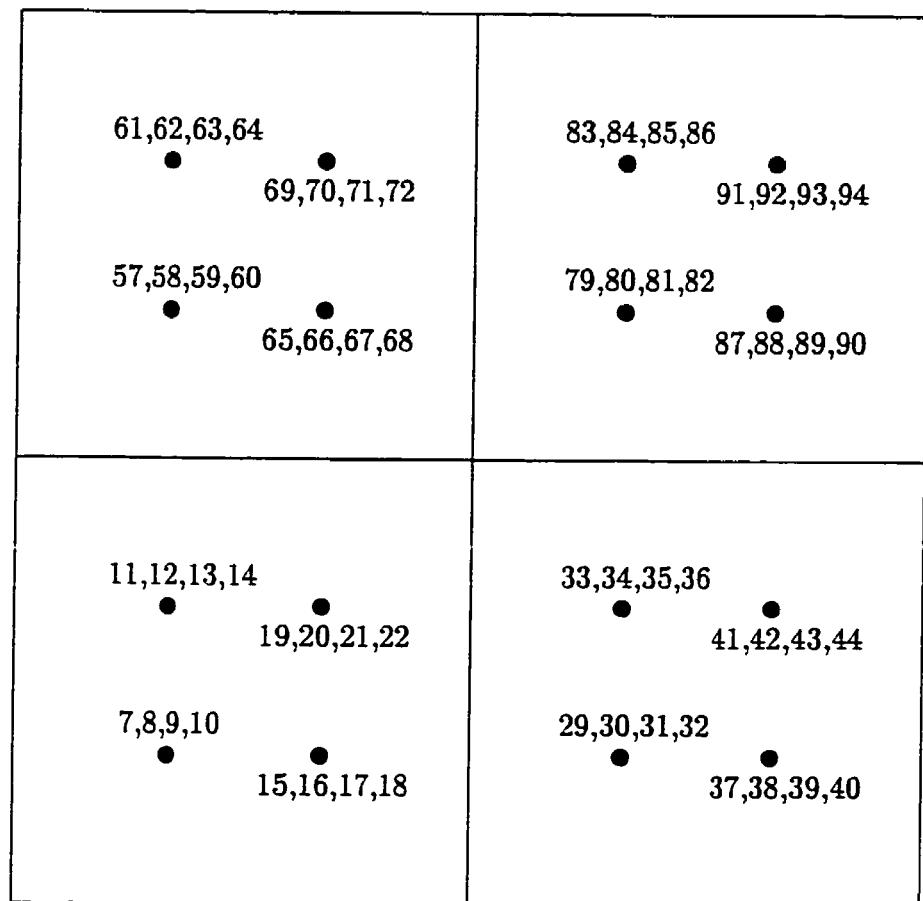
*P2, ordre spatial quadratique*

Figure 5.4: Numérotation globale des inconnus pairs - cas 2-D

*P2, ordre spatial quadratique*

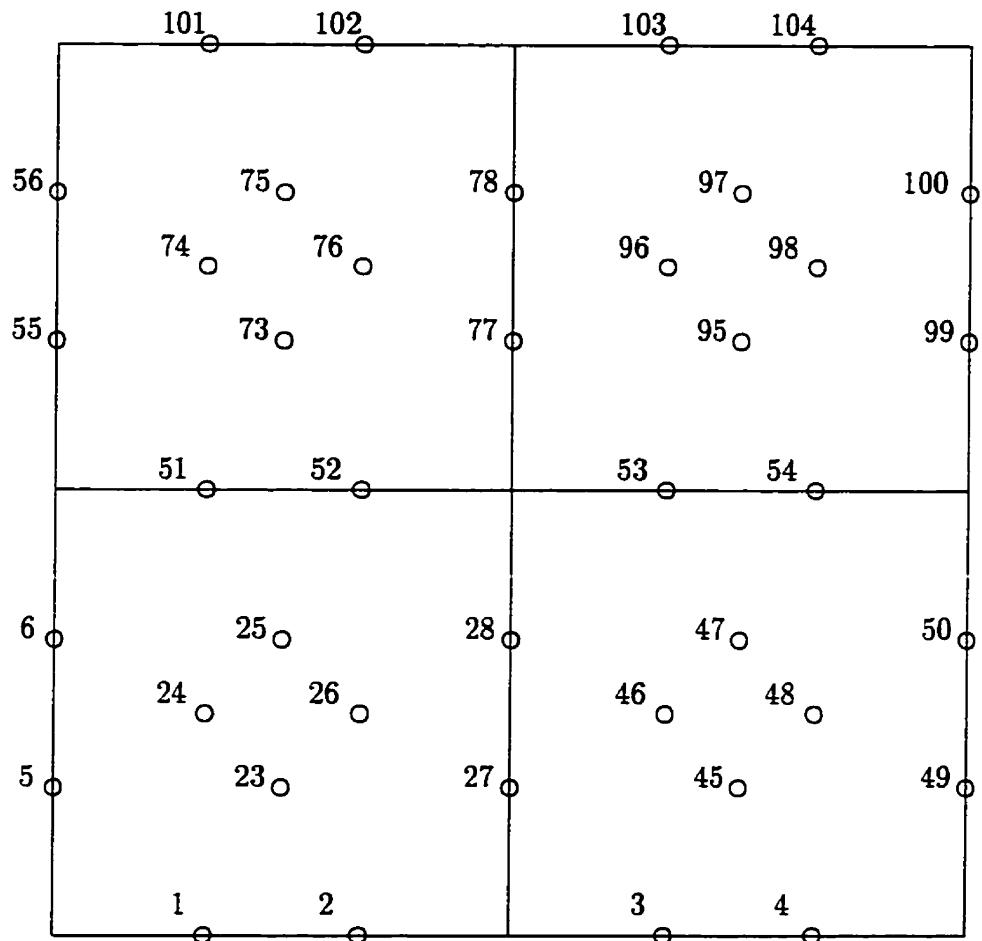
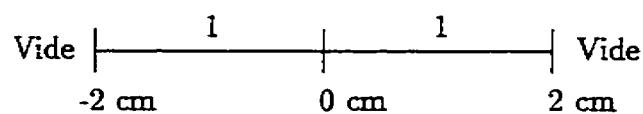
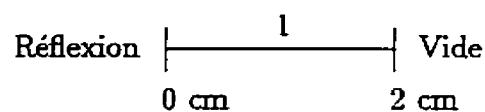


Figure 5.5: Numérotation globale des inconnus impairs - cas 2-D

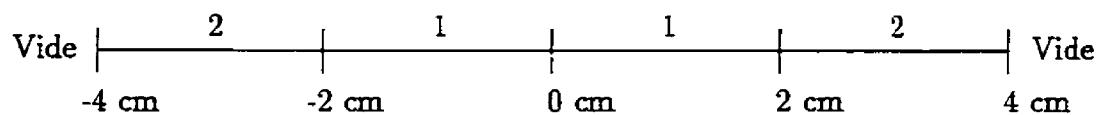
## Géométrie 1D-A



## Géométrie 1D-B



## Géométrie 1D-C



## Géométrie 1D-D

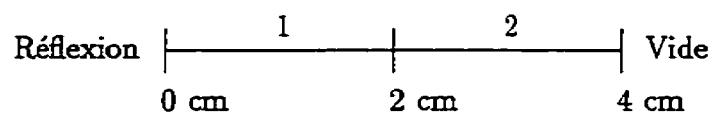


Figure 6.1: Géométries 1-D, 1 groupe d'énergie et source de fission

## Géométrie 1D-RIY

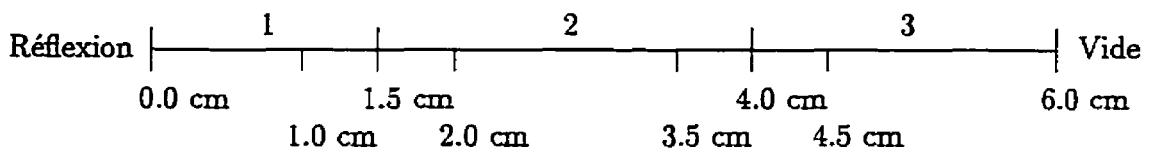


Figure 6.2: Géométrie 1-D, 1 groupe d'énergie, fission et diffusion anisotrope

## ANNEXE A

### Équations d'Euler-Lagrange

Étant donnée une fonctionnelle  $\mathcal{F}$ , on trouve les équations d'Euler associées en appliquant le principe variationnel suivant:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\mathcal{F}[\vec{X} + \epsilon \delta \vec{X}] - \mathcal{F}[\vec{X}]}{\epsilon} \right) = 0 \quad (\text{A.1})$$

pour une variation arbitraire  $\delta \vec{X}$ . Dans le cas de la fonctionnelle mixte-duale, on a:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\varphi^+, \varphi^-] &= \frac{1}{2} \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \left\{ 2\varphi^+ (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi^-) \right. \\ &+ \varphi^+ \Sigma_+ \varphi^+ - \varphi^- \Sigma_- \varphi^- - 2Q^+ \varphi^+ + 2Q^- \varphi^- \left. \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_\nu \int_{S_\nu} d^2r \left\{ \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) < 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) \varphi^{-2} \right. \\ &\left. - \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) > 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu) \varphi^{-2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

et  $\vec{X} = (\varphi^+, \varphi^-)$ .

On applique l'équation A.1 premièrement sur la composante paire du flux.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\mathcal{F}[\varphi^+ + \epsilon \delta \varphi^+, \varphi^-] - \mathcal{F}[\varphi^+, \varphi^-]}{\epsilon} \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\delta \mathcal{F}_+}{\epsilon} \right) = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{F}_+ &= \epsilon \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^+ (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi^-) + \epsilon \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^+ \Sigma_+ \varphi^+ \\ &+ \frac{1}{2} \epsilon^2 \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^+ \Sigma_+ \delta \varphi^+ - \epsilon \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega Q^+ \delta \varphi^+ \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

On divise par  $\epsilon$  et on prend la limite lorsque  $\epsilon \rightarrow 0$ . Puisque l'expression obtenue doit être vraie quelle que soit la variation  $\delta \varphi^+$ , l'intégration sur le volume donne

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} \varphi^- + \Sigma_+ \varphi^+ = Q^+ \quad (\text{A.5})$$

On recommence, mais cette fois en appliquant une variation sur le flux impair.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{F[\varphi^+, \varphi^- + \epsilon \delta \varphi^-] - F[\varphi^+, \varphi^-]}{\epsilon} \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\delta \mathcal{F}_-}{\epsilon} \right) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Après division par  $\epsilon$  et prise de la limite quand  $\epsilon \rightarrow 0$ , on obtient:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \varphi^+ (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \delta \varphi^-) \\ &\quad - \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^- \Sigma_- \varphi^- + \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^- Q^- \\ &\quad + \sum_{\nu} \int_{S_{\nu}} d^2r \left\{ \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) < 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^- \delta \varphi^- \right. \\ &\quad \left. - \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) > 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^- \delta \varphi^- \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

On applique l'identité vectorielle suivante sur le premier terme de la dernière équation:  $\vec{\nabla} \cdot (c\vec{v}) = (\vec{\nabla}c) \cdot \vec{v} + c(\vec{\nabla} \cdot \vec{v})$ .

$$\begin{aligned} \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \varphi^+ (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \delta \varphi^-) &= - \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^- (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi^+) \\ &\quad + \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \vec{\nabla} \cdot (\varphi^+ \vec{\Omega} \delta \varphi^-) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

À l'aide du théorème de la divergence de Gauss, la dernière intégrale devient:

$$\begin{aligned} \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \vec{\nabla} \cdot (\varphi^+ \vec{\Omega} \delta \varphi^-) &= \sum_{\nu} \int_{S_{\nu}} d^2r \left\{ \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) < 0} d^2\Omega \delta \varphi^- (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^+ \right. \\ &\quad \left. + \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) > 0} d^2\Omega \delta \varphi^- (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^+ \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

En réécrivant l'équation (A.7), on a maintenant:

$$\begin{aligned} 0 &= - \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^- (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi^+) \\ &\quad + \sum_{\nu} \int_{S_{\nu}} d^2r \left\{ \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) < 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^+ \delta \varphi^- \right. \\ &\quad \left. + \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) > 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^+ \delta \varphi^- \right\} \\ &\quad - \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^- \Sigma_- \varphi^- + \int_V d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \delta \varphi^- Q^- \\ &\quad + \sum_{\nu} \int_{S_{\nu}} d^2r \left\{ \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) < 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^- \delta \varphi^- \right. \\ &\quad \left. - \int_{(\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) > 0} d^2\Omega (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_{\nu}) \varphi^- \delta \varphi^- \right\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Pour une variation arbitraire  $\delta\varphi^-$ , l'intégrale de volume donne

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} \varphi^+ + \Sigma_- \varphi^- = Q^- \quad (\text{A.11})$$

tandis que les intégrales de surfaces donnent les conditions de vide

$$\varphi^+ + \varphi^- = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu < 0 \quad (\text{A.12})$$

$$\varphi^+ - \varphi^- = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{N}_\nu > 0 \quad (\text{A.13})$$

## ANNEXE B

### Matrices angulaires

#### B.1 Produits $\Omega_\nu Y_l^m(\vec{\Omega})$

On donne les valeurs du produit  $\Omega_\nu Y_l^m(\vec{\Omega})$ , obtenues à partir des définitions de  $\Omega_\nu$  et de  $Y_l^m(\vec{\Omega})$  telles que données par les équations 3.20 et 1.10. Un calcul détaillé se trouve à la référence [12].

Le produit  $\Omega_1 Y_l^m(\vec{\Omega})$  s'évalue de la façon suivante:

$$\Omega_1 Y_l^m(\vec{\Omega}) = (a_1^{(l,m;l-1,m)}, a_1^{(l,m;l+1,m)}) \begin{pmatrix} Y_{l-1}^m(\vec{\Omega}) \\ Y_{l+1}^m(\vec{\Omega}) \end{pmatrix} \quad (B.1)$$

où

$$a_1^{(l,m;l+1,m)} = v(l, m) \quad (B.2)$$

$$a_1^{(l,m;l-1,m)} = a_1^{(l-1,m;l,m)} = v(l-1, m) \quad (B.3)$$

$$v(l, m) = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \quad (B.4)$$

Pour les cas à deux dimensions, on doit aussi évaluer le terme  $\Omega_2 Y_l^m(\vec{\Omega})$ :

$$\begin{aligned} \Omega_2 Y_l^m(\vec{\Omega}) &= (a_2^{(l,m;l-1,m-1)}, a_2^{(l,m;l-1,m+1)}, a_2^{(l,m;l+1,m-1)}, a_2^{(l,m;l+1,m+1)}) \\ &\times \begin{pmatrix} Y_{l-1}^{m-1}(\vec{\Omega}) \\ Y_{l-1}^{m+1}(\vec{\Omega}) \\ Y_{l+1}^{m-1}(\vec{\Omega}) \\ Y_{l+1}^{m+1}(\vec{\Omega}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (B.5)$$

Lorsque  $|m| = 0$  ou  $|m \pm 1| = 0$ , on a

$$a_2^{(l,0;l+1,1)} = \sqrt{2}u(l, 0) \quad (B.6)$$

$$a_2^{(l,0;l-1,1)} = -\sqrt{2}u(l-1,-1) \quad (B.7)$$

$$a_2^{(l,1;l+1,0)} = -\sqrt{2}u(l,-1) \quad (B.8)$$

$$a_2^{(l,1;l-1,0)} = \sqrt{2}u(l-1,0) \quad (B.9)$$

Pour les autres contributions, on obtient

$$a_2^{(l,m;l+1,m\pm 1)} = \pm u(l, \pm m) \quad (B.10)$$

$$\begin{aligned} a_2^{(l,m;l-1,m\pm 1)} &= a_2^{(l-1,m\pm 1;l,m)} \\ &= u(l-1, \mp m-1) \end{aligned} \quad (B.11)$$

$$u(l, m) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} \quad (B.12)$$

## B.2 Matrices $B_\nu$

Les matrices  $B_\nu$  contiennent des éléments ayant la forme suivante:

$$B_1^{lm,l'm'} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 d\mu Y_l^m(\varphi, \mu) Y_{l'}^{m'}(\varphi, \mu) \quad (B.13)$$

$$B_2^{lm,l'm'} = \int_0^\pi d\varphi \int_{-1}^1 d\mu Y_l^m(\varphi, \mu) Y_{l'}^{m'}(\varphi, \mu) \quad (B.14)$$

Les détails du calcul de ces intégrales sont donnés à la référence [12]; on ne présente ici que les résultats.

$$B_1^{lm,l'm'} = \begin{cases} \frac{1}{2} & m = m' \text{ et } l = l' \\ b_1(l, m, l', m') & m = m' \text{ et } l' - l \text{ sont impairs} \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (B.15)$$

$$B_2^{lm,l'm'} = \begin{cases} \frac{1}{2} & m = m' \text{ et } l = l' \\ b_2(l, m, l', m') & m - m' \text{ et } l' - l \text{ sont impairs} \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (B.16)$$

où  $b_1(l, m, l' - l) = b_1(l, -m, l' - l)$ . Les termes non nuls de  $b_1$  et  $b_2$  sont donnés aux tableaux B.1 et B.2 pour des valeurs de  $l$  allant jusqu'à 5.

Tableau B.1: Coefficients  $b_1(l, m; l', m')$ 

$l, m$	$l', m'$	$b_1$	$l', m'$	$b_1$
0,0	1,0	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	3,0	$\frac{-\sqrt{7}}{16}$
	5,0	$\frac{\sqrt{11}}{32}$		
1,0	2,0	$\frac{\sqrt{15}}{16}$	4,0	$\frac{-\sqrt{3}}{32}$
1,1	2,1	$\frac{3\sqrt{5}}{16}$	4,1	$\frac{-\sqrt{30}}{32}$
2,0	3,0	$\frac{\sqrt{35}}{16}$	5,0	$\frac{-\sqrt{1375}}{256}$
2,1	3,1	$\frac{\sqrt{70}}{32}$	5,1	$\frac{-5\sqrt{11}}{256}$
2,2	3,2	$\frac{5\sqrt{7}}{32}$	5,2	$\frac{-5\sqrt{77}}{256}$
3,0	4,0	$\frac{27\sqrt{7}}{256}$		
3,1	4,1	$\frac{\sqrt{8505}}{256}$		
3,2	4,2	$\frac{5\sqrt{189}}{256}$		
3,3	4,3	$\frac{105}{256}$		
4,0	5,0	$\frac{27\sqrt{11}}{256}$		
4,1	5,1	$\frac{\sqrt{5346}}{256}$		
4,2	5,2	$\frac{\sqrt{2079}}{128}$		
4,3	5,4	$\frac{63\sqrt{11}}{512}$		

Tableau B.2: Coefficients  $b_2(l, m; l', m')$ 

$l, m$	$l', m'$	$b_2$	$l', m'$	$b_2$	$l', m'$	$b_2$
0,0	1,1	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	3,1	$\frac{\sqrt{42}}{64}$	3,3	$\frac{-\sqrt{70}}{64}$
	5,1	$\frac{\sqrt{165}}{256}$	5,3	$\frac{-\sqrt{770}}{512}$	5,5	$\frac{3\sqrt{154}}{512}$
1,0	2,1	$\frac{3\sqrt{5}}{16}$	4,1	$\frac{\sqrt{270}}{128}$	4,3	$\frac{-\sqrt{210}}{128}$
	1,1	$\frac{-\sqrt{15}}{32}$	2,2	$\frac{3\sqrt{5}}{32}$	4,0	$\frac{-3\sqrt{3}}{256}$
	4,2	$\frac{\sqrt{15}}{128}$	4,4	$\frac{-\sqrt{105}}{256}$		
2,0	3,1	$\frac{\sqrt{10290}}{256}$	3,3	$\frac{5\sqrt{14}}{256}$	5,1	$\frac{95\sqrt{33}}{4096}$
	5,3	$\frac{-5\sqrt{18634}}{8192}$	5,5	$\frac{-3\sqrt{19250}}{8192}$		
2,1	3,0	$\frac{-\sqrt{105}}{64}$	3,2	$\frac{5\sqrt{7}}{64}$	5,0	$\frac{-\sqrt{4125}}{2048}$
	5,2	$\frac{5\sqrt{77}}{1024}$	5,4	$\frac{-5\sqrt{231}}{2048}$		
	2,2	$\frac{-\sqrt{70}}{256}$	3,3	$\frac{5\sqrt{378}}{256}$	5,1	$\frac{-5\sqrt{11}}{4096}$
	5,3	$\frac{5\sqrt{4158}}{8192}$	5,5	$\frac{-25\sqrt{2310}}{8192}$		
3,0	4,1	$\frac{93\sqrt{70}}{2048}$	4,3	$\frac{63\sqrt{10}}{2048}$		
	3,1	$\frac{-231\sqrt{42}}{8192}$	4,2	$\frac{19\sqrt{1890}}{4096}$	4,4	$\frac{7\sqrt{270}}{8192}$
	3,2	$\frac{-5\sqrt{378}}{2048}$	4,3	$\frac{315\sqrt{6}}{2048}$		
	3,3	$\frac{-9\sqrt{70}}{8192}$	4,2	$\frac{-45\sqrt{14}}{4096}$	4,4	$\frac{1575\sqrt{2}}{8192}$
4,0	5,1	$\frac{313\sqrt{1485}}{32768}$	5,3	$\frac{261\sqrt{770}}{65536}$	5,5	$\frac{81\sqrt{154}}{65536}$
	4,1	$\frac{-309\sqrt{110}}{16384}$	5,2	$\frac{25\sqrt{4158}}{8192}$	5,4	$\frac{27\sqrt{154}}{16384}$
	4,2	$\frac{-165\sqrt{33}}{16384}$	5,3	$\frac{981\sqrt{154}}{32768}$	5,5	$\frac{9\sqrt{19250}}{32768}$
	4,3	$\frac{-9\sqrt{770}}{16384}$	5,2	$\frac{-7\sqrt{5346}}{8192}$	5,4	$\frac{945\sqrt{22}}{16384}$
	4,4	$\frac{-\sqrt{2079}}{32768}$	5,3	$\frac{-315\sqrt{22}}{65536}$	5,5	$\frac{2205\sqrt{110}}{65536}$

## ANNEXE C

### Polynômes de Legendre et de Lagrange

#### C.1 Polynômes de Legendre

Les polynômes de Legendre sont définis dans l'intervalle  $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  de la façon suivante:

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1 \\ P_1(u) &= 2\sqrt{3}u \\ P_2(u) &= \frac{\sqrt{5}}{2}(12u^2 - 1) \\ P_3(u) &= \sqrt{7}(20u^3 - 3u) \end{aligned} \quad (C.1)$$

(C.2)

Les autres termes se calculent à l'aide de l'expression suivante:

$$P_{k+1}(u) = 2\sqrt{\frac{2k+3}{2k+1}} \frac{2k+1}{k+1} u P_k(u) - \sqrt{\frac{2k+3}{2k-1}} \frac{k}{k+1} P_{k-1}(u) \quad (C.3)$$

pour  $k \geq 1$ . Ces polynômes satisfont la relation d'orthogonalité suivante:

$$\int_{-1/2}^{1/2} du P_k(u) P_{k'}(u) = \delta_{kk'} \quad (C.4)$$

#### C.2 Polynômes de Lagrange

De façon générale, on définit les polynômes de Lagrange d'ordre  $K$ ,  $L_i^K(u)$  de la façon suivante:

$$L_i^K(u) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^K (u_j - u) \quad (C.5)$$

où les  $K+1$  degrés de liberté sont représentés par des points de collocation  $(u_i; i = 0, K)$  où  $u_0 = -\frac{1}{2}$  et  $u_K = \frac{1}{2}$ . Le choix des points de collocation est fait de façon

que les termes non diagonaux de la matrice  $R$  soient tous nuls, sauf les quatre coins (couplages entre les termes  $L_0$  et  $L_K$ ). On définit la matrice  $R$  de la façon suivante:

$$R_{kl} = \int_{-1/2}^{1/2} du L_k(u) L_l(u) \quad (C.6)$$

Une description complète des polynômes de Lagrange utilisés figure à la référence [12].

On donne ici les éléments de la matrice  $R$  jusqu'à l'ordre cubique, de même que la valeur des polynômes à  $\pm \frac{1}{2}$ .

### 1. Ordre linéaire ( $K = 1$ )

$$L_0(u) = \frac{1}{2} - u \quad (C.7)$$

$$L_1(u) = \frac{1}{2} + u \quad (C.8)$$

$$R_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \quad (C.9)$$

	$u = -1/2$	$u = 1/2$
$L_0(u)$	1	0
$L_1(u)$	0	1

### 2. Ordre quadratique ( $K = 2$ )

$$L_0(u) = -\frac{1}{8} - u + \frac{5u^2}{2} \quad (C.10)$$

$$L_1(u) = \frac{5}{4} - 5u^2 \quad (C.11)$$

$$L_2(u) = -\frac{1}{8} + u + \frac{5u^2}{2} \quad (C.12)$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & -\frac{1}{24} \\ 0 & \frac{5}{6} & 0 \\ -\frac{1}{24} & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix} \quad (C.13)$$

	$u = -1/2$	$u = 1/2$
$L_0(u)$	1	0
$L_1(u)$	0	0
$L_2(u)$	0	1

### 3. Ordre cubique ( $K = 3$ )

$$L_0(u) = -\frac{1}{8} + \frac{3u}{4} + \frac{5u^2}{2} - 7u^3 \quad (C.14)$$

$$L_1(u) = \frac{5}{8} - \frac{5\sqrt{7}u}{4} - \frac{5u^2}{2} + 5\sqrt{7}u^3 \quad (C.15)$$

$$L_2(u) = \frac{5}{8} + \frac{5\sqrt{7}u}{4} - \frac{5u^2}{2} - 5\sqrt{7}u^3 \quad (C.16)$$

$$L_3(u) = -\frac{1}{8} - \frac{3u}{4} + \frac{5u^2}{2} + 7u^3 \quad (C.17)$$

$$R_3 = \begin{bmatrix} \frac{1}{15} & 0 & 0 & \frac{1}{60} \\ 0 & \frac{5}{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{12} & 0 \\ \frac{1}{60} & 0 & 0 & \frac{1}{15} \end{bmatrix} \quad (C.18)$$

	$u = -1/2$	$u = 1/2$
$L_0(u)$	1	0
$L_1(u)$	0	0
$L_2(u)$	0	0
$L_3(u)$	0	1

## ANNEXE D

### Dérivation des équations *NASP2*

On dérive les équations *NASP<sub>2</sub>* à partir des équations d'Euler-Lagrange associées à la fonctionnelle (3.22). On considère ici le cas où les sources sont isotropes ( $Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r})$ ) et où les sections efficaces de diffusion sont linéairement anisotropes. De plus, on ne considère que deux dimensions spatiales ( $u_1, u_2$ ). Dans ce cas, on a

$$\begin{aligned}
 Z_1(\vec{r}) &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{15}} & 0 \\ 0 & - \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 Z_2(\vec{r}) &= \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{-1}{\sqrt{15}} \\ - & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \\
 Z_{s,+}(\vec{r}) &= \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\Sigma_a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\Sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}\Sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\Sigma \end{bmatrix} \\
 Z_{s,-}(\vec{r}) &= \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\Sigma_{tr} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\Sigma_{tr} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

où  $\Sigma_a = \Sigma - \Sigma_{s,0}$  et  $\Sigma_{tr} = \Sigma - \Sigma_{s,1}$ . La méthode *NASP<sub>N</sub>* consiste à éliminer les termes de  $Z_v$  couplant les modes  $l$  pairs où  $m$  est impair. Pour  $P_2$ , les termes éliminés sont représentés par des "—" dans les matrices  $Z_v$ .

En substituant ces matrices dans la fonctionnelle (3.22) et en ne gardant que les intégrales de surface, on obtient une fonctionnelle qui ne dépend plus maintenant que de l'espace ( $\varphi(u_1, u_2)$ ) soit:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} = & \int_S d^2r \left( \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{00}\partial^1\varphi_{10} + \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{00}\partial^2\varphi_{11} \right. \\ & + \frac{2}{\sqrt{15}}\varphi_{20}\partial^1\varphi_{10} - \frac{1}{\sqrt{15}}\varphi_{20}\partial^2\varphi_{11} + \frac{1}{\sqrt{5}}\varphi_{22}\partial^2\varphi_{11} \\ & + \frac{1}{2}\Sigma_a\varphi_{00}^2 + \frac{1}{2}\Sigma\varphi_{20}^2 + \frac{1}{2}\Sigma\varphi_{21}^2 + \frac{1}{2}\Sigma\varphi_{22}^2 \\ & \left. - \frac{1}{2}\Sigma_{tr}\varphi_{10}^2 - \frac{1}{2}\Sigma_{tr}\varphi_{11}^2 - Q\varphi_{00} \right) = 0\end{aligned}$$

En dérivant par rapport à  $\varphi_{00}$ , on obtient:

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\partial^1\varphi_{10} + \frac{1}{\sqrt{3}}\partial^2\varphi_{11} + \Sigma_a\varphi_{00} = Q \quad (D.1)$$

En faisant de même avec les 2 modes impairs, on obtient les équations suivantes:

$$\varphi_{10} = -\frac{1}{\sqrt{3}\Sigma_{tr}}\partial^1\varphi_{00} - \frac{2}{\sqrt{15}\Sigma_{tr}}\partial^1\varphi_{20} \quad (D.2)$$

$$\varphi_{11} = -\frac{1}{\sqrt{3}\Sigma_{tr}}\partial^2\varphi_{00} + \frac{1}{\sqrt{15}\Sigma_{tr}}\partial^2\varphi_{20} - \frac{1}{\sqrt{5}\Sigma_{tr}}\partial^2\varphi_{22} \quad (D.3)$$

En répétant pour  $\varphi_{20}$  et pour  $\varphi_{22}$ , et en utilisant (D.2) et (D.3), on obtient:

$$\begin{aligned}\varphi_{20} = & \frac{1}{15\Sigma\Sigma_{tr}} \left( 2\nabla^2[\sqrt{5}\varphi_{00} + 2\varphi_{20}] \right. \\ & \left. - 3\partial^2\partial^2[\sqrt{5}\varphi_{00} + 2\varphi_{20}] + \sqrt{3}\partial^2\partial^2[\sqrt{3}\varphi_{20} - \varphi_{22}] \right) \quad (D.4)\end{aligned}$$

$$\varphi_{22} = \frac{1}{5\sqrt{3}\Sigma\Sigma_{tr}} \left( \partial^2\partial^2[\sqrt{5}\varphi_{00} + 2\varphi_{20}] - \sqrt{3}\partial^2\partial^2[\sqrt{3}\varphi_{20} - \varphi_{22}] \right) \quad (D.5)$$

On substitue (D.2) et (D.3) dans (D.1). Celle-ci s'écrit maintenant:

$$-\frac{1}{3\Sigma_{tr}}\nabla^2\varphi_{00} + \Sigma_a\varphi_{00} = Q + \frac{1}{\Sigma_{tr}3\sqrt{5}} \left( 2\partial^1\partial^1\varphi_{20} - \partial^2\partial^2\varphi_{20} + \sqrt{3}\partial^2\partial^2\varphi_{22} \right)$$

Cette équation peut se réécrire de la façon suivante:

$$-\frac{1}{3\Sigma_{tr}}\nabla^2 \left( \varphi_{00} + \frac{2}{\sqrt{5}}\varphi_{20} \right) + \frac{1}{\sqrt{5}\Sigma_{tr}}\partial^2\partial^2\varphi_{20} - \frac{1}{\sqrt{15}\Sigma_{tr}}\partial^2\partial^2\varphi_{22} + \Sigma_a\varphi_{00} - Q = 0 \quad (D.6)$$

Des équations  $NASP_N$  d'ordre supérieur peuvent être obtenues de la même façon. L'équation (D.6) a la même forme que l'équation  $P_2$  de Larsen et Tomašević [15], à l'exception du troisième terme et du quatrième terme, supplémentaires dans (D.6). La méthode  $NASP_2$  est donc, à première vue, une meilleure approximation de l'équation de transport puisque moins de termes de couplage entre les différents modes sont négligés.

IMAGE EVALUATION  
TEST TARGET (QA-3)

© 1993, Applied Image, Inc., All Rights Reserved.