

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE
CENTRE D'ETUDES DE LIMEIL-VALENTON
Département de MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES
Service de Mathématiques et Codes Numériques

B.P. n° 27

94190 VILLENEUVE St GEORGES

NOTE - CEA	
002461	19 NOV. 85
CEA-N-	

RESOLUTION DE L'EQUATION DE TRANSPORT STATIONNAIRE PAR DES METHODES
PARTICULAIRES. IMPLEMENTATION ET RESULTATS NUMERIQUES

B. MERCIER

Octobre 1985

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE
CENTRE D'ETUDES DE LIMEIL-VALENTON
Département de MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES
Service de Mathématiques et Codes Numériques
B.P. n° 27
94130 VILLENEUVE St GEORGES

NOTE - CEA	
002461	1980V.85
CEA-N-	

RESOLUTION DE L'EQUATION DE TRANSPORT STATIONNAIRE PAR DES METHODES
PARTICULAIRES. IMPLEMENTATION ET RESULTATS NUMERIQUES

B. MERCIER

Octobre 1985

INTRODUCTION

Dans les références [1] [2], nous proposons une méthode pour résoudre l'équation de transport stationnaire.

Soit z la source de collision, on sait en effet que l'équation de transport stationnaire peut être mise sous la forme intégrale suivante :

$$(0.1) \quad z = Pz + f$$

où f est la source externe et $P = FQ$ où F est l'opérateur de collision et Q l'opérateur d'advection.

Le principe de notre méthode est le suivant.

Soit $X \subset \mathbb{R}^d$ l'espace des phases, on introduit une partition \mathcal{T}_h de X (où h désigne le maximum des diamètres des éléments $K \in \mathcal{T}_h$).

On introduit ensuite des points $(x_{K,i})_{1 \leq i \leq d}$ et des fonctions de base $(\varphi_{K,j})_{1 \leq j \leq d}$, nulles en dehors de K et dont la restriction à K est un polynôme de degré m tel que :

$$\varphi_{K,j}(x_{K,i}) = 1 \quad \text{si } i = j \text{ et } 0 \text{ sinon.}$$

On approche alors en premier lieu la source extérieure f par :

$$f_h = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{1 \leq i \leq d} \alpha_{K,i}^0 \delta_{x_{K,i}}$$

avec

$$\alpha_{K,i}^0 = \int_K f(x) \varphi_{K,i}(x) dx.$$

Ensuite, on calcule

$$z_h^N = \sum_{0 \leq n \leq N} f_h^n$$

où les sources de collision successives f_h^n sont définies de la façon suivante : soit :

$$f_h^n \equiv \sum_{K' \in \mathcal{C}_h} \sum_{1 \leq j \leq d'} \alpha_{K',j}^n \delta_{x_{K',j}}$$

on pose

$$f_h^{n+1} = \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \sum_{1 \leq i \leq d'} \alpha_{K,i}^{n+1} \delta_{x_{K,i}}$$

où

$$(0.2) \quad \alpha_{K,i}^{n+1} = \sum_{K' \in \mathcal{C}_h} \sum_{1 \leq j \leq d'} m_{K,i;K',j} \alpha_{K',j}^n$$

$$(0.3) \quad m_{K,i;K',j} \equiv \int_K \varphi_{K,i}(x) E(x; x_{K',j}) dx$$

et

$$(0.4) \quad E(x; y) \equiv (P\delta_y)(x)$$

est la source de première collision associée à la mesure de Dirac δ_y (c'est-à-dire lorsque la source extérieure f est remplacée par δ_y).

Soit $N(h)$ le nombre d'éléments de la partition \mathcal{C}_h , les nombres $m_{K,i;K',j}$ sont les coefficients d'une matrice carrée M d'ordre $N(h) \times d'$, et le vecteur des coefficients $\alpha_{K,i}^{n+1}$ est donc obtenu à partir du vecteur des $\alpha_{K,i}^n$ en le multipliant par la matrice M .

Le problème à résoudre étant sous-critique, le rayon spectral de la matrice M sera plus petit que 1, et le nombre maximal d'itération N sera donc déterminé de telle façon que le résidu

$$\sum_K \sum_i \alpha_{K,i}^N$$

soit plus petit qu'un nombre donné, suffisamment petit.

L'analyse de la convergence de la méthode est faite dans les références [1] et [2], où l'on montre que sous des hypothèses raisonnables

l'erreur est en $O(h^{m+1})$. Si de plus les points $x_{K,i}$ sont bien choisis (points de Gauss, par exemple), on montre dans la référence [3], avec des hypothèses supplémentaires de régularité pour le noyau E, que cette estimation peut être améliorée : on obtient

$$O(h^s) \text{ avec } s = \max_{0 \leq s' \leq g-m} [\min(m + s' + 2, g - s' + 1)]$$

où g est le degré des polynômes exactement intégrés par la meilleure formule d'intégration numérique utilisant les points $x_{K,i}$ et s' est astreint à prendre des valeurs entières.

Dans le cas où $m = 1$ et les $x_{K,i}$ sont les points de Gauss d'ordre 1, on a $g = 3$ d'où $s = 3$.

Dans le cas où $m = 0$, $d' = 1$ et les $x_{K,1}$ sont les barycentres des éléments K , on a $g = 1$, d'où $s = 2$.

Nous étudierons la méthode dans le cas $m = 0$ et $m = 1$, en regardant si les estimations prédites par la théorie sont bien vérifiées numériquement.

Rappelons que ces estimations concernent seulement la précision de l'évaluation de quantités intégrales du type

$$\int_X z f^* dx$$

où f^* est une fonction régulière donnée, par exemple la fuite ou la capture, ou bien l'absorption dans une zone fixée à l'avance.

Dans le présent rapport, nous donnerons des résultats obtenus en 1-D (géométrie sphérique) et en 2-D (géométrie axisymétrique).

Pour simplifier l'introduction de l'opérateur P et le calcul de la solution élémentaire $E(x ; y)$, nous traiterons d'abord le cas d'un terme d'advection arbitraire, et nous montrerons que les résultats en géométrie sphérique et axisymétrique peuvent être obtenus comme des cas particuliers.

1 - CAS D'UN TERME D'ADVECTION ARBITRAIRE

Soit $a : X \longrightarrow \mathbb{R}^d$ un champ de vecteurs donné de composantes $(a_i)_{1 \leq i \leq d}$.

On considère l'équation :

$$(1.1) \quad \frac{\partial}{\partial x_i} (a_i u) + cu = F(cu) + f$$

où c est la section efficace ($c \equiv c(x)$) et F l'opérateur intégral défini par :

$$(Fw)(x) = \int_X g(x, x') w(x') dx'.$$

Nous poserons :

$$(1.2) \quad z \equiv F(cu) + f$$

Si le second membre de l'équation (1.1) est connu, celle-ci se réduit à une équation hyperbolique que l'on peut résoudre par la méthode des caractéristiques.

L'équation des caractéristiques est :

$$\frac{dx}{ds} = a(x(s)).$$

Nous désignerons par $G(s ; y)$ la solution de cette équation vérifiant $x(0) = y^{(*)}$. Pour $s \in \mathbb{R}$ fixé, nous désignerons par $J(s ; y)$ le Jacobien de l'application $y \longrightarrow G(s, y)$.

* Autrement dit, pour $y \in X$ fixé, $x = G(s, y)$ décrit pour $s \in \mathbb{R}$ la caractéristique passant par y .

Nous supposons que $\forall y \in X$, la caractéristique $s \rightarrow G(s ; y)$ sort du domaine X pour $|s|$ assez grand.

On se placera dans le cas de conditions aux limites absorbantes, c'est-à-dire que l'on impose :

$$(1.3) \quad u = 0 \quad \text{sur} \quad \partial X_-$$

où ∂X_- est la partie de la frontière ∂X où les caractéristiques sont entrantes.

Dans ces conditions, on vérifie que la solution u du problème (1.1) (1.2) où $z \equiv F(\sigma u) + f$ est donnée par :

$$u(x) = \int_0^\infty J(-s ; x) z(G(-s ; x)) 1_X(G(-s ; x)) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(-s' ; x)) ds'\right) ds$$

(une démonstration d'un résultat analogue est donné dans Raviart [4]).

Soit Q l'opérateur défini par :

$$(1.4) \quad Qz = \int_0^\infty J(-s ; x) z(G(-s ; x)) 1_X(G(-s ; x)) \sigma(x) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(-s' ; x)) ds'\right) ds$$

en revenant à (1.2), on voit que

$$z = FQz + f$$

On est bien dans un cas particulier de (0.1) avec $P = FQ$.

Pour calculer les coefficients de la matrice M , on utilise le résultat suivant.

Lemme 1.1 : Soit ψ une fonction donnée, $E = P\psi$ et φ une fonction quelconque, alors on a :

$$(1.5) \quad \int_X E\varphi \, dx = \int_X w^* \psi \, dy$$

où w^* est relié à z^* par

$$(1.6) \quad w^*(y) = \int_0^\infty \exp\left(-\int_0^{s'} \sigma(G(s'', y)) \, ds''\right) 1_X(G(s'; y)) \sigma z^*(G(s'; y)) \, ds'$$

et z^* est relié à φ par $z^* = F^* \varphi$, c'est-à-dire

$$(1.7) \quad z^*(x') = \int_X g(x, x') \varphi(x) \, dx .$$

Preuve :

On a $P = FQ$ et donc $E = F(\sigma w)$ où w est la solution de :

$$(1.8) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_i} (a_i w) + \sigma w = \psi \\ w = 0 \text{ sur } \partial X_- \end{cases}$$

Définissons z^* par (1.7).

On vérifie facilement que la solution du problème (adjoint de (1.8))

$$\begin{cases} -a_i \frac{\partial}{\partial x_j} w^* + \sigma w^* = \sigma z^* \\ w^* = 0 \text{ sur } \partial X_+ \end{cases}$$

vérifie (1.6). Or

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (a_i w w^*) = w^* \frac{\partial}{\partial x_i} (a_i w) + w a_i \frac{\partial w^*}{\partial x_i}$$

entraîne par intégration pour $x \in X$ (en utilisant les conditions limites sur ∂X_- et ∂X_+) :

$$\int_X [w^* (\psi - \sigma w) + w (\sigma w^* - \sigma z^*)] dx = 0$$

c'est-à-dire

$$\int_X \sigma z^* w dx = \int_X w^* \psi dx$$

Or,

$$\begin{aligned} \int_X \sigma z^* w dx &= \int_X (\sigma w)(x') \left(\int_X g(x, x') \varphi(x) dx \right) dx' \\ &= \int_X \varphi(x) \left(\int_X g(x, x') (\sigma w)(x') dx' \right) dx \\ &= \int_X \varphi(x) E(x) dx \end{aligned}$$

d'où (1.5).

C.Q.F.D.

Pour évaluer les coefficients $m_{K,i;K',j}$ de la matrice M , on applique le lemme 1.1 avec :

$$\psi = \delta_{x_{K',j}} \quad \text{et} \quad \varphi = \varphi_{K,i}$$

d'où

$$(1.9) \quad m_{K,i;K',j} = \int_0^\infty \exp\left(-\int_0^{s'} \sigma(G(s''; x_{K',j})) ds''\right) 1_X(G(s'; x_{K',j})) \sigma \varphi_{K,i}(G(s'; x_{K',j})) ds'$$

avec

$$\varphi_{K,i}(x') = \int_K g(x, x') \varphi_{K,i}(x) dx$$

autrement dit, $\varphi_{K,i} = F^* \varphi_{K,i}$ où F^* est l'opérateur adjoint de F .

Remarque 1 : Interprétation de l'équation (1.1)

Afin de donner une interprétation probabiliste à l'équation (1.1), nous supposons que :

$$(1.10) \quad c(x') \equiv \int_X g(x, x') dx \leq 1 \quad \forall x' \in X$$

Si la donnée f est positive la solution u de (1.1) est également positive. On peut l'interpréter comme une densité de "particules", f s'interprétant comme une source. Une particule issue de y suit alors la caractéristique $s \rightarrow G(s; y)$ issue de y , jusqu'à ce qu'elle subisse une "collision" en un point $x' \equiv G(t; y)$ où t est obtenu en échantillonnant la fonction de répartition

$$R(t) \equiv 1 - \exp\left(-\int_0^t \sigma(G(-s; y)) ds\right)$$

Si $x' \notin X$, la particule sort du système.

Dans le cas contraire, elle subit une collision en x' , et, soit elle est absorbée avec une probabilité $1 - c(x')$, soit elle saute de x' à $x \in X$ où x est obtenu en échantillonnant la densité de probabilité

$$g(x, x')/c(x').$$

■

Remarque 2 : Evaluation du bilan

En intégrant l'équation (1.1) pour $x \in X$, on obtient après intégration par parties :

$$\int_{\partial X_+} (a_i n_i) u + \int_X (1 - c) \sigma u dx = \int_X f dx$$

où c est encore défini par (1.10) et n_i désigne le vecteur unitaire de la normale extérieure à ∂X . Cette relation est sous la forme

$$\text{fuite} + \text{absorption} = \text{source externe.}$$

La méthode que nous venons de décrire permet très facilement d'évaluer chacun des termes de cette relation.

En effet, à la première itération, on a :

$$\sum_K \sum_i \alpha_{K,i}^0 = \int_X f dx = \text{source externe.}$$

Considérons maintenant la particule émise du point $y \equiv x_{K',j}$ et de poids $\alpha \equiv \alpha_{K',j}^0$, qui suit la caractéristique $s \longrightarrow G(s; y)$, pour $s \in [0, t]$, où t désigne son "instant" de sortie de X .

Une fraction

$$F_X \equiv \exp\left(-\int_0^t \sigma(G(s; y)) ds\right)$$

de ce poids α^0 sortira sans collision.

L'autre partie

$$1 - \exp\left(-\int_0^t \sigma(G(s; y)) ds\right)$$

se divis. en

$$\int_0^t \sigma(G(s; y)) c(G(s; y)) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(s'; y)) ds'\right) ds$$

qui sera réémise et

$$R_X \equiv \int_0^t \sigma(G(s; y)) (1 - c(G(s; y)) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(s'; y)) ds'\right)) ds$$

qui sera absorbée.

Comme

$$\sum_i \varphi_{K,i} = 1_K \quad \Rightarrow \quad \sum_K \sum_i \phi_{K,i}(x') = c(x')$$

on vérifie que la fraction réémise est égale à

$$\sum_K \sum_i m_{K,i;K',j}$$

En pratique lors de la poursuite de la particule issue du point $y \equiv x_{K',j}$, on ne se contente pas d'évaluer les $m_{K,i;K',j} \alpha^0$ qui sont les fractions de cette particule à rémettre du point $x_{K,i}$ à l'itération suivante.

On évalue aussi des quantités du type $R_x \cdot \alpha^0$ et $F_x \cdot \alpha^0$ qui sont en l'occurrence les contributions de la particule à la fuite globale et à l'absorption globale.

En sommant toutes ces contributions pour $K' \in \mathcal{C}_h$ et $j \in \{1, \dots, d\}$ et pour toutes les itérations $n \geq 0$ on obtient ainsi une estimation de la fuite et de l'absorption obtenue.

L'absorption étant une quantité de la forme $\int_X z f^* dx$ avec f^* régulier (*), cette estimation est en $O(h^S)$ (voir § 1).

Par différence, la fuite ainsi estimée est également une estimation en $O(h^S)$ de la fuite exacte.

Notons que, en pratique, les itérations sont stoppées à un entier N tel que

$$\text{résidu} \equiv \sum_N \sum_i \alpha_{K,i}^N \leq \varepsilon.$$

En pratique, la fuite et la capture estimée vérifient donc (aux erreurs d'arrondi près)

$$\text{fuite} + \text{capture} + \text{résidu} = \text{source totale}.$$

La précision du bilan dépend donc du nombre d'itérations qui dépend fortement de la valeur choisie pour ε .



Remarque 3 : Evaluation de u

On suppose $\sigma(x) > 0, \forall x \in X$.

On vérifie que l'opérateur Q^* défini par

$$(Q^* w)(y) = \int_0^\infty w(G(s; y)) 1_X(G(s; y)) \sigma(G(s, y)) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(s'; y)) ds'\right) ds$$

est l'adjoint de Q , autrement dit que :

$$\int_X (Qz) w dx = \int_X z (Q^* w) dy \quad \forall w$$

Choisissons $w(x) = 1_A(x)/\sigma(x)$ où $A \subset X$ est donné.

Puisque $Qz = \sigma u$, on a, en posant $f^* = Q^* w$

$$\int_A u dx = \int_X z f^* dy$$

Comme

$$\sum_K \sum_i \alpha_{K,i} f^*(x_{K,i})$$

est une approximation de

$$\int_X z f^* dx,$$

on en déduit que

$$(1.11) \quad \sum_K \sum_i \alpha_{K,i} \int_0^\infty 1_A(G(s; x_{K,i})) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(s'; x_{K,i})) ds'\right) ds$$

est une approximation de

$$\int_A u dx.$$

En choisissant $w(x) = \frac{\zeta_\varepsilon(x_0 - x)}{\sigma(x)}$ où $\zeta_\varepsilon(y)$ est une approximation régulière de la mesure de Dirac à l'origine, on en déduit d'autre part que

$$(1.12) \quad \sum_K \sum_i \alpha_{K,i} \int_0^\infty \zeta_\varepsilon(x_0 - G(s; x_{K,i})) 1_X(G(s; x_{K,i})) \exp\left(-\int_0^s \sigma(G(s'; x_{K,i})) ds'\right) ds$$

est une approximation de

$$u_\varepsilon(x_0) \equiv \int_X \zeta_\varepsilon(x_0 - x) u(x) dx$$

qui est une approximation de x_0 pour ε assez petit, lorsque x_0 est un point intérieur de X .

2 - APPLICATION AU CAS 1-D SPHERIQUE

Il s'agit de résoudre :

$$(2.1) \quad \frac{\partial}{\partial r} (\mu u) + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1 - \mu^2}{r} u \right) + \sigma u = F(\sigma u) + f$$

où $u \equiv u(r, \mu, E)$, pour $r \in [0, R]$, $\mu \in [-1, +1]$ et $E \geq 0$.

L'opérateur F est de la forme :

$$(2.2) \quad (Fw)(r, \mu, E) = \int_0^\infty dE' \int_{-1}^{+1} g(r, \mu, E, \mu', E') w(r, \mu', E') d\mu'$$

où le noyau $g(r, \mu, E, \mu', E')$ s'interprète comme la probabilité pour une particule incidente d'énergie E' , de cosinus directeur μ' et ayant une collision en r de se retrouver après cette collision avec une énergie E et un cosinus directeur μ .

Dans le cas multigroupe, le paramètre E est restreint à un ensemble \mathcal{E} de valeurs discrètes et l'intégrale en E' est remplacée par une somme discrète.

L'équation (2.1) est un cas particulier de (1.1) avec $d = 3$
 $X = [0, R] \times [-1, +1] \times [0, \infty[$, $x = \{r, \mu, E\}$

$$a_1(x) \equiv \mu, \quad a_2(x) \equiv (1 - \mu^2)/r, \quad a_3(x) \equiv 0.$$

L'équation des caractéristiques est donc :

$$(2.3) \quad \begin{cases} \frac{dr}{ds} = \mu \\ \frac{d\mu}{ds} = \frac{1 - \mu^2}{r} \end{cases}$$

On montre facilement que si $y = \{r_0, \mu_0, E_0\}$, alors $G(s; y) = \{r(s), \mu(s), E(s)\}$ avec

$$(2.4) \quad \begin{cases} r(s) = (r_0^2 + 2r_0\mu_0 s + s^2)^{1/2} \\ \mu(s) = (r_0\mu_0 + s)/r(s) \\ E(s) = E_0 \end{cases}$$

et que

$$J(s; y) = (r_0/r(s))^2.$$

On choisira les éléments K de la triangulation \mathcal{T}_h de l'espace des phases X de la façon suivante. On prendra :

$$K = A \times B \times C$$

avec A, B, C intervalles vérifiant $A \subset [0, R], B \subset [-1, +1], C \subset [0, \infty[$.

Dans le cas multigroupe, on choisira

$$K = A \times B \times \{E_1\}$$

où $E_1 \in \mathcal{E}$. Dans ce cas il n'y aura aucune erreur d'approximation en énergie (puisque celles-ci sont déjà discrétisées).

Nous allons détailler le calcul des éléments de la matrice M dans le cas multigroupe. Pour cela, nous supposerons que le noyau g est de la forme suivante (cf. [5] p. 226) :

$$(2.5) \quad g(r, \mu, E, \mu', E') = \sum_{\ell=0}^{\ell_0} a(r, E, E') P_{\ell}(\mu) P_{\ell}(\mu')$$

où ℓ_0 est un entier donné appelé degré d'anisotropie et P_{ℓ} le polynôme de Legendre d'ordre ℓ .

Les images $\phi_{K,i}$ des fonctions de base $\psi_{K,i}$ par l'opérateur F^* , et intervenant dans (1.9) vérifient donc :

$$\begin{aligned} \phi_{K,i}(r, \mu, E) &= \sum_{E' \in \xi} \int_{-1}^{+1} g(r, \mu', E', \mu, E) \psi_{K,i}(r, \mu', E') d\mu' \\ &= \sum_{\hat{\lambda}} \sum_{E'} a_{\hat{\lambda}}(r, E', E) P_{\hat{\lambda}}(\mu) \int_{-1}^{+1} P_{\hat{\lambda}}(\mu') \psi_{K,i}(r, \mu', E') d\mu' \end{aligned}$$

La fonction $\psi_{K,i}(r, \mu, E)$ est nulle pour $\{r, \mu, E\} \notin K$, et la fonction $\psi_{K,i}(r, \mu, E_1)$ est un polynôme de degré 0 ou 1 en r, μ pour $\{r, \mu\} \in A \times B$.

On a donc :

$$(2.6) \quad \phi_{K,i}(r, \mu, E) = \begin{cases} \sum_{\hat{\lambda}} a_{\hat{\lambda}}(r, E_1, E) P_{\hat{\lambda}}(\mu) \int_B P_{\hat{\lambda}}(\mu') \psi_{K,i}(r, \mu, E_1) d\mu' & \text{si } r \in A \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

La section efficace $\sigma \equiv \sigma(r, E)$ et les probabilités $g(r, \mu, E, \mu', E')$ dépendent du matériau et de sa densité. Nous les supposerons constantes par morceaux, sur les intervalles A utilisés pour définir la triangulation \mathcal{T}_h . La restriction à $r \in A$ de la fonction $\phi_{K,i}(r, \mu, E)$ est donc un polynôme de degré 0 ou 1 en r et un polynôme de degré ℓ_0 en μ .

Autrement dit $\phi_{K,i}$ est de la forme :

$$(2.7) \quad \phi_{K,i}(r, \mu, E) = 1_A(r) \sum_{k=0}^m \sum_{\ell=0}^{\ell_0} d_{k\ell}(E) r^k \mu^\ell$$

Ayant ainsi indiqué comment on déterminait les fonctions $\phi_{K,i}$, nous allons à présent expliquer comment calculer les coefficients $m_{K,i;K',j}$ de la matrice M à l'aide de la formule (1.9).

La fonction $\phi_{K,i}$ étant d'après (2.7) une combinaison linéaire de termes de la forme :

$$i_A(r) r^k \mu^\lambda$$

regardons ce que donne la formule (1.9) lorsque l'on remplace $\phi_{K,i}$ par l'un de ces termes.

Supposant $x_{K',j} = \{r_0, \mu_0, E_0\}$, on sait que $G(s; y) = \{r(s), \mu(s), E_0\}$ où $r(s), \mu(s)$ sont données par (2.4). En premier lieu, on détermine donc l'intervalle $[s_1, s_2]$ tel que $r(s) \in A \Leftrightarrow s \in [s_1, s_2]$.

On obtient finalement :

$$(2.8) \quad m_{K,i;K',j} = \sum_{k=0}^m \sum_{\lambda=0}^{\lambda_0} d_{k\lambda}(E_0) \int_{s_1}^{s_2} (r(s))^k (\mu(s))^\lambda \sigma(r(s), E_0) \exp\left(-\int_0^s \sigma(r(s'), E_0) ds'\right) ds$$

En réalité, d'après les hypothèses que nous avons faites, $\sigma(r(s), E_0)$ est constant pour $s \in [s_1, s_2]$, et cette formule est donc plus simple qu'il n'y paraît au premier abord.

Cependant l'intégrale n'est exactement calculable que dans le cas $k = 1 = 0$, auquel cas elle vaut :

$$(2.9) \quad F_A \equiv \exp\left(-\int_0^{s_1} \sigma(r(s'), E_0) ds'\right) - \exp\left(-\int_0^{s_2} \sigma(r(s'), E_0) ds'\right)$$

Dans le cas contraire, on doit l'évaluer à l'aide d'une formule d'intégration numérique : nous avons utilisé la formule de Gauss à 2 ou 3 points, en vérifiant a posteriori que les résultats étaient peu sensibles à l'ordre de la formule utilisée.

Pour minimiser les calculs, il semble souhaitable, au vu des formules (2.4) et (2.8), de calculer tous les éléments $m_{K,i;K',j}$ pour K' et j fixés. En effet, à $\{r_0, \mu_0\}$ fixé, on suit une caractéristique donnée en utilisant les formules (2.3).

Ainsi, dans notre méthode, tout se passe comme si à chaque itération sur la source (voir Introduction), on émettait un certain nombre de particules (autant que de points $x_{K',j}$ dans l'espace des phases) suivant les caractéristiques. Soit $\alpha_{K',j}^n$ le poids de la particule partant du point $x_{K',j}$ à l'itération n , on calculera toutes les contributions $m_{K,i;K',j}$ de cette particule aux poids $\alpha_{K,i}^{n+1}$ à émettre à l'itération suivante (voir formule (0.2)).

Comme dans la méthode de Monte-Carlo, le calcul implique donc l'évaluation d'une "trajectographie", c'est-à-dire la poursuite de particules sur un maillage permettant d'évaluer les intervalles $[s_1, s_2]$ successifs.

Il y a ensuite une partie spécifique de la méthode consistant à évaluer des intégrales plus ou moins complexes le long de ces portions de trajectoires (voir (2.8)).

Remarque 4 : Evaluation du bilan

La quantité F_A définie en (2.9) représente la fraction du poids de la particule issue du point $y \equiv \{r_0, \mu_0, E_0\}$ ayant une collision dans A .

La quantité

$$c(r, E') \equiv \sum_{E \in \mathcal{E}} \int_{-1}^{+1} g(r, \mu, E, \mu', E') d\mu = 2 \sum_{E \in \mathcal{E}} a_0(r, E, E')$$

est la probabilité pour une particule d'énergie E' de survivre à une collision en $r \in [0, R]$.

Soit $c_A(E')$ la valeur (constante) de cette quantité sur la maille A . La quantité

$$(1 - c_A(E_0)) F_A$$

est donc la fraction du poids de la particule issue du point y de l'espace des phases qui sera absorbée dans A .

En sommant sur toutes les particules émises à toutes les itérations, on peut ainsi évaluer l'absorption dans la maille A.

La fuite peut être évaluée en utilisant la remarque 2 ainsi que l'absorption globale.

■

3 - APPLICATION AU CAS 2-D AXISYMETRIQUE

Il s'agit de résoudre :

$$(3.1) \quad \frac{\partial}{\partial r} (\xi u) + \frac{\partial}{\partial z} (\mu u) - \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{\nu}{r} u \right) + \sigma u = F(\sigma u) + S$$

où $u \equiv u(r, z, \omega, \mu, E)$ (*)

$$\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \omega$$

$$\nu = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \omega$$

pour $(r, z) \in D$, où D est un domaine bidimensionnel donné, $\omega \in [0, \pi]$,
 $\mu \in [-1, +1]$.

Nous nous placerons dans le cas multigroupe, $E \in \mathcal{E}$, où \mathcal{E} est un ensemble discret.

Nous sommes bien dans un cas particulier de l'équation (1.1) avec
 $d = 5$, $X = D \times [0, \pi] \times [-1, +1] \times \mathcal{E}$

$$\begin{aligned} a_1(x) &= \xi \equiv \sqrt{1 - \mu^2} \cos \omega \\ a_2(x) &= \mu \\ a_3(x) &= -\frac{\nu}{r} = -\frac{1}{r} \sqrt{1 - \mu^2} \sin \omega \\ a_4(x) &= 0 \\ a_5(x) &= 0 \end{aligned}$$

pour $x = (r, z, \omega, \mu, E)$.

(*) u est égal à r fois le flux angulaire classique.

L'équation des caractéristiques s'écrit :

$$(3.2) \left\{ \begin{array}{l} \frac{dr}{ds} = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \omega \\ \frac{dz}{ds} = \mu \\ \frac{d\omega}{ds} = -\frac{1}{r} \sqrt{1 - \mu^2} \sin \omega \\ \frac{d\mu}{ds} = 0 \\ \frac{dE}{ds} = 0 \end{array} \right.$$

On obtient facilement pour $y \equiv \{r_0, z_0, \omega_0, \mu_0, E_0\}$

$$G(s ; y) = \{r(s), z(s), \omega(s), \mu(s), E(s)\}$$

avec

$$(3.3) \left\{ \begin{array}{l} r(s) = (r_0^2 + 2r_0 s \cos \omega_0 \sqrt{1 - \mu_0^2} + s^2(1 - \mu_0^2))^{1/2} \\ z(s) = z_0 + \mu_0 s \\ \omega(s) = \text{Arcos}((r_0 \cos \omega_0 + s \sqrt{1 - \mu_0^2})/r(s)) \\ \mu(s) = \mu_0 \\ E(s) = E_0 \end{array} \right.$$

Pour définir un maillage \mathcal{T}_h de l'espace des phases X, on définit tout d'abord un maillage du domaine spatial D puis un maillage pour la demi-sphère $[0, \pi] \times [-1, +1]$ (*). Les mailles de \mathcal{T}_h sont alors choisies de la forme $K = A \times B \times \{E_1\}$ où A est une maille de D, B une maille de la demi-sphère et $E_1 \in \mathcal{E}$.

(*) Le point (ξ, ν, μ) décrit en effet une 1/2 sphère de \mathbb{R}^3 si $\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \omega$, $\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \omega$, $\omega \in [0, \pi]$, $\mu \in [-1, +1]$

Nous allons ici aussi détailler le calcul des éléments de la matrice M.

Nous nous placerons pour simplifier dans le cas de collision isotrope, c'est-à-dire dans le cas où l'opérateur F est de la forme :

$$(3.4) \quad (Fw)(r, z, \omega, \mu, E) = \sum_{E' \in \mathcal{E}} c(r, z, E, E') \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \int_{-1}^{+1} w(r, z, \omega', \mu', E') d\omega' d\mu'$$

Conformément au § 1, la première chose à faire est d'évaluer les images $\phi_{K,i}$ des fonctions de base $\varphi_{K,i}$ par l'application F^* . On a :

$$\phi_{K,i}(r, z, \omega, \mu, E) = \sum_{E'} c(r, z, E', E) \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \int_{-1}^{+1} \varphi_{K,i}(r, z, \omega', \mu', E') d\omega' d\mu'$$

d'où, en remarquant que $\varphi_{K,i}(r, z, \omega', \mu', E')$ est nul sauf si $(r, z) \in A$, $(\omega', \mu') \in B$ et $E' = E_1$, et d'autre part qu'il est indépendant de E_1 , on obtient :

$$\phi_{K,i}(r, z, \omega, \mu, E) = 1_A(r, z) c_A(E_1, E) \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \int_{-1}^{+1} \varphi_{K,i}(r, z, \omega', \mu', E') d\omega' d\mu'$$

où $c_A(E_1, E)$ désigne la valeur (supposée constante) sur A de $c(r, z, E_1, E)$.

La fonction $\phi_{K,i}$ est donc constante en ω, μ et a la même dépendance polynômiale en r, z que $\varphi_{K,i}$.

Supposant $x_{K',j} = \{r_0, z_0, \omega_0, \mu_0, E_0\}$, on sait que $G(s; x_{K',j}) = \{r(s), z(s), \omega(s), \mu_0, E_0\}$ où $r(s), z(s)$ et $\omega(s)$ sont donnés par (3.3). On est alors en mesure d'évaluer l'élément $m_{K,i;K',j}$ de la matrice M à l'aide de la formule (1.9).

Soit $[s_1, s_2]$ l'intervalle tel que $(r(s), z(s)) \in A \Leftrightarrow s \in [s_1, s_2]$ et $d_{k\ell}$ les coefficients tels que :

$$\int \varphi_{K,i}(r, z, \omega', \mu') d\omega' d\mu' = \sum_{k\ell} d_{k\ell} r^k z^\ell,$$

on obtient, en appelant σ_0 la valeur constante de $\sigma(r, z, E_0)$ sur A,

$$(3.5) \quad m_{K,i;K',j} = c_A(E_1, E_0) \sum_{k\ell} d_{k\ell} \int_{s_1}^{s_2} (r(s))^k (z(s))^\ell \sigma_0 e^{-\sigma_0(s-s_1)} ds \exp\left(-\int_0^{s_1} \sigma(r(s'), z(s'), E_0) ds'\right)$$

Ici encore, l'intégrale de s_1 à s_2 n'est pas exactement calculable dans tous les cas (en particulier si $k \neq 0$), on fera donc appel à une formule d'intégration numérique de Gauss à 2 ou 3 points.

Comme dans le cas sphérique, il est souhaitable de calculer tous les éléments $m_{K,i;K',j}$ pour K', j fixé.

En effet, c'est en suivant la projection sur le maillage spatial de la caractéristique $\{r(s), z(s), \omega(s), \mu_0, E_0\}$ issue du point $x_{K',j} = \{r_0, z_0, \omega_0, \mu_0, E_0\}$ que l'on déterminera les intervalles $[s_1, s_2]$ successifs.

Remarque 5 : Evaluation du bilan

La quantité

$$F_A \equiv (1 - e^{-\sigma_0(s_2-s_1)}) \exp\left(-\int_0^{s_1} \sigma(r(s'), z(s'), E_0) ds'\right)$$

représente la fraction du poids de la particule issue du point

$y \equiv \{r_0, z_0, \omega_0, \mu_0, E_0\}$ ayant une collision dans A.

La quantité

$$c_A(E') \equiv \sum_{E \in \xi} c_A(E, E')$$

étant la probabilité pour une particule d'énergie E' de survivre à une collision dans A,

$$(1 - c_A(E_o)) F_A$$

est la fraction du poids de la particule issue de y qui sera absorbée dans A.

Finalement, en sommant sur toutes les particules émises à toutes les itérations, on peut évaluer l'absorption dans la maille A.

On peut aussi évaluer l'absorption globale et la fuite en utilisant la remarque 2.

■

4 - IMPLEMENTATION

On s'est contenté de traiter le cas monocinétique isotrope, en 1-D sphérique, et en 2-D axisymétrique.

En sphérique, le maillage choisi pour $[0, R] \times [-1, +1]$ était choisi comme le produit tensoriel d'un maillage de $[0, R]$ en intervalles équidistants, et d'un maillage de $[-1, +1]$ à intervalles soit équidistants, soit non équidistants avec un raffinement au voisinage de ± 1 . On a traité le cas de degré 0 avec $d' = 1$; c'est-à-dire un seul point $x_{K,1}$ situé au centre des mailles du domaine $[0, R] \times [-1, +1]$.

On a aussi traité le cas de degré 1 en r et μ ($d' = 4$). Il y a alors 4 fonctions de base $(\varphi_{K,i})_{1 \leq i \leq 4}$ sur chaque maille, chacune valant 1 en l'un des 4 points de Gauss et zéro aux 3 autres.

Les programmes ainsi mis au point font intervenir environ 120 instructions Fortran pour le degré 0 et 180 instructions pour le degré 1.

En 2-D axisymétrique, nous nous sommes restreint au cas d'un maillage engendré par 2 familles de droites parallèles aux axes, c'est-à-dire à des éléments rectangulaires à côtés parallèles aux axes. En effet, dans ce cas, la trajectographie (c'est-à-dire la détermination des intervalles $[s_1, s_2]$ successifs) est beaucoup plus facile à programmer. Ce choix permettait de vérifier plus rapidement que la méthode donnait bien les résultats prédits par la théorie. Mais évidemment, des tests en maillage non rectangulaire restent à mener à bien.

En ce qui concerne la complexité des programmes mis au point, on compte environ 250 instructions Fortran pour le cas de degré zéro et 320 pour le cas de degré 1.

En ce qui concerne le maillage de la 1/2 sphère $[0, \pi] \times [-1, +1]$, nous avons fait un choix bien classique [6] (voir plus loin fig. 3.a).

Dans le cas du maillage S_{2n} , la 1/2 sphère $[0, \pi] \times [-1, +1]$ est tout d'abord découpée en $2n$ bandes $[0, \pi] \times [\mu_{\ell-1}, \mu_{\ell}]$. Pour $1 \leq \ell \leq n$,

chacune de ces bandes est ensuite découpée en 2ℓ éléments aux de type $[\omega_0, \omega_1] \times [\mu_{\ell-1}, \mu_{\ell}]$.

Pour $n+1 \leq \ell \leq 2n$, on procède par symétrie.

Les ordonnées μ_{ℓ} sont déterminées de façon que tous ces éléments aient la même surface.

Les programmes ainsi mis au point en 2-D sont relativement simples : on compte environ 250 instructions Fortran pour le degré zéro et 320 pour le cas de degré 1.

Le choix d'un maillage spatial rectangulaire permet d'avoir une trajectographie particulièrement simple (environ 50 instructions Fortran).

Pour faciliter la mise au point on a gardé des programmes compatibles CDC-CRAY, et les performances sur CRAY s'en ressentent.

La réalisation d'un programme CRAY vectorisé dans le cas de maillages quadrangulaires quelconques représente un gros travail : on peut estimer à environ 1 500 instructions Fortran la taille d'un programme Monte-Carlo analogue (cf. [7]).

5 - RESULTATS NUMERIQUES

5.1 - Résultats en 1-D sphérique

Nous avons résolu le problème sous-critique suivant : une sphère de rayon unité est remplie d'un matériau de section efficace $\sigma = 1$ répartie en $1/4$ d'absorption et $3/4$ de diffusion isotrope. Les neutrons sont créés par une source (monoénergétique) homogène répartie dans la sphère. Tous les neutrons sortant de la sphère sont perdus (condition aux limites absorbantes). On cherche à déterminer la fuite, l'absorption et le flux scalaire ϕ à l'intérieur de la sphère. On a :

$$\phi(r) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \psi(r, \mu) d\mu$$

où ψ est le flux angulaire solution de

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} + \sigma \psi = c \sigma \phi + S$$

pour $0 \leq r \leq R$, $-1 \leq \mu \leq 1$, avec

$$R = 1, \sigma = 1, c = 3/4, S = 1.$$

On vérifie que $u = r^2 \psi$ est bien solution d'une équation de type (2.1), que l'on peut donc résoudre par la méthode décrite aux § 1 et 2.

En ce qui concerne l'intervalle $[0, R]$ nous avons utilisé des maillages uniformes notés E_n faisant intervenir n mailles (avec $n = 2, 5, 8, 10, 20$). Pour l'intervalle $[-1, +1]$ nous avons utilisé soit un maillage uniforme à n mailles (avec $n = 4, 10, 16, 20$), soit un maillage noté \tilde{A}_{16} , raffiné autour de $[-1, +1]$ et comportant 16 mailles. Les extrémités des 8 premières mailles (intervalle $[0, 1]$) sont :

$$0., 0.3, 0.6, 0.8, 0.9, 0.94, 0.97, 0.99, 1. .$$

La fuite et l'absorption sont évaluées comme indiqué à la Remarque 3. Les résultats concernant ces deux grandeurs sont rassemblés dans le

Tableau 1. On constatera que la somme fuite + capture n'est pas rigoureusement égale à :

$$\int_X f dr d\mu = \int_0^1 \int_{-1}^{+1} r^2 dr d\mu = 2/3,$$

qui est la source totale. [En réalité nous avons négligé un facteur $8\pi^2$.

en effet, physiquement, on devait évaluer :

$$4\pi \int_0^1 2\pi \int_0^{+1} S(r, \mu) r^2 dr d\mu = \frac{16}{3} \pi^2]$$

En effet, au bout de 10 itérations on a un résidu :

$$\sum_K \sum_i \alpha_{K,i}^N \simeq .35 \cdot 10^{-4}$$

d'où l'explication (voir Remarque 2).

La solution de référence est un calcul DSN convergé (S8, 10 mailles).

On constate une amélioration de précision importante quand on passe du degré 0 au degré 1 avec les points de Gauss. En revanche, il n'en est pas de même, lorsque l'on utilise d'autres points que les points de Gauss. En l'occurrence, pour l'essai qui figure dans le tableau 1 (4 points "milieux") on a choisi les 4 points obtenus en prenant les centres des rectangles obtenus lorsqu'on coupe en 4 chaque maille de l'espace des phases.

En ce qui concerne le coût de ces calculs, on notera qu'à maillage égal le degré 1 est environ 5 fois plus cher que le degré 0. En effet, non seulement il y a 4 fois plus de particules mais pour chaque particule il y a en plus l'intégrale

$$\int_{s_1}^{s_2} r(s) \sigma e^{-\sigma s} ds$$

à évaluer par intégration numérique (voir (2.8) où $m = 1$ et $\ell_0 = 0$).

Degré	Maillage	n_1	n_2	Fuite	Absorption
Zéro	$E_5 \otimes A_{10}$	50	10	.538445	.128184
	$E_{10} \otimes A_{10}$	100	10	.540883	.125748
	$E_{10} \otimes \tilde{A}_{16}$	160	10	.540810	.125822
	$E_{20} \otimes A_{20}$	400	10	.541415	.125217
4 points ¹ "milieux"	$E_{10} \otimes \tilde{A}_{16}$	640	10	.5420	.1247
4 points ¹ de Gauss	$E_2 \otimes A_4$	32	10	.540621	.126011
	$E_5 \otimes A_{10}$	200	10	.541526	.125106
	$E_8 \otimes A_{16}$	512	10	.541616	.125016
	$E_{10} \otimes A_{10}$	400	10	.541636	.124996
	$E_{10} \otimes A_{20}$	800	10	.541636	.124996
	$E_{10} \otimes \tilde{A}_{16}$	640	10	.541638	.124994
Solution de référence —>				.541639	.125028

Tableau 1 : Précision de l'évaluation de la fuite et de l'absorption avec la méthode particulière, degré 0 et 1 en 1-D sphérique
 (n_1 = nombre de particules émises par itération,
 n_2 = nombre d'itérations, $n_1 \times n_2$ est donc le nombre total de particules poursuivies)

N° du test	Nombre de particules	Fuite	Absorption
1	1 000	.5593	.1073
2	4 000	.5442	.1225
3	4 000	.5372	.1295
4	16 000	.5404	.1263

Tableau 2 : Evaluation de la fuite et de l'absorption à l'aide de la méthode Monte-Carlo sur le même problème

Le coût du calcul $E_{10} \otimes A_{10}$ en degré 1 est de l'ordre de 6 sec. de CDC 75J.

Pour le degré zéro, entre les calculs $E_{10} \otimes A_{10}$ et $E_{20} \otimes A_{20}$, l'erreur est bien divisée par 4, comme le prédit la théorie qui indique une erreur en $O(h^2)$, pour le degré zéro.

Pour le degré 1, l'examen des résultats montre que l'erreur sur la fuite est bien en $O(h^3)$ avec $s = 3$ comme le prédit également la théorie.

Le tableau 2 montre les résultats obtenus pour la fuite et l'absorption en Monte-Carlo. On voit que les résultats sont beaucoup plus imprécis, même lorsque le nombre de particules N est choisi élevé.

Ceci tient au fait que la fuite donnée par la méthode de Monte-Carlo est une variable aléatoire dont l'écart type est en $O(\sqrt{N})$. L'erreur n'est donc divisée que par 4 lorsque le nombre de particules est multiplié par 16.

Au contraire quand le nombre de particules est multiplié par 16 en méthode particulière, cela revient à diviser h par 4 et l'erreur est donc divisée par 16 en degré zéro et par 64 en degré 1 avec les points de Gauss.

En ce qui concerne le calcul des flux, la situation est tout de même moins brillante, et en particulier au voisinage du centre ($r = 0$).

En effet, la source étant proportionnelle à r^2 (effet de volume), les particules situées au voisinage de $r = 1$ ont les poids les plus forts.

Or, les formules (2.4), donnant l'équation des caractéristiques, montrent que si l'on choisit un maillage angulaire uniforme par exemple A_{10} , aucune de ces particules ne passera au voisinage de $r = 0$.

Mais la principale difficulté vient de ce que la méthode particulière nous fournit non pas ψ mais $u = r^2 \psi$.

Plus précisément, la remarque 3 nous fournit un moyen d'évaluer :

$$\int_A \int_{-1}^{+1} u \, dr d\mu = 2 \int_A \phi r^2 \, dr$$

où A est une maille de la forme $[r_1, r_2]$.

Partant de cette évaluation, on peut obtenir une estimation ϕ_A du flux scalaire au centre de la maille A en divisant par $2(\frac{r_2^3}{3} - \frac{r_1^3}{3})$.

C'est ce que nous avons fait pour tracer les courbes $\phi = \phi(r)$ données sur la figure 1, où l'on s'aperçoit que l'utilisation d'un maillage uniforme pour μ (A_{10} en l'occurrence) ne convient pas : les flux obtenus pour $0 \leq r \leq 1/2$ sont fantaisistes.

C'est pour cette raison que nous avons introduit le maillage \tilde{A}_{16} avec raffinement autour de $\mu = \pm 1$.

Les résultats obtenus en degré zéro avec le maillage $E_{10} \otimes \tilde{A}_{16}$ sont tout à fait convenables.

Ceux obtenus en degré 1 avec le même maillage sont quasiment confondus avec la solution de référence, qui est encore fournie par un calcul DSN.

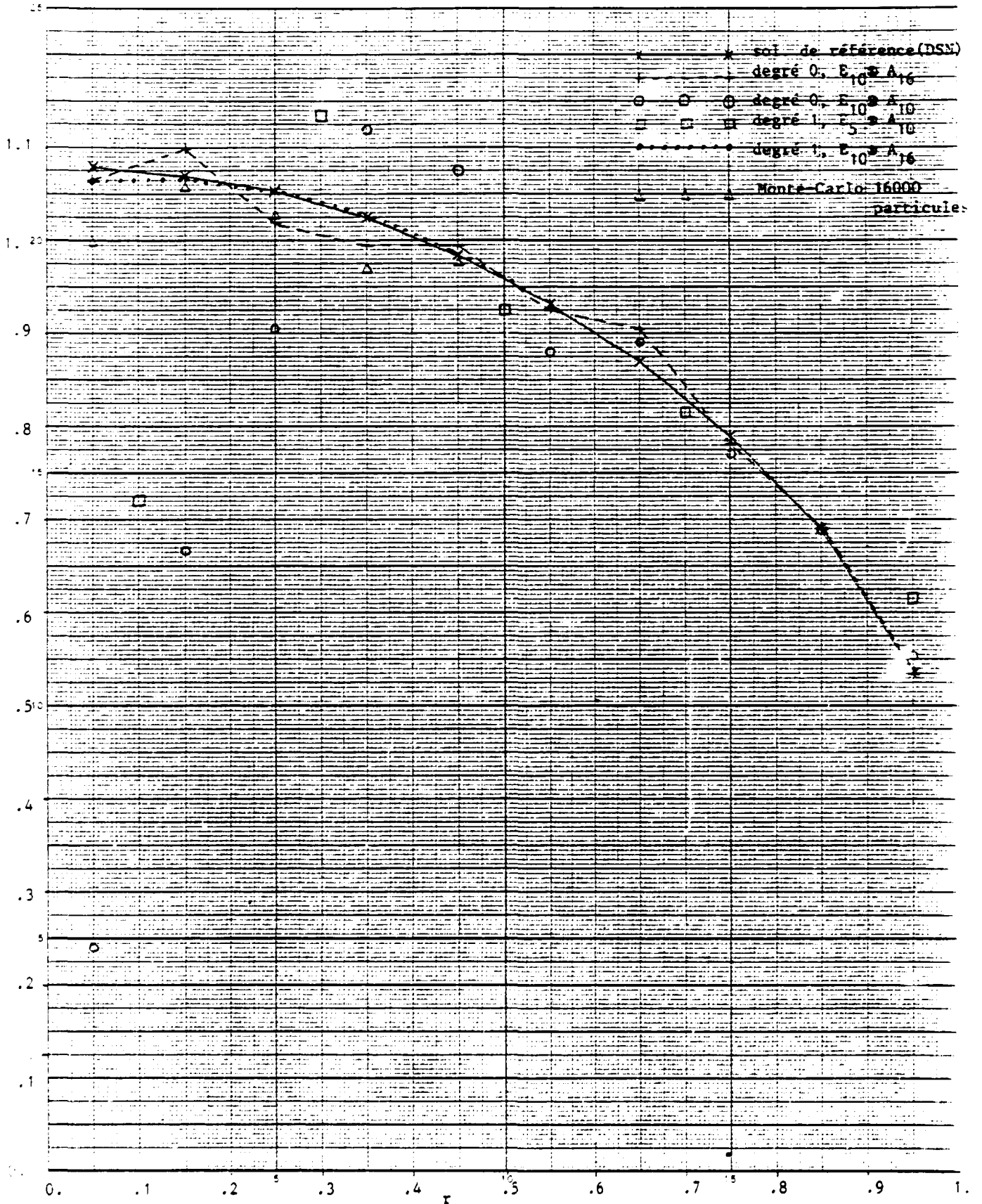
Cela étant, le coût de ce dernier calcul, qui implique la poursuite de 6 400 particules sur le maillage, est beaucoup plus élevé.

La situation est tout de même meilleure que pour la méthode de Monte-Carlo qui avec 16 000 particules donne des résultats encore très fluctuants.

Pour conclure sur ces résultats en 1-D sphérique, on retiendra que la méthode particulière donne des résultats très précis pour les quantités intégrées : $O(h^2)$ en degré zéro, $O(h^3)$ en degré 1 avec les points de Gauss.

Flux scalaire ϕ

Figure 1 - Résultats en 1-D sphérique.



En ce qui concerne les flux, elle donne des résultats convenables après lissage partout sauf au voisinage de l'origine ($r = 0$).

A précision égale, elle est moins chère que le Monte-Carlo mais plus chère que le DSN.

Elle a cependant les avantages du Monte-Carlo et peut facilement traiter, contrairement au DSN, des milieux très absorbants.

En utilisant des maillages se raffinant de plus en plus au voisinage de $\mu = \pm 1$ à mesure que l'on s'éloigne de l'origine (voir fig. 2), cette méthode pourrait d'autre part permettre de traiter des problèmes de propagation à grande distance.

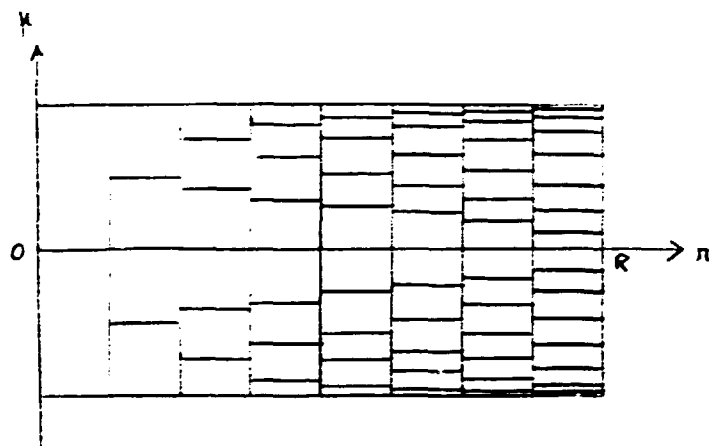


Fig. 2 - Exemple de maillage utilisable pour la propagation à grande distance

5.2 - Résultats en 2-D axisymétrique

Nous avons résolu un problème analogue à celui résolu en 1-D sphérique. Un cylindre de rayon unité et de hauteur double (donc tangent à la sphère unité) est rempli du même matériau de section efficace $\sigma = 1$ avec $c = 3/4$ et diffusion isotrope.

La source est encore monoénergétique homogène et uniformément répartie dans le cylindre. Tous les neutrons sortant du cylindre sont perdus.

On cherche à déterminer la fuite, l'absorption et le flux scalaire ϕ à l'intérieur du cylindre.

On a :

$$\phi(r, z, \omega, \mu) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\omega \int_{-1}^{+1} \varphi(r, z, \omega, \mu) d\mu$$

avec

$$\xi \frac{\partial}{\partial r} \varphi + \mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{v}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \omega} + \sigma \varphi = c\sigma \phi + S$$

pour $(r, z) \in D \equiv [0, 1] \times [-1, +1]$

$$\omega \in [0, \pi]$$

$$\mu \in [-1, +1]$$

avec $\sigma = 1$, $c = 3/4$, $S = 1$.

On vérifie que $u = r\varphi$ est solution de l'équation (2.1) avec $f = rS$, $\mathcal{E} = \{E_0\}$ et $c(r, z, E_0, E_0) \equiv c = 3/4$.
(2.1)

En ce qui concerne D nous avons utilisé des maillages uniformes de type E_m avec m^2 rectangles obtenus en découpant l'intervalle $[0, 1]$ et l'intervalle $[-1, +1]$ en m intervalles égaux.

Pour la 1/2 sphère $[0, \pi] \times [-1, +1]$ nous avons choisi le découpage S_{2n} décrit au § 4 (voir figure 3).

La source totale est égale à :

$$2\pi \int_0^1 r dr \int_{-1}^{+1} dz \int_0^{2\pi} d\omega \int_{-1}^{+1} d\mu = 8\pi^2.$$

Cependant, pour faciliter les comparaisons avec le cas sphérique, nous la supposons normalisée à 1.

Les itérations ont été encore limitées à $N = 10$, ce qui correspond, ici, à un résidu

$$\sum_K \sum_i \alpha_{K,i}^N \simeq 1.0 \cdot 10^{-4}.$$

Dans le tableau 3, on donne les fuites et absorptions calculées par la méthode particulière en degré zéro, degré 1 avec points de Gauss, et degré 2 avec d'autres points que les points de Gauss (en l'occurrence les points $\{1/3, 2/3\} \otimes \{1/3, 2/3\}$).

On constate encore que la somme fuite + absorption + résidu est bien rigoureusement égale à 1.

La solution de référence est un calcul éléments finis discontinus S8 sur le maillage E_7 .

Comme en 1-D sphérique, il y a une différence importante entre le degré 0 et le degré 1. Cependant, on constate que les taux de convergence des deux méthodes sont plus difficiles à apprécier. Il semble qu'on n'obtienne pas tout à fait $O(h^2)$ et $O(h^3)$ comme en 1-D sphérique.

Ceci n'est pas en contradiction avec la théorie puisque le noyau E de l'équation de transport (voir introduction) est plus régulier en 1-D qu'en 2-D.

Pour mémoire, si le taux de convergence était de $O(h^2)$ on obtiendrait des résultats équivalents au Monte-Carlo. En effet, si N désigne le nombre total de particules poursuivies, on a $h \sim N^{-1/4}$, d'où $h^2 \sim N^{-1/2}$.

Degré	Maillage	Nb. total de particules pour-suivies	Fuite	Absorption	Erreur /sol. réf.
Zéro	$E_5 \otimes S_4$	3 000	0.79082	0.20906	.004
	$E_9 \otimes S_{10}$	48 600	0.79248	0.20742	.002
	$E_{15} \otimes S_{12}$	189 000	0.79377	0.20613	.0006
1 points de Gauss	$E_2 \otimes S_4$	7 680	0.79089	0.20900	.004
	$E_3 \otimes S_4$	17 280	0.79268	0.20722	.002
	$E_5 \otimes S_4$	48 000	0.79399	0.20591	.0004
	$E_7 \otimes S_4$	94 080	0.79424	0.20564	.0002
	$E_7 \otimes S_6$	188 160	0.79409	0.20582	.0003
	$E_9 \otimes S_6$	311 040	0.79418	0.20572	.0002
	$E_7 \otimes S_{10}$	470 400	0.79396	0.20594	.0004
1 (1/3, 1/3)	$E_7 \otimes S_6$	188 160	0.79270	0.20719	.002
Monte-Carlo 6 résultats \neq à 48 600 particules chacun			0.79347	0.20653	.001
			0.79345	0.20655	.001
			0.79375	0.20624	.0006
			0.79171	0.20827	.003
			0.79762	0.20238	-.003
			0.79479	0.20521	-.0004
Solution de référence (EFD)			0.794408	0.205591	

Tableau 3 : Evaluation de la fuite et de l'absorption en 2-D axisymétrique : méthode particulaire et méthode Monte-Carlo comparées à la solution de référence (éléments finis discontinus)

Or, on sait que le taux de convergence de la méthode de Monte-Carlo est précisément $O(N^{-1/2})$.

La performance de la méthode de Monte-Carlo est donc située entre celle de la méthode de degré 0 et celle de la méthode de degré 1.

Cependant, à précision égale et à coût égal, on préfère une méthode déterministe (le tableau 3 illustre bien, avec 6 résultats Monte-Carlo, l'inconvénient d'une méthode statistique).

A coût égal, la méthode de degré 1 est plus précise que le Monte-Carlo.

Examinons à présent l'évaluation des flux à l'aide de notre méthode. Sur la figure 2, nous avons tracé $\psi(r, z)$ en fonction de r pour $z = 0$ fixé. Ici encore, on constate une difficulté à bien évaluer la solution au voisinage de $r = 0$, qui tient au fait que la méthode nous donne non pas ψ mais $u \equiv r\psi$.

En particulier, en degré zéro avec maillage $E_9 \otimes E_{10}$, le résultat obtenu présente des oscillations allant jusqu'à 30 % au voisinage de $r = 0$. Il pourrait cependant être nettement amélioré à l'aide d'un lissage.

Pour fixer les idées, on a reporté sur la même figure les flux donnés par 2 calculs Monte-Carlo impliquant le suivi du même nombre de particules que le calcul précédent. Les oscillations sont tout de même moins importantes (de l'ordre de 10 %).

En ce qui concerne les oscillations au voisinage de $r = 0$, le calcul de degré 1 fait pratiquement jeu égal avec le Monte-Carlo.

Pour améliorer la précision au voisinage de $r = 0$, nous avons testé une autre famille de maillages pour la 1/2 sphère $[0, \pi] \times [-1, +1]$ (voir figure 3).

L'idée est de choisir plus de directions au voisinage de $\omega = \pi$. Pour qu'une particule créée dans les couches extérieures du cylindre ait des chances d'aller se promener dans la couche centrale, il faut que sa direction initiale corresponde à $\omega \simeq \pi$.

Flux scalaire \dot{q}

Figure 2- Résultats en 2-D axisymétrique

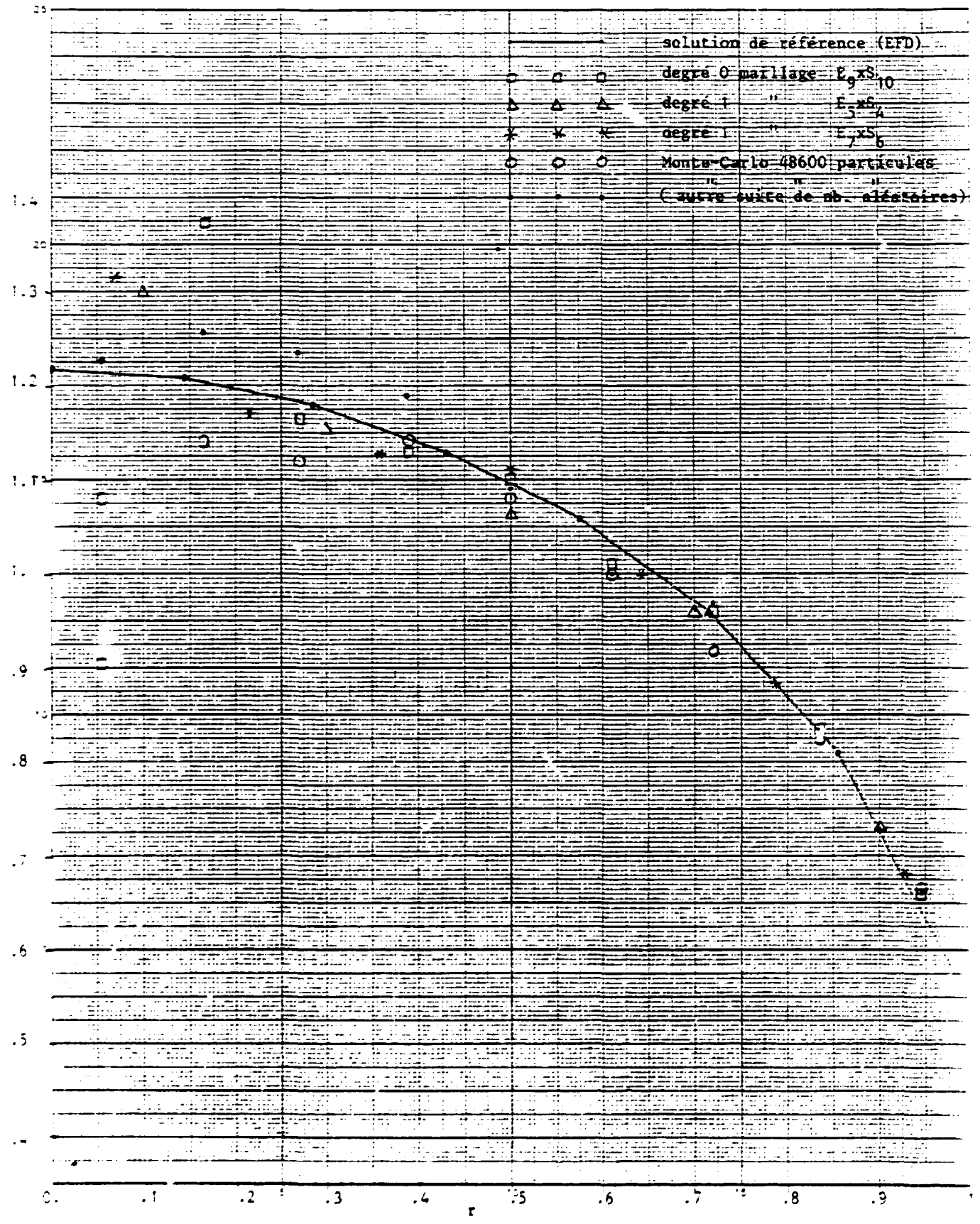
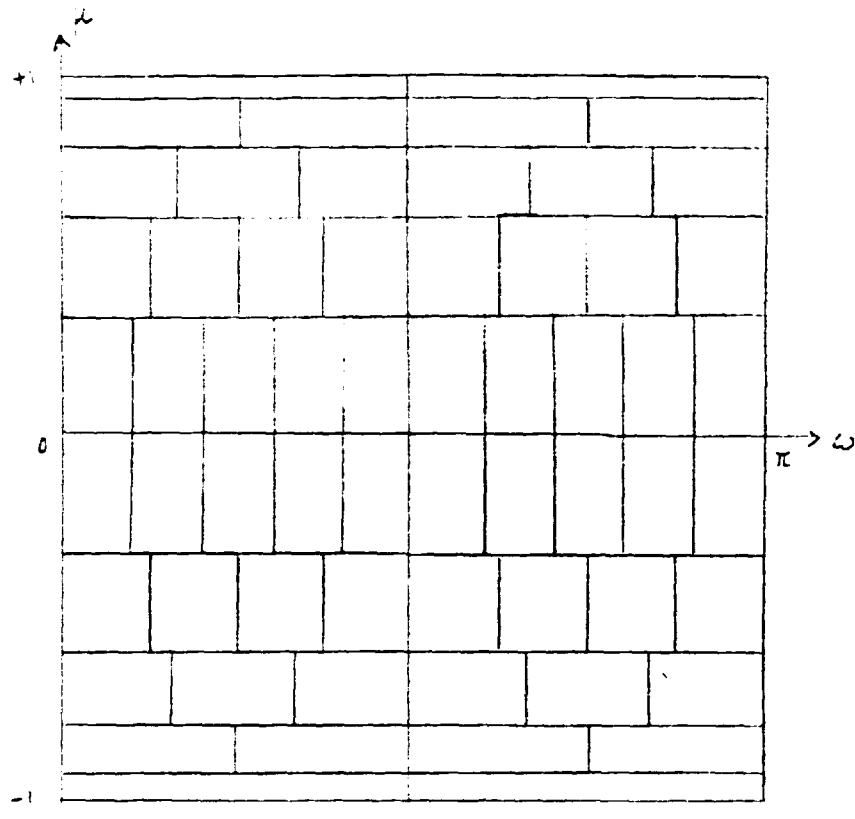
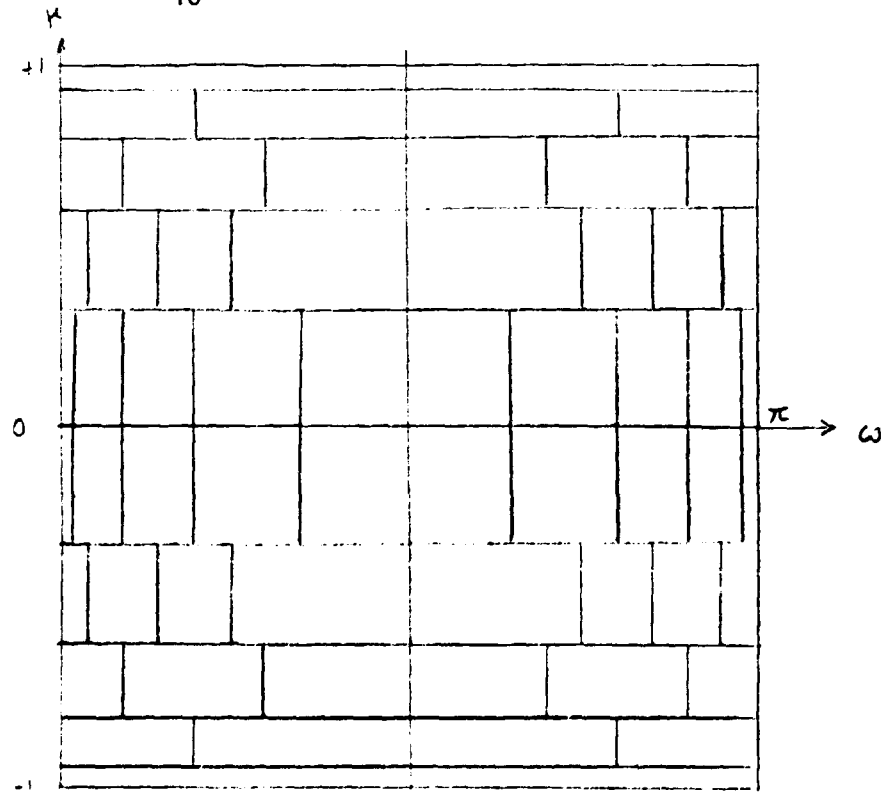


Figure 3 : Différents maillages utilisés pour la 1/2 sphère $[0, \pi] \times [-1, +1]$



a) Maillage S_{10} standard (60 mailles)



b) Maillage S_{10} modifié (avec raffinement au voisinage de $\omega = \pi$ et de $\omega = 0$)

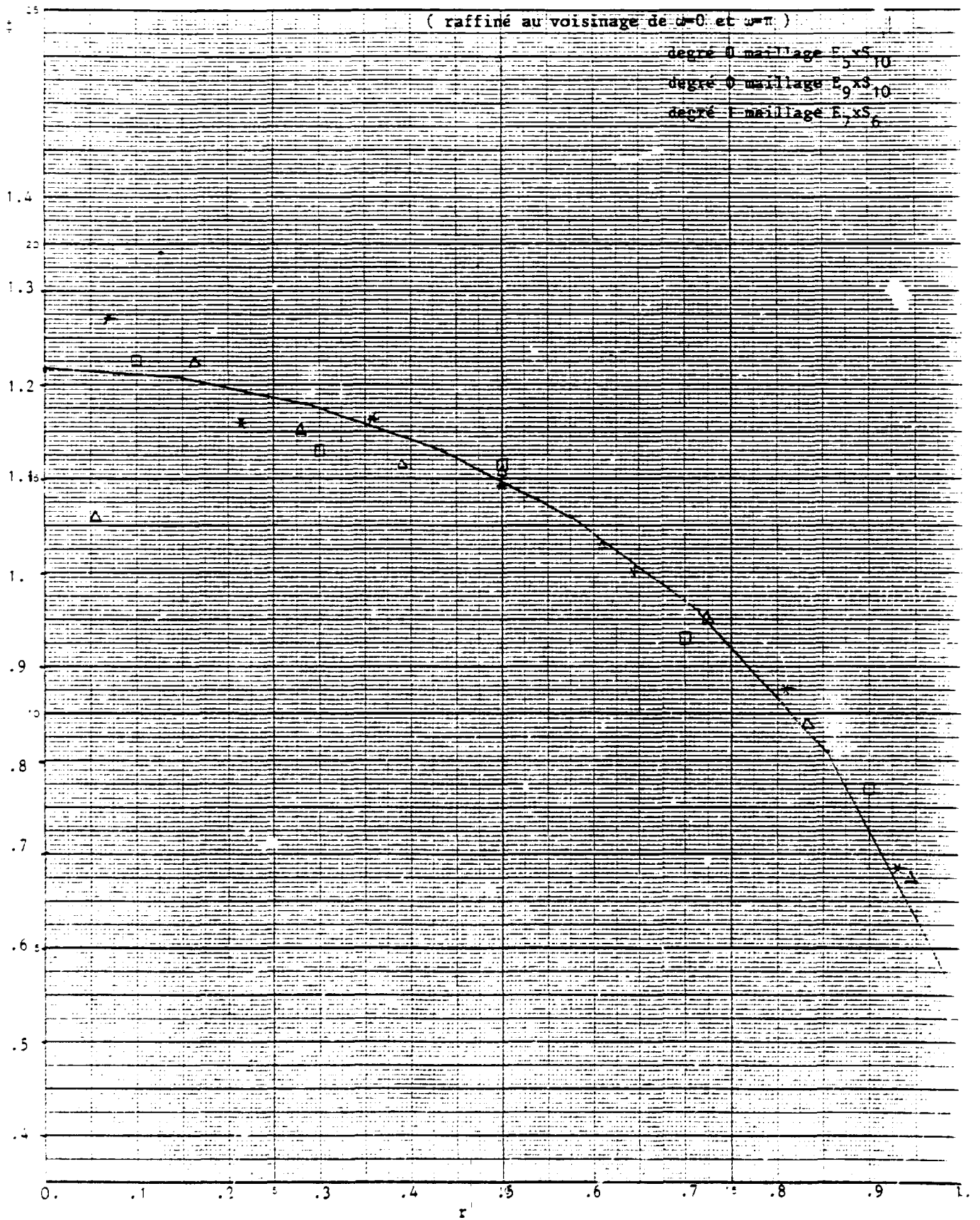
Par symétrie, le voisinage de $\omega = 0$ sera également raffiné⁽¹⁾.

Les résultats sont reportés dans la figure 4, où l'on s'aperçoit que l'amplitude des oscillations est divisée par 2.

(1) Dans notre problème, il semble a priori inutile de raffiner au voisinage $\omega = 0$. Il n'en va pas de même dans d'autres problèmes (propagation à grande distance)

Flux scalaire

Figure 4 - Utilisation d'un autre maillage angulaire



CONCLUSION

Les méthodes particulières de degré 0 ou 1 sont meilleures que le Monte-Carlo en 1-D sphérique. Les taux de convergence observés pour des quantités intégrées sont $O(h^2)$ pour le degré zéro et $O(h^3)$ pour le degré 1, à condition que l'on utilise les points de Gauss.

Dans l'exemple traité, la meilleure méthode (degré 1 avec points de Gauss) est néanmoins plus coûteuse que d'autres méthodes déterministes plus conventionnelles comme le DSN.

La méthode pourrait néanmoins présenter un intérêt dans certains problèmes (propagation à grande distance ou bien milieu très fortement absorbant).

En 2-D axisymétrique les taux de convergence observés pour des quantités intégrées sont plus difficiles à apprécier, mais il semble qu'ils soient compris entre $O(h)$ et $O(h^2)$ pour la méthode de degré 0 et entre $O(h^2)$ et $O(h^3)$ pour la méthode de degré 1. Ceci n'est pas en contradiction avec la théorie, (voir [3]), car la solution élémentaire de l'équation de transport est moins régulière en 2-D qu'en 1-D.

Sur l'exemple monocinétique traité, les flux donnés par la méthode de degré 1 sont sensiblement équivalents à ceux donnés par la méthode Monte-Carlo, à coût égal.

La méthode de degré 1 a cependant l'avantage de donner des quantités intégrées un peu plus précises et d'être déterministe.

Le passage au multigroupe pourrait révéler un avantage plus important encore puisque toutes les particules issues d'un même point et partant dans la même direction auront la même trajectographie et il y en aura autant que de groupes.

D'autre part, une programmation plus élaborée pourrait tirer profit du fait que la trajectoire de chaque particule traitée est déterministe et non pas aléatoire.

Il reste cependant à vérifier si ces conclusions optimistes restent valables en maillage quelconque.

Dans ce cas, on aurait mis au point une alternative intéressante à la méthode de Monte-Carlo, avec le même type d'applications que celle-ci.

Les méthodes d'éléments finis discontinus (voir [8] [9]) restent en effet très compétitives dans le cas isotrope pour tous les problèmes n'impliquant qu'un nombre restreint de libres parcours ou bien ceux dominés par la diffusion.

Il en est de même pour les méthodes de différences finies (schéma DSN) dans le cas avec maillage uniforme.

Ajoutons pour terminer que sur des ordinateurs à très grande capacité mémoire comme le CRAY-2, le stockage des éléments de la matrice M pourrait rendre cette méthode beaucoup plus performante que la méthode de Monte-Carlo.

REMERCIEMENTS

Nos remerciements vont à MM. Daronian et Samba qui nous ont fourni les résultats de référence en 1-D sphérique et en 2-D axisymétrique, et à M. Verwaerde pour ses conseils éclairés.

REFERENCES

- [1] B. MERCIER
C.R. Acad. Sci. Paris, Série I, tome 300 (1985) pp. 205-208.
- [2] B. MERCIER
"Non statistical Monte-Carlo", note CEA n° 2449 (1985).
- [3] B. MERCIER
A paraître.
- [4] P.A. RAVIART
"An analysis of particle methods", dans Numerical methods in Fluid Dynamics,
F. BREZZI
Ed., Lecture Notes in Maths, n° 1127 , Springer Verlag, 1985, pp.243-324.
- [5] J.J. DUDERSTADT, W.R. MARTIN
Transport theory, J. Wiley, New York, 1979.
- [6] D. VERWAERDE
"Equation de Boltzmann en géométries monodimensionnelles sphériques et cylindrique infinie", note CEA-N-2257, 1981.
- [7] Y. CHAUVET
"Vectorization and multitasking with a Monte-Carlo code for neutron transport problems", to appear.
- [8] G. SAMBA
"Résolution de l'équation du transport stationnaire en géométrie Lagrangienne à symétrie cylindrique", rapport interne du CEA, octobre 83.
- [9] M. MORDANT
Thèse, Paris, 1985.