

NOTICE THÉORIQUE DE LA MÉTHODE DES
CARACTÉRISTIQUES 2D ET DU GÉNÉRATEUR DE
TRAJECTOIRES SALT

X. WARIN

Contents

Contents	ii
1 Introduction	1
2 Rappels sur l'équation du transport neutronique	2
2.1 Les conditions aux limites	5
3 Les discrétisations angulaires	6
3.1 Les formules de quadratures SN symétriques	6
3.1.1 Les directions indépendantes	6
3.1.2 Les poids indépendants	8
3.1.3 Calcul du premier cosinus directeur et des poids indépendants	10
3.2 Les formules de quadratures SN non symétriques	11
3.3 Technique de résolution générale pour les méthodes SN	11
3.4 Formules de quadratures produits	13
3.4.1 Une première quadrature simple	13
3.4.2 Le problème des géométries de rotations et symétries	13
3.4.3 Cas des rotations d'angle α	13
3.4.4 Cas des symétries d'angle α	14
3.4.5 Le problème des trajectoires cycliques	14
3.4.6 Le cas d'un domaine de calcul rectangulaire	14
3.4.7 Le cas d'un domaine de calcul hexagonal	16
3.4.8 Poids associés aux angles azimutaux	17
4 La méthode des caractéristiques	18
4.1 Présentation	18
4.2 La méthode Step Caractéristique	18
4.3 Une méthode d'accélération synthétique pour la méthode step caractéristique	21
4.3.1 Calcul par la méthode Step caractéristique aux trajectoires cycliques	26
4.4 Schéma diamant pour la méthode des caractéristiques	27
4.5 Une technique d'accélération pour la méthode du schéma diamant	27
4.5.1 Accélération 1D	27
4.5.2 Accélération 2D	30
4.5.3 Le traitement des conditions aux limites	31
5 Traitement du terme de collision dans l'équation de transport	33
6 Les techniques de tracé de trajectoires	36
6.1 Techniques générales de tracé de trajectoires	36
6.2 Techniques de tracé de trajectoires pour un domaine ouvert	37
6.2.1 Géométries avec rotation d'angle $\theta = \frac{2\pi}{N}$	37
6.2.2 Rotation d'angle $\frac{2\pi}{N}$ avec n pair	37
6.2.3 Rotation d'angle $\theta = \frac{2\pi}{N}$ avec n impair	40
6.2.4 Géométries avec deux axes de symétrie d'angle $\theta = \frac{\pi}{N}$	43
6.2.5 Symétrie d'angle $\theta = \frac{\pi}{N}$ avec n pair	43
6.2.6 Symétrie d'angle $\frac{\pi}{N}$ avec n impair	46
6.3 Techniques de tracé de trajectoires pour un domaine fermé	49
6.3.1 Le domaine rectangulaire	49
6.3.2 Les translations sur un domaine rectangulaire	49
6.3.3 Un rectangle avec des conditions de symétries spéculaires	50
6.3.4 Le cas d'un carré	50
6.3.5 Le domaine hexagonal	51
7 Accélération des itérations multigroupes	54

8	Conclusion	57
9	Description d'un fichier de tracking	58
	Références	59

1 Introduction

Les méthodes numériques présentées dans cette documentation ont été initialement développées au CEA SERMA et intégrées dans le code TDT. Au courant de l'année 2001, une partie de ces méthodes ont été intégrées au code DRAGON, sous couvert de la licence LGPL, dans le cadre de l'opération DESCARTES. Le code de réseau produit a été identifié par l'acronyme "SUNSET", mais la programmation Fortran 90, issue de TDT, n'a pas été intégrée dans la version officielle du code DRAGON en VERSION 3 ou VERSION 4.

Le générateur de trajectoires **SALT** : est un descendant direct de l'effort d'intégration de TDT effectué en 2001 dans l'environnement DRAGON/SUNSET. Nous avons extrait les 13000 lignes de codes responsables de la transformation de la géométrie surfacique en trajectoires (tracks) neutroniques et traduites ces dernières au format DRAGON. Comme le source fortran du module **SALT** : est déjà au format Fortran 90, il a été facile de le convertir au nouveau standard de bibliothèque GANLIB5. L'acronyme **SALT** : du nouveau module souligne la facilité pour un utilisateur de la plateforme SALOME de générer la géométrie surfacique requise en entrée du module **SALT** :.^[1]

Cette notice théorique correspond à la version utilisée dans la boîte à outils DESCARTES. Cette version de TDT est une des composantes du code de réseau SUNSET mis au point dans DESCARTES. Le code TDT permet de résoudre les équations du transport neutronique par la méthode des caractéristiques dans une géométrie générale 2D ou 3D. Seule la géométrie 2D est actuellement disponible dans la version mise en oeuvre dans DESCARTES.

Cette méthode a été initialement développée pour pallier aux insuffisances de la méthode des Pij (voir la référence 2) qui ne permet pas de faire des calculs en tenant compte de l'anisotropie des collisions.

La difficulté de mise en oeuvre efficace de la méthode des caractéristiques en géométrie non régulière est due :

- A la difficulté de tracer la trajectoire des particules en tenant compte des différentes conditions aux limites (symétrie, réflexion, rotations) dans des domaines divers (rectangulaires, hexagonaux),
- A la difficulté d'obtenir de bonnes techniques d'accélération synthétiques pour accélérer le schéma de résolution utilisé. Cette difficulté à accélérer la méthode des caractéristiques fait que très souvent une étape de pré-condensation est effectuée pour se ramener à un nombre de groupes d'énergie pas trop grand (une dizaine environ). Une méthode d'accélération efficace permet de se débarrasser de cette étape de pré-condensation.

Dans cette note, on décrira :

- Les méthodes de discrétisation angulaires utilisées,
- Deux méthodes de caractéristiques (le schéma step caractéristique et le schéma diamant),
- Les diverses conditions aux limites utilisées,
- Les divers algorithmes de traçage des trajectoires (trajectoires cycliques etc ...),
- Les techniques d'accélération à utiliser.

Cette notice est basée sur la méthodologie présentée aux références 3 et 4.

Remarque 1.1 *La version avec schéma diamant n'est pas encore implantée dans la version SUNSET du code TDT. Des problèmes concernant l'accélération subsistent encore. Son introduction aura lieu lorsque ces problèmes seront réglés.*

2 Rappels sur l'équation du transport neutronique

On rappelle que l'équation intégrro-différentielle du transport neutronique résulte d'un bilan des neutrons sur un volume de contrôle quelconque (voir 2). On montre alors que le problème général peut se mettre sous la forme d'un problème aux valeurs propres :

Trouver le plus grand k tel que le couple (k, ψ) vérifie :

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r, E) \psi(r, E, \vec{\Omega}) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dE' \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(r, E', \vec{\Omega}') \\ &+ \frac{1}{4\pi} \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{N_{\text{isotope}}} \chi_i(E) \int_0^{+\infty} dE' \nu_i(E') \Sigma_{f,i}(r, E') \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi(r, E', \vec{\Omega}') \quad \text{dans } D \times \mathbf{R}^+ \times S_2 \end{aligned} \quad (2.1)$$

où le domaine D est le réacteur par exemple, et où les conditions aux limites ne sont pas détaillées pour l'instant.

On a choisi les notations suivantes :

- r, E et $\vec{\Omega}$ sont respectivement des variables de position (dans $\mathbf{R}^3$), d'énergie (dans $\mathbf{R}^+$), et de direction (sur la sphère unité S_2 de $\mathbf{R}^3$).
- $\psi(r, E, \vec{\Omega})$ est le flux angulaire de neutrons en r d'énergie E et de direction angulaire $\vec{\Omega}$, dans le domaine D .
- k est le facteur de multiplication effectif permettant de déterminer l'état de criticité du coeur. On montre (voir 2) que le coeur n'est stable que si $k = 1$,
- $\Sigma_t(r, E)$ est la section efficace totale ,
- $\Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$ est la section efficace de scattering ,
- $\Sigma_{f,i}(r, E)$ est la section efficace de fission de l'isotope i ,
- $\chi_i(E)$ est le spectre d'énergie de fission de l'isotope i ,
- $\nu_i(E)$ est le nombre moyen de neutrons libérés lors d'une fission à l'énergie E de l'isotope i .

On note F l'opérateur de fission tel que

$$(F\psi)(r) = \frac{\chi(E)}{4\pi k} \int_0^{+\infty} dE' \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \nu(E') \Sigma_f(E') \psi(r, E', \vec{\Omega}'). \quad (2.2)$$

On définit l'opérateur H

$$H\psi = \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r, E) \psi(r, E, \vec{\Omega}) - \frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dE' \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(r, E', \vec{\Omega}'), \quad (2.3)$$

pour que (2.1) se mette sous la forme suivante :

$$H\psi = \frac{\chi}{k} F\psi. \quad (2.4)$$

Le problème (2.1) se résout alors grâce à la méthode suivante par itération sur le terme de fission (voir 2) :

Soit ψ_0, k_0 donnés dans l'équation (2.4),

on résout :

$$H\psi^h = \frac{\chi(E)}{k^{h-1}} F\psi^{h-1}, \quad (2.5)$$

on calcule $F\psi^h$ par

$$(F\psi^h)(r) = \frac{1}{4\pi k} \int_O^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(E') H^{-1} \chi(E') (F\psi^{h-1}(r)), \quad (2.6)$$

on estime k^h par l'équation suivante où W est un poids à choisir et

$\langle ., . \rangle$ désigne l'intégration sur tout l'espace :

$$k^h = k^{h-1} \frac{\langle F\psi^h, W \rangle}{\langle F\psi^{h-1}, W \rangle}. \quad (2.7)$$

Dans tous les cas, on se ramène à inverser l'opérateur H et donc à résoudre :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r, E) \psi(r, E, \vec{\Omega}) \\ = \frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dE' \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(r, E', \vec{\Omega}') + S(r, E, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (2.8)$$

On peut supposer pour simplifier que l'hypothèse de diffusion isotrope est vérifiée : Σ_s est alors indépendant du produit $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$. L'équation (2.8) devient ainsi :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r, E) \psi(r, E, \vec{\Omega}) &= \int_0^{+\infty} dE' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E) \phi(r, E') \\ &+ S(r, E, \vec{\Omega}), \end{aligned} \quad (2.9)$$

où $\phi(r, E)$ est le flux scalaire relié au flux angulaire par la relation :

$$\phi(r, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi(r, E', \vec{\Omega}'). \quad (2.10)$$

Par la suite on montrera comment lever cette hypothèse et comment traiter l'anisotropie.

Pour obtenir la formulation multigroupe de l'équation de transport, on effectue une division de l'énergie en G intervalles. Les particules du groupe g sont celles qui ont une énergie E telle que $E_g < E < E_{g-1}$.



FIGURE 1 – Découpage multigroupe.

Ainsi le numéro du groupe croît lorsque l'énergie est décroissante.

Dans chaque groupe, on suppose que le flux angulaire est séparable en énergie :

$$\psi(r, E, \vec{\Omega}) \simeq f(E) \psi_g(r, \vec{\Omega}) \text{ pour } E_g < E < E_{g-1}, \quad (2.11)$$

où la fonction dépendance en énergie vérifie :

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} f(E) dE = 1. \quad (2.12)$$

Grâce à (2.11) il apparaît évident que le flux scalaire vérifie :

$$\phi(r, E) = f(E) \phi_g(r) \text{ pour } E_g < E < E_{g-1}, \quad (2.13)$$

où

$$\phi_g(r) = \int_{S_2} d\vec{\Omega} \psi_g(r, \vec{\Omega}). \quad (2.14)$$

On intègre (2.9) de E_g à E_{g-1} et on utilise les approximations de séparabilité en énergie pour obtenir :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_{tg}(r) \psi_g(r, \vec{\Omega}) = \sum_{g'} \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}(r) + S_g(r), \quad (2.15)$$

avec les notations suivantes :

$$\Sigma_{tg}(r) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma_t(r, E), \quad (2.16)$$

$$\Sigma_{sgg'}(r) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E), \quad (2.17)$$

$$S_g(r) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE S(r, E). \quad (2.18)$$

On peut définir l'opérateur de transport pour le groupe g par :

$$(H_{gg}^0 \psi_g)(r, \vec{\Omega}) = \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_{tg}(r) \psi_g(r, \vec{\Omega}). \quad (2.19)$$

On définit ensuite l'opérateur de scattering entre le groupe g et le groupe g' par :

$$(H_{gg'}^1 \psi_{g'})(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}(r). \quad (2.20)$$

On peut enfin définir l'opérateur de transport multigroupe par :

$$H_{gg'} = \delta_{gg'} H_{gg}^0 - H_{gg'}^1. \quad (2.21)$$

L'équation (2.15) se met alors sous la forme :

$$\begin{pmatrix} H_{11} & \cdot & \cdot & H_{1G} \\ H_{21} & \cdot & \cdot & H_{2G} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{G1} & \cdot & \cdot & H_{GG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \cdot \\ \psi_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \cdot \\ S_G \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Dans certains problèmes, il n'y a pas de scattering d'un groupe de bas niveau d'énergie vers un groupe de haut niveau d'énergie. On a alors :

$$H_{gg'} = 0 \text{ si } g' > g. \quad (2.23)$$

L'équation (2.22) est alors facile à résoudre car le système matriciel est triangulaire inférieur : on résout par groupe d'énergie successif.

$$\psi_1 = H_{11}^{-1} S_1,$$

$$\psi_2 = H_{22}^{-1} (S_2 - H_{21} \psi_1),$$

$$\psi_G = H_{GG}^{-1} (S_G - \sum_{g' < G} H_{Gg'} \psi_{g'}). \quad (2.24)$$

Dans le cas où il y a une remontée en énergie, un schéma itératif peut être utilisé pour la résolution de (2.22). Le plus simple est le suivant :

$$\psi_{g+1}^{i+1} = H_{gg}^{-1} \left(S_g - \sum_{g' < g} H_{gg'} \psi_{g'}^{i+1} - \sum_{g' > g} H_{gg'} \psi_{g'}^i \right). \quad (2.25)$$

Les équations (2.23) et (2.24) se ramènent toujours à l'inversion de H_{gg} . La méthode des caractéristiques que nous allons détailler a donc pour but de résoudre une équation de la forme :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \psi(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(r) \phi(r) + S(r) \quad (2.26)$$

avec

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi(r, \vec{\Omega}') \quad (2.27)$$

où les indices en énergie ont été supprimés, la source est supposée isotrope et où l'on a supposé pour l'instant que la diffusion était isotrope.

2.1 Les conditions aux limites

Les conditions aux limites du domaine de calcul peuvent être de différents types

– frontière libre

Les neutrons peuvent seulement sortir du domaine considéré convexe.

$$\psi(r, \vec{\Omega}) = 0 \text{ pour } \vec{\Omega} \cdot n < 0 \text{ et pour } r \text{ appartenant à } \partial D \quad (2.28)$$

– réflexion spéculaire

$$\begin{aligned} \psi(r, \vec{\Omega}) &= \psi(r, \vec{\Omega}') \text{ pour } r \text{ appartenant à } \partial D \\ \text{et pour } \vec{\Omega}' &= \vec{\Omega} - 2(\vec{\Omega} \cdot n)n \end{aligned} \quad (2.29)$$

– réflexion isotrope

$$\psi(r, \vec{\Omega}) = \frac{1}{\pi} \int_{\vec{\Omega}' \cdot \vec{n} > 0} (\vec{\Omega}' \cdot \vec{n}) \psi(r, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \text{ pour } r \in \partial D \quad (2.30)$$

– albédo isotrope

$$\psi(r, \vec{\Omega}) = \frac{\alpha}{\pi} \int_{\vec{\Omega}' \cdot \vec{n} > 0} (\vec{\Omega}' \cdot \vec{n}) \psi(r, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \text{ pour } r \in \partial D \quad (2.31)$$

– rotation

$$\begin{aligned} \psi(r, \vec{\Omega}) &= \psi(r', \vec{\Omega}') \text{ pour } r \in \partial D, \\ \text{avec } r &= \text{rot}(0, \pm\alpha)(r), \vec{\Omega} = \text{rot}(0, \pm\alpha)(\vec{\Omega}') \end{aligned} \quad (2.32)$$

où $\text{rot}(0, \alpha)$ désigne la rotation de centre l'origine et d'angle α .

On peut aussi ajouter de manière évidente les translations et symétries.

3 Les discrétisations angulaires

La résolution de l'équation de transport par la méthode des caractéristiques nécessite de faire une discrétisation de la sphère unité : c'est la méthode SN. Ces méthodes consistent donc à choisir un ensemble de M directions discrètes de la sphère unité ($\vec{\Omega}_m = (\mu_m, \eta_m, \xi_m)$) et les poids de quadrature W_m associés. La forme discrète de l'équation (2.26) s'écrit alors :

$$\vec{\Omega}_m \cdot \nabla \psi(r, \vec{\Omega}_m) + \Sigma_t(r) \psi(r, \vec{\Omega}_m) = \Sigma_s(r) \sum_{n=1}^M W_n \psi(r, \vec{\Omega}_n) + S(r), \quad (3.1)$$

où le flux scalaire sera approché par :

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} \psi(r, \vec{\Omega}) \simeq \sum_{i=1}^M W_i \psi(r, \vec{\Omega}_i). \quad (3.2)$$

La principale méthode de résolution de (3.1) consiste à utiliser l'itération suivante sur le terme de scattering :

$$\phi^i(r) = \sum_{j=1}^M W_j \psi^i(r, \vec{\Omega}_j), \quad (3.3)$$

$$\vec{\Omega}_m \cdot \nabla \psi^{i+1}(r, \vec{\Omega}_m) + \Sigma_t(r) \psi^{i+1}(r, \vec{\Omega}_m) = \Sigma_s(r) \sum_{n=1}^M W_n \psi^i(r, \vec{\Omega}_n) + S(r). \quad (3.4)$$

La vitesse de convergence de la précédente méthode sera donnée par le rapport $\sup(\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t})$ (< 1). Cette vitesse sera d'autant plus faible que le milieu neutronique est peu absorbant et donc que $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ est proche de 1.

Nous verrons plus loin qu'il est cependant possible d'accélérer la convergence par divers procédés.

Nous allons détailler ici les méthodes de discrétisation angulaires disponibles dans la version SUNSET du code TDT.

3.1 Les formules de quadratures SN symétriques

Dans cette section, on commence par expliquer comment on choisit les directions qui vont en fait dépendre d'un unique paramètre le coefficient direction μ . On explique ensuite la technique utilisée pour obtenir des équations sur les poids.

3.1.1 Les directions indépendantes

On cherche une formule de quadrature de M directions vérifiant :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} f(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{i=1}^M W_i f(\vec{\Omega}_i), \quad (3.5)$$

et on a donc la normalisation :

$$\sum_{i=1}^M W_i = 1. \quad (3.6)$$

La formule doit être à poids positifs et donner une bonne approximation du terme de collision. Il est aussi souhaitable que la formule n'entraîne pas de biais dans le calcul. Cette formule doit aussi être indépendante de la façon dont on a numéroté les axes de coordonnées. Ceci implique l'invariance par rapport à des rotations et des symétries qui échangent les axes. On en conclut que la formule est uniquement définie par la distribution de directions et de poids dans le premier octant, les distributions dans les autres octants pouvant s'obtenir par symétries.

Une direction peut s'écrire $\vec{\omega} = (\mu, \eta, \xi)$. On appelle par coutume discrétisation S_n une formule de quadrature avec n cosinus directeurs μ sur un axe. Pour des raisons de symétrie, on se restreindra à des valeurs paires de n . On note $(\mu_m)_{m=1,K}$, $(\eta_m)_{m=1,K}$ et $(\xi_m)_{m=1,K}$ les distributions de cosinus directeur sur les trois axes. Les invariances par rotations nous disent que ces trois ensembles doivent être identiques. Une direction $\vec{\Omega}$ peut alors s'écrire $\vec{\Omega} = (\mu_i, \mu_j, \mu_k)$ avec $1 \leq i, j, k \leq K$.

On s'intéresse ici au cas des formules triangulaires pour lesquelles les directions dans le premier octant sont distribuées sur un triangle avec $\frac{n}{2}$ niveaux par rapport à chacun de ses côtés. On numérote les niveaux à partir de chacun des trois pôles vers le côté opposé du premier octant (voir figure 2) En

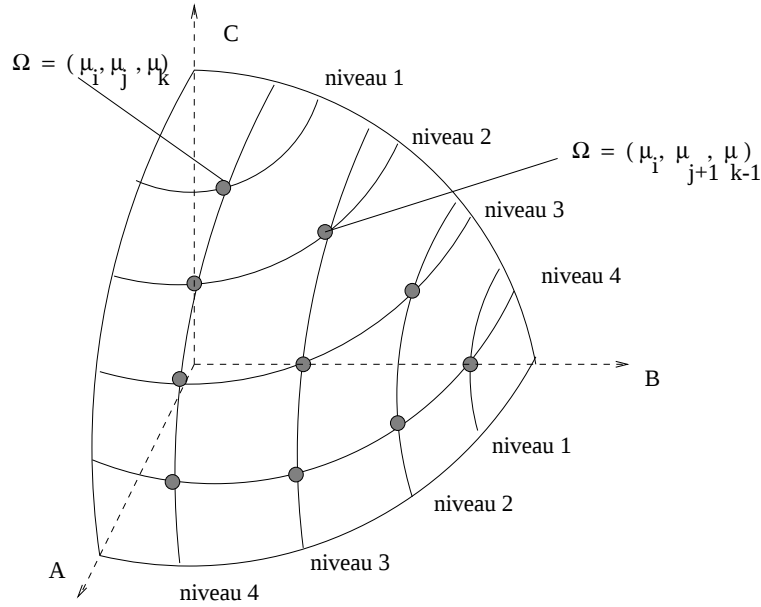


FIGURE 2 – Quadrature symétrique S8.

disposition triangulaire il y a $\frac{n}{2} + 1 - p$ directions dans le niveau p , ce qui fait au final un nombre de $M = \frac{n(n+2)}{8}$ directions dans le premier octant tandis que le nombre de directions du problème dépend de la dimension du problème ($M = n(n+2)$ en 3D et $\frac{n(n+2)}{2}$ en 2D).

La position d'une direction discrète est donnée en terme de position de son niveau à partir des trois côtés (BC, AC et AB) par :

$$\vec{\Omega}_s = (\mu_i, \mu_j, \mu_k) \quad (3.7)$$

où l'on vérifie facilement que $i + j + k = \frac{n}{2} + 2$ et où les μ_i , μ_j , et les μ_k sont les projections de $\vec{\Omega}_s$ sur OA, OB et OC. Sur les figures 2 et 3, on représente les points de discrétisation pour $n = 8$.

Pour la figure 3, les coordonnées d'un point (i, j, k) sont en notant $s = (i, j, k)$:

$$\vec{\Omega}_s = (\mu_i, \mu_j, \mu_k)$$

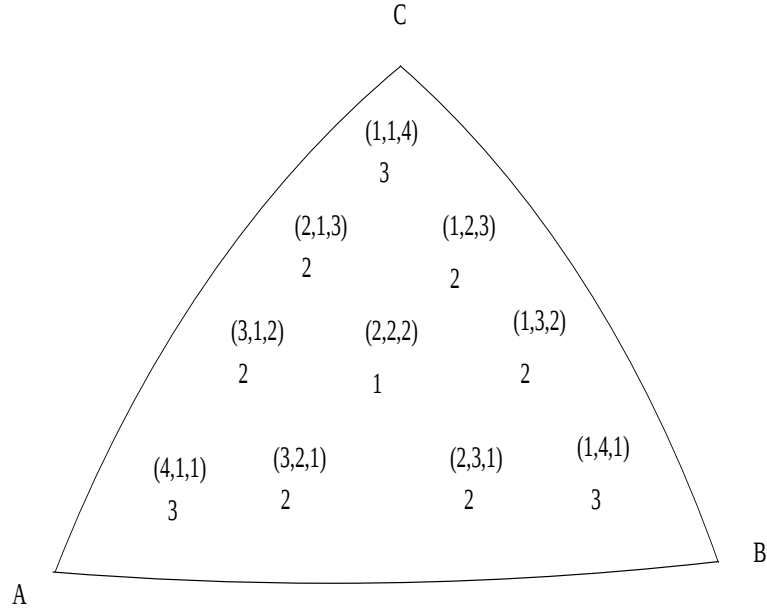


FIGURE 3 – Directions de discrétisation et poids associés d'une quadrature symétrique S8.

On vérifie facilement que

$$i + j + k = \frac{n}{2} + 2. \quad (3.8)$$

Si l'on impose $\mu_i = \text{cst}$ et l'on se déplace le long de la latitude μ_i , on aboutit au point $\overrightarrow{\Omega_{s'}} = (\mu_i, \mu_{j+1}, \mu_{k-1})$ (voir figure 2). Ce point appartenant à la sphère unité, on a la relation :

$$\mu_i^2 + \mu_{j+1}^2 + \mu_{k-1}^2 = 1. \quad (3.9)$$

On soustrait alors l'équation (3.9) à l'équation (3.8) et l'on obtient :

$$\mu_{k+1}^2 - \mu_k^2 = \mu_j^2 - \mu_{j-1}^2. \quad (3.10)$$

La précédente relation est vraie quelques soient j et k tels que $i + j + k = \frac{n}{2} + 2$. On obtient donc :

$$\Delta = \mu_{\frac{n}{2}}^2 - \mu_{\frac{n}{2}-1}^2 = \dots = \mu_3^2 - \mu_2^2 = \mu_2^2 - \mu_1^2, \quad (3.11)$$

où Δ ne dépend que de n . On peut écrire :

$$\mu_m^2 = \mu_1^2 + (m-1)\Delta \quad \text{pour } m = 1 \text{ à } \frac{n}{2}. \quad (3.12)$$

Si on substitue l'équation (3.12) dans l'équation (3.9), on obtient :

$$\Delta = \frac{2}{n-2}(1 - 3\mu_1^2). \quad (3.13)$$

Ainsi, étant donnés μ_1^2 (avec $\mu_1 < \frac{1}{\sqrt{3}}$), les autres directions sont déterminées par (3.12). La valeur de μ_1^2 détermine comment les points sont rassemblés, soit près du centre si μ_1^2 est grand (mais inférieur à $\frac{1}{3}$) ou près des pôles si μ_1^2 est petit.

3.1.2 Les poids indépendants

Les conditions d'invariance par réflexion et rotation imposent que l'ensemble des poids p_s possède la même symétrie que les directions $\vec{\Omega}_s$.

Si on se réfère à la figure 3 (où les différents poids sont indiqués en dessous des directions), les poids p_3 associés aux trois points sommets sont égaux. De même, les poids p_2 des six points autour du centre sont égaux.

On obtient ici trois classes de points (associés aux trois poids p_i).

Toujours en notant $s = (i, j, k)$, on notera classe(s) l'ensemble des directions $\vec{\Omega}_{s'}$ telles que le poids associé à $\vec{\Omega}_{s'}$ soit égal à celui associé à $\vec{\Omega}_s$. On dira que deux points appartiennent à une même classe si et seulement si leurs poids associés sont égaux.

Pour comprendre la méthode de repérage de ces différents types de points, on commence par introduire la notion de coque : la coque est le triangle qui peut être défini par les lignes de cosinus directeurs parallèles aux coté du "triangle" formé par l'octant et de même niveau par rapport à chacun des côtés. Sur la figure 4, on définit une coque par les points de même numéro pour une quadrature S_{16} . On vérifie inductivement

ξ_8	1							
ξ_7	1	1						
ξ_6	1	2	1					
ξ_5	1	2	2	1				
ξ_4	1	2	3	2	1			
ξ_3	1	2	3	3	2	1		
ξ_2	1	2	2	2	2	2	1	
ξ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
	μ_1	μ_2	μ_3	μ_4	μ_5	μ_5	μ_7	μ_8

FIGURE 4 – Représentation des coques pour une quadrature S_{16} .

que le nombre de coques est égal à $E((\frac{n+4}{6}))$ où $E(x)$ désigne la partie entière de x . On devra considérer 3 cas :

1. Les directions de la forme $\Omega_a = (\mu, \mu, \mu)$ avec $\mu^2 = \frac{1}{3}$. D'après (3.8), et comme $i = j = k$, on aura une direction de ce type si et seulement si $n + 4$ est un multiple exact de 6.
2. Les directions de la forme $\Omega_a = (\mu, \mu, \xi)$. Il s'agit des directions diagonales avec $i = j$. Toujours d'après (3.8), ce type de direction existe si $2i \leq \frac{n+2}{2}$. Le nombre de directions est donc $E((n+2)/4)$. Chacune de ces directions génère par permutation, un triplet de directions équipoids (μ, ξ, μ) et (ξ, μ, μ) avec $\xi^2 = 1 - 2\mu^2$. L'ensemble de ces directions sont d'indice (i, i, j) , (i, j, i) et (j, i, i) .
3. Les directions de la forme $\Omega_a = (\mu, \eta, \xi)$ avec des cosinus directeurs différents les uns des autres.

Pour le calcul effectif de ces différents poids, on utilise l'algorithme suivant (qui ne tient pas compte des permutations) : On note i le numéro de la coque (inférieur ou égal à $E((\frac{n+4}{6}))$). On vérifie alors

le cas des indices pairs.

En groupant les directions de même poids on pose :

$$F_{k,l,m} = I_{k,l,m} - \sum_{n=1}^{NW} w_n \alpha^{k,l,m} = 0. \quad (3.16)$$

où la somme n se fait pour chacun des poids, $\alpha_n^{k,l,m} = \sum_{perm} (\mu_n^k \eta_n^l \xi_n^m)$ et $\sum_{perm}$ indique une somme sur les directions associées aux poids et obtenues par permutation des indices k, l, m . Pour un poids de type 1 il y a une seule direction avec $\alpha^{k,l,m} = (\frac{1}{\sqrt{3}})^{k+l+m}$ car $\mu^2 = \eta^2 = \xi^2 = \frac{1}{3}$. Un poids de type 2 contient trois directions et l'on a donc $\alpha_n^{k,l,m} = \mu_n^{k+l} \xi_n^m + \mu_n^{k+m} \xi_n^l + \mu_n^{l+m} \xi_n^k$ avec $\xi_n^2 = 1 - 2\mu_n^2$. Enfin un poids de type 3 génère par permutation six directions avec $\alpha_n^{k,l,m} = \mu_n^k (\eta_n^l \xi_n^m + \xi_n^l \eta_n^m) + \eta_n^l (\mu_n^k \xi_n^m + \xi_n^k \mu_n^l) + \xi_n^l (\mu_n^k \eta_n^m + \eta_n^k \mu_n^l)$ et $\xi_n^2 = 1 - \mu_n^2 - \eta_n^2$. Du fait des permutations qui définissent $\alpha_n^{k,l,m}$, on ne considère les équations 3.16 que pour $k \geq l \geq m$ pairs. De plus, la relation $\mu_n^2 + \eta_n^2 + \xi_n^2 = 1$ implique que toutes les équations de type (3.16) ne sont pas linéairement indépendantes. En effet cette relation entraîne :

$$\mu_n^{k+2} \eta_n^l \xi_n^m = \mu_n^k \eta_n^l \xi_n^m - \mu_n^k \eta_n^{l+2} \xi_n^m - \mu_n^k \eta_n^l \xi_n^{m+2}. \quad (3.17)$$

On classe les équations par leurs indices $s = k + l + m$. On voit que la relation (3.17) nous dit que tout $\alpha_n^{k,l,m}$ avec $k > l$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire des termes du même indice s et de l'indice d'en dessous $s - 2$ de type (k', l', m') avec des $k > k' \geq l'$. On voit donc par exemple que conserver $I_{2,0,0}$ est équivalent à conserver $I_{0,0,0}$. Par récurrence on peut montrer alors que tout $\alpha_n^{k,l,m}$ avec $k > l \geq m$ peut se composer en combinaison linéaire de $\alpha_n^{k',k',m'}$ avec $k' \geq m'$ et $s' = 2k' + m'$ inférieur à s . On en déduit que les $\alpha^{k,k,l}$ ($k \geq l$) sont les éléments générateurs de $\alpha^{k,l,m}$. Ce sont eux que l'on va conserver dans la pratique.

On peut considérer alors deux types de problème à résoudre avec des quadratures symétriques :

1. les formules symétriques avec NW poids à déterminer le premier cosinus étant fixé (ce premier cosinus peut être fixé grâce à la formule de Lee $\mu_1 = \frac{1}{3(n-1)}$),
2. les formules symétriques avec NW poids et le premier cosinus à déterminer.

Le premier problème est un problème linéaire, le second est non linéaire.

3.2 Les formules de quadratures SN non symétriques

Dans le cas général d'une formule à niveaux non symétriques, on associe $\frac{n}{2} + 1 - p$ directions à chaque niveau mais ces directions n'ont pas nécessairement le même cosinus directeur. Le résultat est que l'on doit aussi calculer les cosinus directeurs et que l'on aura donc à résoudre des équations non linéaires.

- Une direction de type 1 a comme seule inconnue le poids w ,
- Une inconnue de type 2 a deux inconnues : w et μ avec la contrainte $\mu^2 \leq \frac{1}{2}$ ($\xi^2 \geq 0$),
- une inconnue de type 3 a trois inconnues w , μ et ν avec la contrainte $\mu^2 + \nu^2 \leq 1$.

De plus tous les poids et cosinus directeurs doivent être positifs. Le nombre total d'inconnues (poids et cosinus directeurs) est $N_{eq} = 1 + E(\frac{n(n+4)-1}{16})$.

3.3 Technique de résolution générale pour les méthodes SN

Pour le cas des quadratures symétriques et pour μ_1 connu, les équations (3.16) forment un système linéaire. Dans la pratique on observe que pour des valeurs de n relativement petites on obtient des poids négatifs. On doit donc modifier le problème pour obtenir un problème avec poids positifs : on aboutit à un problème de minimisation avec contrainte.

En règle générale, les problèmes de recherche de quadratures symétriques ou non se ramènent à résoudre

itérativement un problème satisfaisant les contraintes sur les poids et le cosinus, par une méthode de gradient conjugué. On introduit le problème : trouver le minimum de la fonctionnelle suivante :

$$F(x) = \sum_{k,l,m} F_{k,l,m}^2(\vec{x}), \quad (3.18)$$

où les $F_{k,l,m}$ sont ceux définis dans (3.16) et où $\vec{x}$ représente le vecteur poids et carrés des cosinus inconnus. Le nombre de moments (k, l, m) dans la somme est égal au nombre d'inconnues $= \dim(\vec{x})$. Le minimum de la fonctionnelle est cherché itérativement : à chaque itération on part d'un point $\vec{a}$ et d'une direction $\vec{e}$ et l'on cherche le minimum de F le long de la trajectoire $\vec{a} + \lambda \vec{e}$. La valeur optimale λ est obtenue comme suit :

- On commence par calculer les valeurs λ_{min} et λ_{max} des valeurs admissibles de λ et qui saturent donc les contraintes. Si on obtient des valeurs incompatibles $\lambda_{min} > \lambda_{max}$, on annule la composante du vecteur $\vec{e}$ associée,
- On définit un intervalle dans $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ dans lequel on sait qu'il y a un minimum,
- On minimise la fonctionnelle sur cet intervalle.

Pour obtenir une nouvelle direction de descente, on doit calculer la dérivée de la fonctionnelle

$$\partial_{x_n} F(\vec{x}) = 2 \sum_{k,l,m} w_{k,l,m} F_{k,l,m}(\vec{x}) \partial_{x_n} F_{k,l,m}(\vec{x}) \quad (3.19)$$

avec

1. Pour le cas d'une quadrature symétrique avec μ_1 imposé :

$$\partial_{w_n} F_{k,l,m}(\vec{x}) = -\alpha_n^{k,l,m}, \quad (3.20)$$

2. Pour le cas d'une quadrature non symétrique :

$$\begin{aligned} \partial_{w_n} F_{k,l,m}(\vec{x}) &= -\alpha_n^{k,l,m}, \\ \partial_{\mu_n^2} F_{k,l,m}(\vec{x}) &= -w_n \beta_n^{k,l,m}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

où

- (a) $\beta_n^{k,l,m} = \sum_{perm} \left(\frac{k+l}{2\mu_n^2} - \frac{m}{\xi_n^2} \right) \mu_n^{k+l} \xi_n^m$ pour une direction de type 2,
- (b) $\beta_n^{k,l,m} = \sum_{perm} \left(\frac{k}{2\mu_n^2} - \frac{m}{\xi_n^2} \right) \mu_n^k \eta_n^l \xi_n^m$ pour une direction de type 3.

Une expression similaire s'applique pour le cas de la dérivée par rapport à η_n^2 pour une direction de type 3. :

$$\partial_{\eta_n^2} F_{k,l,m}(\vec{x}) = -w_n \gamma_n^{k,l,m}, \quad (3.22)$$

$$(3.23)$$

$$\text{avec } \gamma_n^{k,l,m} = \sum_{perm} \left(\frac{k}{2\eta_n^2} - \frac{m}{\xi_n^2} \right) \mu_n^k \eta_n^l \xi_n^m.$$

3. Pour une quadrature symétrique avec optimisation de μ_1

$$\partial_{w_n} F_{k,l,m}(\vec{x}) = - \sum_{k \geq m \geq l} w_n * \left(1 - 6 * \frac{k-1}{n-2} \right) \beta_n^{k,l,m}, \quad (3.24)$$

avec les $\beta_n^{k,l,m}$ définis ci-dessus.

L'utilisation d'un algorithme de descente pour un problème d'optimisation avec contrainte aboutit à l'obtention d'un minimum local : ce minimum n'est à priori pas zéro. Il existe aussi des cas où plusieurs solutions existent et donnent un minimum égal à zéro.

Remarque 3.1 On peut décider aussi d'utiliser une formule SN équipoids dont les directions sont données grâce à la formule (3.12) et au premier cosinus directeur. Les poids sont alors tous égaux à $\frac{1}{n}$.

3.4 Formules de quadratures produits

3.4.1 Une première quadrature simple

En écrivant l'intégrale (3.5) en coordonnée sphérique on obtient :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} f(\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\phi d\theta \sin(\theta) f(\phi, \theta). \quad (3.25)$$

Cette équation peut encore s'écrire :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} f(\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 dr \int_0^{2\pi} d\theta f(r, \theta) \quad (3.26)$$

que l'on intégrera par :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} f(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{p=1}^{n_p} \sum_{pp=1}^{n_\theta} w_p^r w_{pp}^\theta f(\xi_p^r, \theta_{pp}), \quad (3.27)$$

où les (w_p^r, ξ_p^r) sont les poids et les points associés à l'intégration en r et $(w_{pp}^\theta, \theta_{pp})$ sont les poids et directions associés à une quadrature en θ .

Pour la quadrature en r on peut utiliser une formule de Gauss-Legendre de poids $w_p = 2w_p^r$, $p = 1, n_r$ et points ξ_p^r , $p = 1, n_r$ pour intégrer " au mieux " les polynômes sur $[-1, 1]$.

On peut aussi utiliser une double quadrature de Gauss-Legendre obtenue en prenant une quadrature de Gauss-Legendre à $\frac{n_p}{2}$ directions ξ_p et de poids w_p . On obtient les n_r directions et poids par symétrie :

$$\begin{aligned} \xi_i^r &= \frac{\xi_i - 1}{2}, w_i^r = w_i/2, i = 1 \dots \frac{n_r}{2}, \\ \xi_{i+\frac{n_p}{2}}^r &= \frac{\xi_i + 1}{2}, w_i^r = w_i/2, i = 1 \dots \frac{n_r}{2}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Pour intégrer la fonction en θ , on utilise une formule de quadrature de type Gauss-Chebyshev qui revient à utiliser une formule d'intégration équidistante et équipoids sur le cercle :

$$\begin{aligned} \theta_p &= \cos\left(\frac{\pi}{n_\theta} \left(pp - \frac{1}{2}\right)\right), \\ w_{pp}^\theta &= \frac{1}{n_\theta}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

3.4.2 Le problème des géométries de rotations et symétries

Pour éviter d'avoir à faire un calcul de transport sur un domaine entier, on peut utiliser les symétries et rotations du problème.

La méthode des caractéristiques nécessite (comme nous le verrons plus loin) de suivre les neutrons le long de leur trajectoire. L'ensemble des trajectoires définies sur le domaine de calcul doit alors être invariant pour les différentes conditions aux limites de rotation ou symétries utilisées.

3.4.3 Cas des rotations d'angle α

Le domaine total est recouvert par rotations successives d'un angle α du domaine. On ne cherche qu'à calculer les angles du premier octant : les autres sont obtenus par symétrie. On cherchera donc à avoir

une quadrature circulaire symétrique par rapport à $\frac{\pi}{2}$.

Cas des rotations d'angle $\alpha = \frac{\pi}{N}$

On remarque que α divise π . La condition de symétrie de la quadrature par rapport à π impose que la quadrature soit symétrique sur $[0, \alpha]$. On les définit alors sur $[0, \frac{\alpha}{2}]$ (équipoids, Gauss-Legendre ou Double Gauss-Legendre) puis on complète par symétrie. Cette condition impose aussi la symétrie par rapport à $\frac{\pi}{2}$.

Cas des rotations d'angle $\alpha = \frac{2\pi}{2N+1}$

Pour obtenir la symétrie par rapport à $\frac{\pi}{2}$, les points de quadrature doivent être symétriques sur $[0, \frac{\alpha}{2}]$. Pour obtenir la symétrie par rapport à π , les points de quadrature doivent aussi être symétriques sur $[0, \alpha]$. On les définit alors sur $[0, \frac{\alpha}{4}]$ puis on complète par symétrie sur $[0, \alpha]$.

3.4.4 Cas des symétries d'angle α

Il est nécessaire que α divise π car une double symétrie est équivalente à une rotation d'angle 2α . On peut donc écrire $\alpha = \frac{\pi}{N}$. Si N est pair alors la symétrie par rapport $\frac{\pi}{2}$ est respectée. Si N est impaire, il faut que la quadrature soit symétrique sur $[0, \alpha]$ pour avoir une symétrie de quadrature. On peut construire alors les quadratures de la même manière que précédemment.

3.4.5 Le problème des trajectoires cycliques

Dans le but de pouvoir calculer un domaine avec des conditions aux limites raisonnables (de type réflexion par exemple), on voit que pour la majorité des directions on va effectuer une trajectoire infinie (voir figure 6)

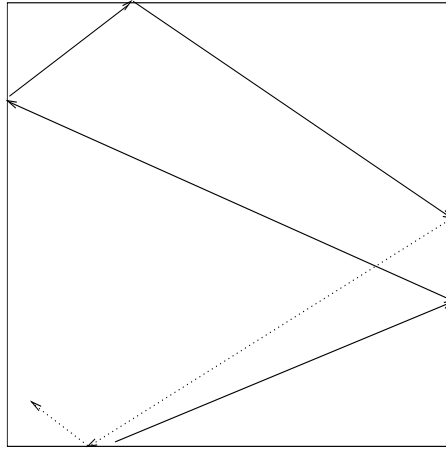


FIGURE 6 – Trajectoire quelconque sur un domaine avec réflexion.

Seules certaines trajectoires permettent après un nombre fini de réflexions de revenir au même point et ont donc une longueur finie (voir figure 7)

Les trajectoires cycliques à déterminer dépendent du domaine utilisé et on va détailler la méthode de calcul de ces trajectoires pour le cas de domaines rectangulaires et hexagonaux.

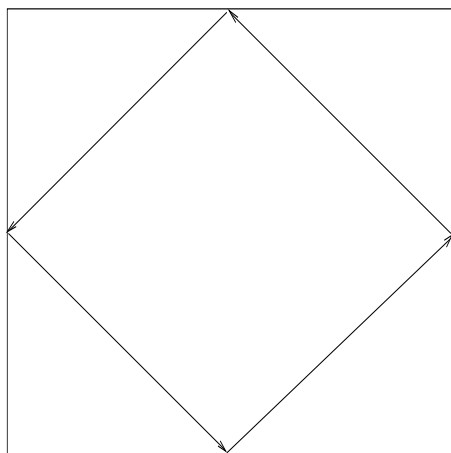


FIGURE 7 – Trajectoire cyclique sur une domaine avec reflexion.

3.4.6 Le cas d'un domaine de calcul rectangulaire

Sur la figure 8 on a représenté le domaine rectangulaire initial de taille (a, b) que l'on a dupliqué dans un domaine "infini" pour suivre les trajectoires.

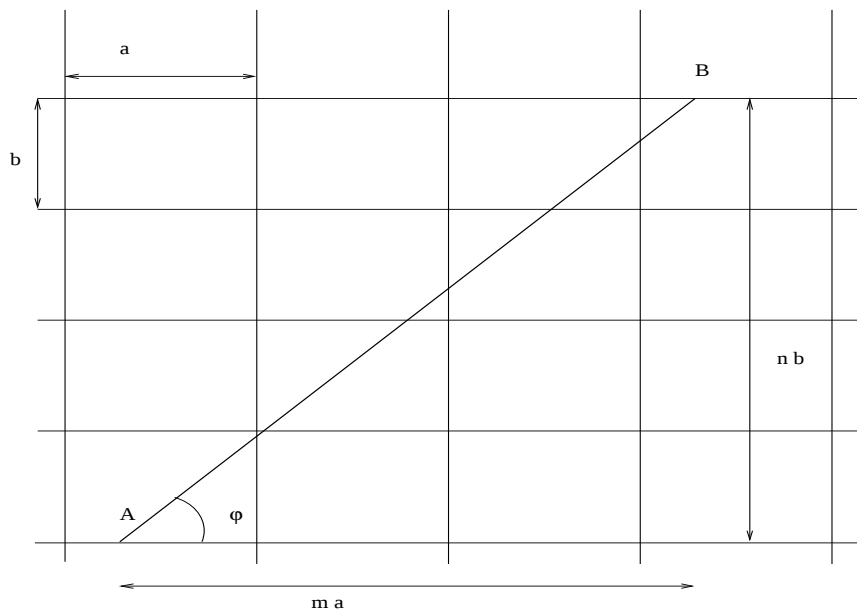


FIGURE 8 – Trajectoire cyclique sur une domaine rectangulaire avec reflexion

Pour qu'une trajectoire soit cyclique il faut et il suffit que $\overrightarrow{AB} = m\vec{a} + n\vec{b}$ où m et n sont des entiers : on a alors :

$$\tan(\theta) = \frac{nb}{ma}. \quad (3.30)$$

On se limite toujours à déterminer les trajectoires sur $[0, \frac{\pi}{2}]$ et on déduit les autres par symétrie.

Pour éviter d'obtenir deux fois la même trajectoire, on prendra m et n premiers entre eux. On pourra choisir de prendre des directions les plus équidistantes possibles ou bien les choisir de telle sorte que la taille de la trajectoire (avant de revenir au point de départ) soit minimale. Il est nécessaire de conserver les indices m et n pour savoir le nombre de domaines élémentaires traversés par cette trajectoire sur une période.

3.4.7 Le cas d'un domaine de calcul hexagonal

Sur la figure 9 on a représenté le domaine hexagonal initial de taille h que l'on a dupliqué dans un domaine "infini" pour suivre les trajectoires.

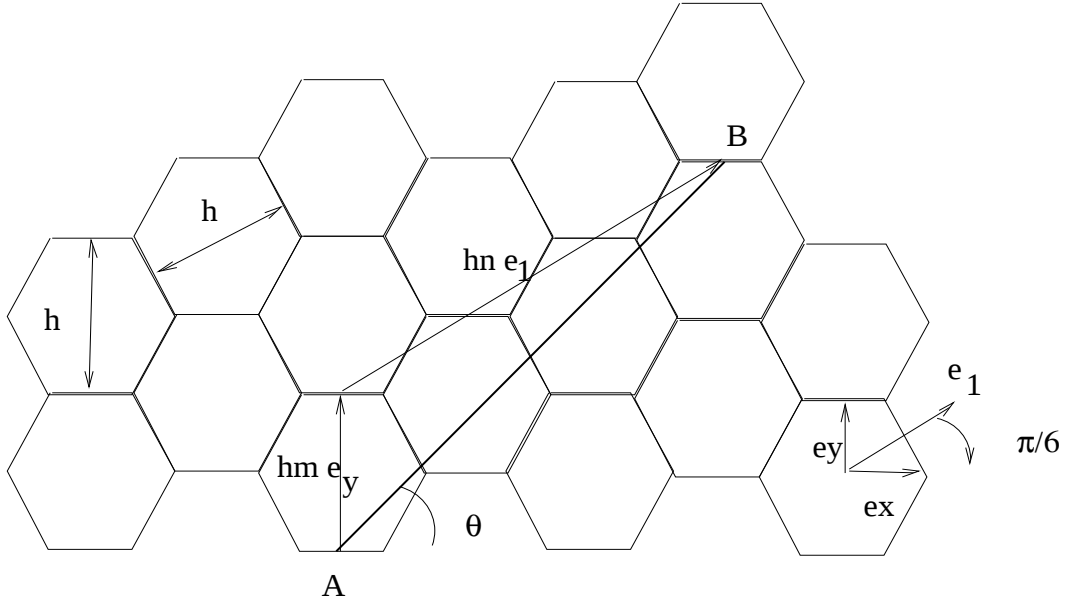


FIGURE 9 – Trajectoire cyclique sur une domaine hexagonal avec reflexion

Pour qu'une trajectoire soit cyclique il faut et il suffit que :

$$\overrightarrow{AB} = h(m\vec{e}_y + n\vec{e}_1). \quad (3.31)$$

Or $\vec{e}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_x + \frac{1}{2}\vec{e}_y$ d'où

$$\overrightarrow{AB} = h((m + \frac{n}{2})\vec{e}_y + \frac{\sqrt{3}}{2}n\vec{e}_x). \quad (3.32)$$

on a alors l'angle azimutal correspondant qui vérifie :

$$\tan(\theta) = \frac{1}{\sqrt{3}}(2\frac{m}{n} + 1) \quad (3.33)$$

On choisit donc les angles qui vérifient (3.33) et tels que m et n sont premiers entre eux. Comme pour le domaine rectangulaire, il faut stocker m et n pour connaître la longueur de la trajectoire et le nombre d'hexagones traversés. Dans le cas où le domaine global est obtenu par translation infinie d'un hexagone dans les directions $\vec{e}_x$ et $\vec{e}_1$, il faut déterminer les angles azimutaux sur $[0, \frac{\pi}{2}]$. Les autres octants se déduisent par symétrie.

Dans le cas où le domaine global est obtenu par symétrie par rapport aux côtés des hexagones il suffit de déterminer les angles azimutaux sur $[0, \frac{\pi}{6}]$. On déduit les autres par symétrie par rapport à $\frac{\pi}{6}$ puis symétrie par rapport à $\frac{\pi}{3}$.

3.4.8 Poids associés aux angles azimutaux

Les directions dans le cas cyclique sont des directions particulières et il a été choisi de prendre simplement les poids donnés par la formule suivante en supposant les directions rangées dans un ordre croissant (voir 5) :

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{\theta_1 + \theta_2}{2\pi} \\ w_n^\theta &= \frac{\theta_{n+1} + \theta_n}{2\pi} - \frac{\theta_n + \theta_{n-1}}{2\pi}, \quad \forall n \in [2, n_{\theta-1}], \\ w_{n_\theta}^\theta &= \frac{1}{2\pi} - \frac{\theta_{n_\theta} + \theta_{n_{\theta-1}}}{2\pi}. \end{aligned} \tag{3.34}$$

4 La méthode des caractéristiques

4.1 Présentation

Les méthodes de caractéristique et tout particulièrement la méthode step caractéristique premièrement présentée ont tout d'abord été développées sur des maillages réguliers comme une alternative aux méthodes de schéma Diamant (voir 2).

La méthode step caractéristique est basée sur des équations bilan à l'intérieur de chaque maille qui sont couplées avec des moments du flux angulaires qui sont obtenus à partir du calcul exact de propagation à l'intérieur des cellules.

L'idée de base des méthodes de caractéristiques consiste à employer une formule de discrétisation angulaire S_n par exemple et d'approximer les flux angulaires volumiques et de surface pour chaque direction de discrétisation. Pour approcher les flux angulaires de surfaces on trace des trajectoires parallèles et on associe à chaque trajectoire un tube autour d'elle, de façon à ce que les trajectoires définissent une partition du domaine (voir figure 10 pour une représentation 2D d'une direction de tracé). Dans la pra-

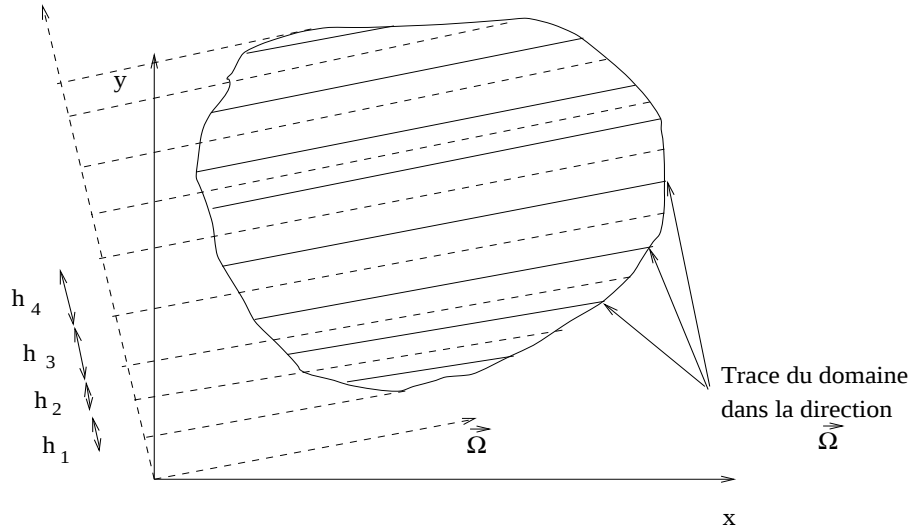


FIGURE 10 – tracé de trajectoire pour une direction donnée en 2D

tique, cela veut dire que chaque trajectoire se voit associer un poids égal à la traverse du tube qui lui est associée (ce sont les h_i de la figure 10). On va alors employer ces trajectoires en supposant que les sources volumiques sont constantes dans chaque maille de discrétisation du domaine. Il est clair que la performance de cette méthode de caractéristiques dépend de l'efficacité du traceur.

Comme on l'a vu au paragraphe précédent sur les méthode S_n on se limite à étudier l'inversion d'une équation du type de l'équation 3.4 où on ne fait pas apparaître les directions discrétisées :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \psi(r, \vec{\Omega}) = q(r, \vec{\Omega}). \quad (4.1)$$

4.2 La méthode Step Caractéristique

On commence par effectuer un maillage du domaine de calcul (avec des mailles de calcul homogènes) et pour chaque direction angulaire $\vec{\Omega}$, on approche le flux angulaire par un développement constant par morceaux :

$$\psi(r, \vec{\Omega}) \simeq \sum_i \psi_i(\vec{\Omega}) \theta_i(r), \quad (4.2)$$

où $\theta_i(r)$ est la fonction caractéristique de la région i . Nous utilisons ensuite l'équation intégrale :

$$\psi(r, \vec{\Omega}) = \psi(r - R\vec{\Omega}, \vec{\Omega})e^{-\tau(r-R\vec{\Omega})} + \int_0^R dt e^{-\tau(r-t\vec{\Omega})} q(r - t\vec{\Omega}, \vec{\Omega}), \quad (4.3)$$

où $\tau(r, r') = \int_0^{d(r, r')} ds \Sigma_t(r + s \frac{r' - r}{d(r, r')})$ est la distance optique pour calculer le flux sortant d'une région par un point de sa surface ψ_i^{out} , en fonction du flux entrant ψ_i^{in} et des sources internes à la région :

$$\psi_i^{out}(r, \vec{\Omega}) = \psi_i^{in}(r - R\vec{\Omega}, \vec{\Omega})e^{-\Sigma_{ti}R} + \beta_i(r, \vec{\Omega})q_i(\vec{\Omega}). \quad (4.4)$$

Dans cette expression r est un point sortant sur la surface de la région en direction $\vec{\Omega}$ et R est la longueur de traversée dans la région. L'intégrale le long de la trajectoire dans (4.3) a été calculée avec l'approximation (4.2) de flux angulaire constant dans la région, et β est la probabilité de fuite en direction $\vec{\Omega}$:

$$\beta_i(r, \vec{\Omega}) = \frac{1 - e^{-\Sigma_i R}}{\Sigma_i}. \quad (4.5)$$

Dans la pratique on trace dans chaque direction $\vec{\Omega}$ une famille de trajectoires et on associe à chaque trajectoire un volume autour d'elle. Ainsi pour chaque direction $\vec{\Omega}$, le volume du domaine est distribué entre les trajectoires associées à cette direction.

Pour construire une solution itérative, il nous reste encore à calculer les flux volumiques en terme des flux de surface. En intégrant (4.3) sur le volume d'une maille et après avoir utilisé la formule de Green on obtient :

$$V_i \Sigma_{ti} \psi_i(\vec{\Omega}) = V_i q_i(\vec{\Omega}) + J_i^{in}(\vec{\Omega}) - J_i^{out}(\vec{\Omega}), \quad (4.6)$$

où les courants entrant et sortant de la maille i dans la direction $\vec{\Omega}$ sont donnés par les expressions :

$$\begin{aligned} J_i^{out}(\vec{\Omega}) &= \int_{S_i^{out}(\vec{\Omega})} dS |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \psi(r, \vec{\Omega}) \\ J_i^{in}(\vec{\Omega}) &= \int_{S_i^{in}(\vec{\Omega})} dS |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \psi(r, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (4.7)$$

S_i^{out} (respectivement S_i^{in}) indique la surface sortante (entrante) pour la direction $\vec{\Omega}$ de la maille i .

Les intégrations sur les surfaces entrantes et sortantes se font en considérant l'intersection de ces surfaces avec les 'tubes' définis par les trajectoires (voir figure 11). Comme pour chaque trajectoire qu'intersecte

la région on a $dS = \frac{dS_{\perp}}{|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}|}$, on obtient :

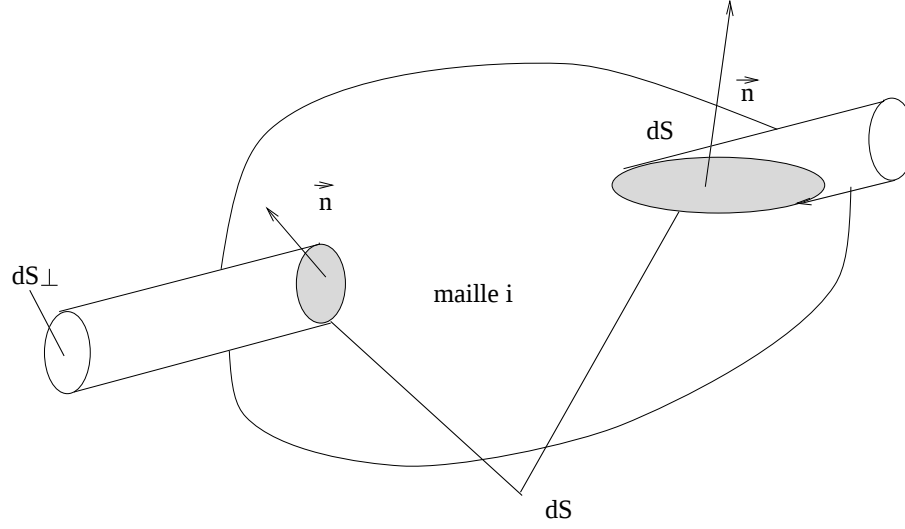
$$J_i^{out}(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{t=traj \vec{\Omega}} S_{\perp} \psi_i^{out}(t, \vec{\Omega}), \quad J_i^{in}(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{t=traj \vec{\Omega}} S_{\perp} \psi_i^{in}(t, \vec{\Omega}), \quad (4.8)$$

où la somme est faite sur toutes les trajectoires t et $\psi_i(t)$ désigne les flux entrant et sortant de la maille i par le 'tube' défini par la trajectoire t et la 'section' $S_{\perp} = S_{\perp}(t, \vec{\Omega})$ représente le poids spatial associé à la trajectoire (pour des trajectoire uniformément espacées $S_{\perp}$ est constant). A l'aide de ces approximations, l'équation bilan (4.6) devient :

$$\psi_i(\vec{\Omega}) = \frac{1}{\Sigma_{ti}} (q_i(\vec{\Omega}) - \frac{1}{V_i} \hat{\Delta}_i(\vec{\Omega})), \quad (4.9)$$

où

$$\hat{\Delta}_i(\vec{\Omega}) = \sum_{traj \vec{\Omega}} S_{\perp} (\psi_i^{out}(\vec{\Omega}) - \psi_i^{in}(\vec{\Omega})). \quad (4.10)$$

FIGURE 11 – Une trajectoire traversant la maille i

Cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\psi_i(\vec{\Omega}) = \Pi_i(\vec{\Omega})q_i(\vec{\Omega}) - \frac{1}{V_i}\Delta_i(\vec{\Omega}), \quad (4.11)$$

où

$$\begin{aligned} \Delta_i(\vec{\Omega}) &= \sum_{traj \vec{\Omega}} \beta_i(t, \vec{\Omega}) \psi_i^{in}(\vec{\Omega}), \\ \Pi_i(\vec{\Omega}) &= \frac{1}{\Sigma_{ti}} \left(1 - \frac{1}{V_i} \sum_{traj \vec{\Omega}} S_{\perp} \beta_i(t, \vec{\Omega})\right). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Avec les équations (4.4), (4.11), (4.2), on peut définir le processus itératif suivant : on parcourt toutes les trajectoires en calculant itérativement pour chaque trajectoire les flux sortants en fonction des flux entrants :

$$\psi_i^{out}(t, \vec{\Omega}) = \psi_i^{in}(t, \vec{\Omega}) + \beta_i(r, \vec{\Omega})(q_i^{old}(\vec{\Omega}) - \Sigma_{ti} \psi_i^{in}(t, \vec{\Omega})), \quad (4.13)$$

et en employant ces flux pour cumuler des nouvelles valeurs pour les $\Delta_i(\vec{\Omega})$. Les $\Delta_i(\vec{\Omega})$ sont employés à la fin du balayage pour calculer les nouvelles valeurs du flux angulaire dans les régions à l'aide de (4.11). Le choix de la formulation (4.11) plutôt que (4.9) a été effectué de manière à minimiser les effets dus aux parcours optiques $\tau = \Sigma_{ti}R$. On note que dans la pratique, on effectue une renormalisation du parcours optique de manière à avoir un volume numérique égal au volume réel. Le volume intégré est pour une maille i et une direction $\vec{\Omega}$, $\sum_{t \in traj \vec{\Omega}} S_{\perp} R(t, \vec{\Omega})$. Une trajectoire $R(t, \vec{\Omega})$ sera donc normalisée par :

$$R(t, \vec{\Omega}) \longrightarrow R(t, \vec{\Omega}) \frac{V_i}{\sum_{t' \in traj \vec{\Omega}} S_{\perp} R(t', \vec{\Omega})}. \quad (4.14)$$

Remarque 4.1 On note qu'il s'agit d'une renormalisation par trajectoire. Il est aussi possible de faire

une normalisation par le volume numérique global par le facteur de normalisation $\frac{V_i}{\sum_{\vec{\Omega}'} W_{\vec{\Omega}'} \sum_{t' \in \text{traj} \vec{\Omega}'} S_{\perp} R(t', \vec{\Omega}')} ,$

où les $W_{\vec{\Omega}}$ sont les poids associés à la direction $\vec{\Omega}$.

Il faut insister sur les approximations introduites dans la méthode Step Caractéristique. Nous considérons donc les équations bilan (4.6) et de propagation (4.3). Le bilan global est conservé car on utilise une équation bilan par maille. Il s'agit d'une équation exacte : lors de sa mise en oeuvre la seule approximation est de supposer les flux angulaires constants par morceaux sur les surfaces (intersection des tubes avec la surface des mailles). La méthode des caractéristiques permet en principe de choisir des régions assez grandes car on s'est débarrassé de l'approximation Diamant. Toutefois, le fait que l'on se limite à des flux volumiques constants par maille établit une limite à la taille des régions qu'on peut envisager. Par ailleurs, la distance entre trajectoires devra être assez petite de manière à permettre d'approcher convenablement les flux angulaires sur la surface des régions.

4.3 Une méthode d'accélération synthétique pour la méthode step caractéristique

Comme on l'a vu dans un chapitre précédent, l'itération sur le terme de scattering (3.4) peut avoir du mal à converger si le rapport $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ est proche de 1 dans certaines régions. Certaines méthodes telles que le rebalancing peuvent être utilisées mais sont généralement peu efficaces pour de trop grandes valeurs de c . On modifie alors le schéma (3.4) de la manière suivante :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(r) \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi^k(r, \vec{\Omega}') + S(r), \quad (4.15)$$

$$\phi^{k+\frac{1}{2}}(r) = \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}'). \quad (4.16)$$

$\phi^{k+\frac{1}{2}}$ désigne le résultat non accéléré de la $(k+1)^{ieme}$ itération, les termes en $(k+\frac{1}{2})$ désigneront toujours les résultats de l'équation de transport non accélérée.

Dans le cas où il n'y a pas d'accélération, on pose :

$$\psi^{k+1}(r, \vec{\Omega}_m) = \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}_m),$$

$$\phi^{k+1}(r) = \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}').$$

Quand une technique d'accélération est utilisée, on évalue ϕ^{k+1} d'une autre manière. On effectue alors successivement à chaque itération :

1. une phase de résolution de l'équation de transport,
2. une phase d'accélération.

Pour la phase d'accélération, on pose après l'étape (4.16) :

$$R^{k+\frac{1}{2}}(r) = \Sigma_s(\phi^{k+\frac{1}{2}}(r) - \phi^k(r)),$$

et

$$\epsilon^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) = \psi^{k+1}(r, \vec{\Omega}) - \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}).$$

On reprend l'équation (4.15) dans sa version continue et on remplace les indices $k+\frac{1}{2}$ et k par l'indice $k+1$.

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi^{k+1}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \psi^{k+1}(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(r) \phi^{k+1}(r) + S(r). \quad (4.17)$$

On lui soustrait :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \psi^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(r) \phi^k(r) + S(r) \quad (4.18)$$

pour obtenir :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \epsilon^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \epsilon^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(r) \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \epsilon^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}') + R^{k+\frac{1}{2}}(r). \quad (4.19)$$

On ne résout alors pas cette équation (qui est aussi difficile à résoudre que l'équation initiale), mais on utilise classiquement une approximation par une équation de diffusion obtenue en prenant les premiers moments angulaires de l'équation précédente :

$$\text{div}(\hat{\vec{J}}^{k+\frac{1}{2}}(r)) + \Sigma_a \hat{\phi}^{k+\frac{1}{2}}(r) = R^{k+\frac{1}{2}}(r), \quad (4.20)$$

$$\frac{1}{3} \text{grad} \hat{\phi}^{k+\frac{1}{2}}(r) + \Sigma_a \hat{\vec{J}}^{k+\frac{1}{2}}(r) = 0. \quad (4.21)$$

où :

$$\hat{\vec{J}}^{k+\frac{1}{2}}(r) = \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \vec{\Omega}' \hat{\psi}^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}'), \quad (4.22)$$

$$\hat{\phi}^{k+\frac{1}{2}}(r) = \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \hat{\psi}^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}'), \quad (4.23)$$

et

$$\Sigma_a(r) = \Sigma_t(r) - \Sigma_s(r). \quad (4.24)$$

En éliminant le courant, on obtient :

$$-\text{div}(D(r) \text{grad}(\hat{\phi}^{k+\frac{1}{2}}(r))) + \Sigma_a(r) \hat{\phi}^{k+\frac{1}{2}}(r) = R^{k+\frac{1}{2}}(r), \quad (4.25)$$

qui est bien une équation de diffusion standard. Il ne reste plus qu'à poser :

$$\phi^{k+1}(r) = \phi^{k+\frac{1}{2}}(r) + \hat{\phi}^{k+\frac{1}{2}}(r).$$

On va voir dans la suite comment on peut aboutir à une équation de diffusion de type (4.20) à partir des équations de caractéristiques obtenue par discrétisation de l'équation (4.19) qui est une équation de transport classique et que l'on peut donc écrire de la forme :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(r) \psi(r, \vec{\Omega}) = \Sigma_s(r) \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \psi(r, \vec{\Omega}') + s. \quad (4.26)$$

La discrétisation de cette équation aboutit à une équation bilan de type de (4.6) et une équation de propagation de type (4.4).

Pour obtenir l'équation de diffusion voulue, on commence par intégrer sur les angles l'équation bilan de type (4.6) pour obtenir :

$$V_i \Sigma_{ti} \phi_i = V_i (\Sigma_{si} \phi_i + S_i) + \sum_{\alpha \in i} (J_{\alpha i}^- - J_{\alpha i}^+), \quad (4.27)$$

où la somme se fait sur tous les côtés α de la région i , ϕ_i et S_i est le flux et la source moyenne (intégrés angulairement) dans la région i , $J_{\alpha i}^{in}$ et $J_{\alpha i}^{out}$ sont respectivement les courants sortant et entrant de la région i par le côté α :

$$J_{\alpha i}^{+-} = \int_{\alpha} dS \int_{2\pi \pm} d\vec{\Omega} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \psi(r, \vec{\Omega}). \quad (4.28)$$

Pour calculer le flux il est nécessaire d'ajouter une nouvelle relation à l'équation (4.27). Pour obtenir une accélération consistante numériquement avec la méthode de caractéristiques nous utilisons une équation de propagation de type (4.4) pour obtenir une équation supplémentaire. Contrairement à la DSA, on distingue courant entrant et sortant du domaine. On suppose que les flux entrant et sortant sont isotropes dans les directions entrantes et sortantes. Ce flux s'écrira :

$$\psi_{in}(r, \vec{\Omega}) \simeq \frac{1}{\pi S_\alpha} J_{\alpha i}^- \quad \text{pour } r \text{ sur le côté } \alpha \text{ de surface } S_\alpha. \quad (4.29)$$

A l'aide de cette approximation, on obtient après intégration de l'équation de type (4.4) sur les directions sortantes et sur un côté de sortie,

$$J_{\alpha i}^+ = \sum_{\beta \in i} T_{\alpha\beta}^i J_{\beta i}^- + E_{\alpha i} V_i (\Sigma_{si} \phi_i + S_i). \quad (4.30)$$

Remarque 4.2 Dans cette équation $\beta \in i$ signifie que β est un côté du volume i .

Dans cette équation :

$$T_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{\pi S_\beta} \int_{\alpha} dS \int_{\beta \rightarrow \alpha(r)} d\vec{\Omega} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| e^{-\Sigma_i R} \quad (4.31)$$

est la probabilité de transmission du côté β vers le côté α . La figure 12 permet de visualiser l'intégrale

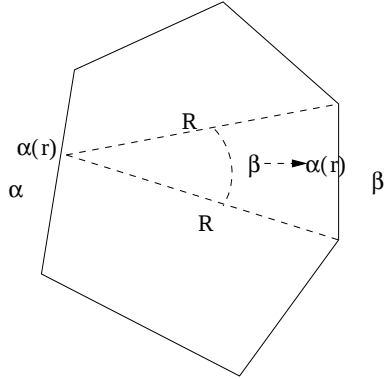


FIGURE 12 – Visualisation de l'intégrale $\int_{\beta \rightarrow \alpha(r)}$.

de calcul $\int_{\beta \rightarrow \alpha(r)}$.

$E_{\alpha i}$ est la probabilité de fuite de la région i par le côté α :

$$\begin{aligned} E_{\alpha i} &= \frac{1}{4\pi V_i} \int_{\alpha} dS \sum_{\beta \in i} \int_{\beta \rightarrow \alpha(r)} d\vec{\Omega} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \beta_i \\ &= \frac{1}{4\Sigma_{ti} V_i} (S_\alpha - \sum_{\beta \in i} T_{\alpha\beta}^i S_\beta) = \frac{S_\alpha}{4\Sigma_{ti} V_i} (1 - T_\alpha^i) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Les probabilités de transmission obéissent à la réciprocité suivante :

$$T_{\beta\alpha}^i S_\alpha = T_{\alpha\beta}^i S_\beta, \quad (4.33)$$

et se calcule numériquement grâce à la formule :

$$T_{\alpha\beta}^i \simeq \frac{4}{S_\beta} \sum_{trajec \vec{\Omega} / \beta \rightarrow \alpha} S_\perp W_{\vec{\Omega}} e^{-\Sigma_{ti} R} \quad (4.34)$$

De plus, dans l'équation (4.32), on a défini la probabilité totale de transmission à partir de la surface α :

$$T_{\alpha}^i = \sum_{\beta \in i} T_{\beta\alpha}^i. \quad (4.35)$$

A l'aide des équations (4.27) et (4.30), on peut éliminer les flux moyens pour obtenir une équation en courants : on commence par injecter (4.30) dans (4.27) pour obtenir :

$$\sum_{\alpha \in i} ((\sum_{\beta \in i} T_{\alpha\beta}^i J_{\beta i}^- + E_{\alpha i} V_i (\Sigma_{si} \phi_i + S_i)) - J_{\alpha i}^-) + V_i \Sigma_{ai} \phi_i = V_i S_i. \quad (4.36)$$

Cette équation peut s'écrire :

$$\sum_{\beta \in i} (T_{\beta}^i - 1) J_{\beta i}^- + V_i (E_i \Sigma_s + \Sigma_a) \phi_i = S_i V_i (1 - E_i), \quad (4.37)$$

où

$$E_i = \sum_{\alpha \in i} E_{\alpha i}. \quad (4.38)$$

On aboutit alors à l'expression suivante pour le flux dans la région i :

$$\phi_i = \frac{S_i (1 - E_i)}{E_i \Sigma_{si} + \Sigma_{ai}} + \sum_{\beta \in i} \frac{(1 - T_{\beta}^i)}{V_i (E_i \Sigma_{si} + \Sigma_{ai})} J_{\beta i}^-, \quad (4.39)$$

ou encore en utilisant (4.32)

$$\phi_i = \frac{S_i (1 - E_i)}{E_i \Sigma_{si} + \Sigma_{ai}} + \sum_{\beta \in i} \frac{4 \Sigma_{ti} E_{\beta i}}{S_{\beta} (E_i \Sigma_{si} + \Sigma_{ai})} J_{\beta i}^-, \quad (4.40)$$

On peut alors injecter l'équation (4.40) dans l'équation (4.30) pour obtenir :

$$J_{\alpha i}^+ = \sum_{\beta \in i} (T_{\alpha\beta}^i + \frac{4 E_{\alpha i} V_i \Sigma_{ti} \Sigma_{si} E_{\beta i}}{S_{\beta} (E_i \Sigma_{si} + \Sigma_{ai})}) J_{\beta i}^- + S_i \frac{E_{\alpha i} V_i \Sigma_{ti}}{E_i \Sigma_{si} + \Sigma_{ai}} \quad (4.41)$$

On utilise l'ensemble de ces équations obtenues pour chaque facette de chaque élément et on note que le courant entrant d'une facette d'une maille i est le courant sortant de la maille voisine. On peut donc numéroter les courants sur le maillage global (il y en a deux par facette) (voir figure (13)).

On aboutit à un système en courant creux et non symétrique. Ici deux stratégies peuvent être utilisées :

- soit on utilise un solveur direct qui nécessite de factoriser la matrice (solveur multifrontal avec minimisation de la bande). Cette technique demande beaucoup de stockage mais une fois la factorisation effectuée, la résolution (descente remontée) est très rapide,
- soit un solveur itératif : le plus efficace est le Bicgstab.

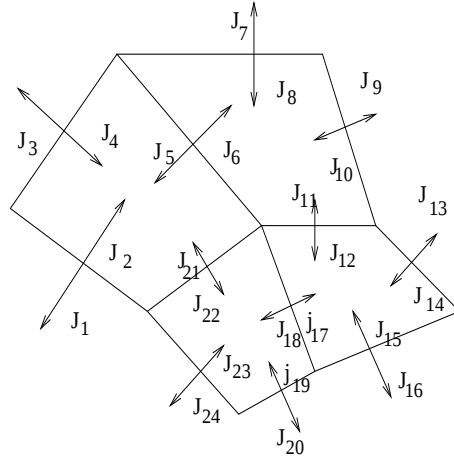


FIGURE 13 – Numerotation des courants partiels sur un maillage.

La seconde a été implantée et on donne l'algorithme du Bicgstab pour l'inversion du système $Ax = b$ et en utilisant un préconditionneur M en (4.42).

Calcul $R^0 = b - Ax^0$ pour un vecteur initial x^0
 Choisir $\hat{r}$ (par exemple $\hat{r} = r^0$)
 Pour $i = 1, 2, \dots$
 $\rho_{i-1} = \hat{r}^T r^{i-1}$
 si $\rho_{i-1} = 0$, echec
 si $i = 1$
 $p^i = r^{i-1}$
 sinon
 $\beta_{i-1} = \frac{\rho_{i-1} \alpha_{i-1}}{\rho_{i-2} w_{i-1}}$
 $p^i = r^{i-1} + \beta_{i-1}(p^{i-1} - w_{i-1}v^{i-1})$
 fin de si
 résoudre $M\hat{p} = p^i$
 $v^i = A\hat{p}$
 $\alpha_i = \frac{\rho_{i-1}}{\hat{r}^T v^i}$
 $s = r^{i-1} - \alpha_i v^i$
 Vérifier norme de s , si petite $x^i = x^{i-1} + \alpha_i \hat{p}$, stop
 Résoudre $M\hat{s} = s$
 $t = A\hat{s}$
 $w_i = \frac{t^T s}{t^T t}$
 $x^i = x^{i-1} + \alpha_i \hat{p} + w_i \hat{s}$
 $r^i = s - w_i t$
 Vérifier convergence , et continuer si nécessaire
 w_i doit être différent de zéro
 fin de boucle for

(4.42)

Le préconditionneur utilisé initialement est le préconditionneur diagonal. Des essais ont été effectués avec des préconditionneurs plus efficaces tels que le préconditionneur MILU :

On suppose que l'on cherche à préconditionner une matrice A . On note S l'ensemble des couples (i, j) tels que l'élément de la matrice $A_{i,j}$ est non nul . L'algorithme suivant transforme la matrice A d'ordre n en une matrice de préconditionnement $M = LU$. La matrice L est une matrice triangulaire inférieure. La

matrice U est une matrice triangulaire supérieure. Les coefficients de L et U sont stockés dans la matrice A .

$$\begin{aligned}
 &\text{Pour } r = 1 \text{ à } n - 1 \\
 &\quad d = \frac{1}{a_{r,r}}; \\
 &\quad \text{Pour } i = r + 1 \text{ à } n \\
 &\quad \quad \text{Si } (i, r) \in S \\
 &\quad \quad \quad e = a_{i,r}d; a_{i,r} = e \\
 &\quad \quad \text{Pour } j = r + 1 \text{ à } n \\
 &\quad \quad \quad \text{Si } (j, r) \in S \\
 &\quad \quad \quad \quad \text{Si } (i, j) \in S \\
 &\quad \quad \quad \quad \quad a_{i,j} = a_{i,j} - ea_{r,j} \\
 &\quad \quad \quad \quad \text{sinon} \\
 &\quad \quad \quad \quad \quad a_{i,i} = a_{i,i} - ea_{r,j} \\
 &\quad \quad \quad \quad \text{Fin de si} \\
 &\quad \quad \text{Fin de si} \\
 &\quad \text{Fin de pour} \\
 &\quad \text{Fin de si} \\
 &\text{Fin de pour}
 \end{aligned} \tag{4.43}$$

L'inversion de M se fait de manière très simple grâce à l'algorithme de Choleski.

Il est alors possible de recalculer les flux à partir de l'équation (4.40).

La prise en compte des conditions aux limites est immédiate que ce soit une symétrie, une réflexion isotrope avec albedo. Dans le cas d'une rotation par exemple, le courant entrant dans une maille par un bord du domaine est le courant sortant de la maille obtenue par rotation de la maille initiale.

4.3.1 Calcul par la méthode Step caractéristique aux trajectoires cycliques

Le problème des trajectoires cycliques vient du fait que quand on commence la trajectoire (comme au point A de la figure 14) on ne connaît pas le flux entrant. On part donc d'un flux nul. Après avoir

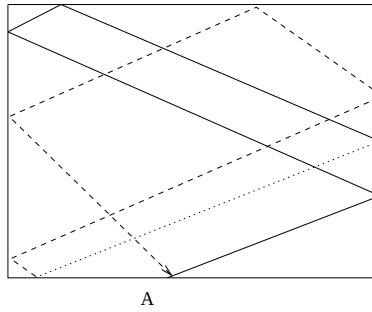


FIGURE 14 – Trajectoire cyclique dans un carre

tracé la trajectoire, on revient au point A de la figure 14. On note $\psi_i^{out,1}$, $i = 1, N$ les valeurs du flux obtenus sur une trajectoire partant de A avec un flux nul et revenant en A. N est donc le nombre de régions traversées par cette trajectoire et ψ_i^{out} les flux sortant de la i^{eme} région traversée.

Si on continue à suivre la trajectoire et que l'on stocke ses valeurs dans $\psi_i^{out,2}$, on obtiendra que :

$$\psi_N^{out,2} = \psi_N^{out,1} + \psi_N^{out,1} * e^{-\sum_{i=1}^N \Sigma_{ti} R_i} \tag{4.44}$$

Si on continue à suivre la trajectoire jusqu'à convergence du flux, on aboutit à

$$\psi_N^{out,\infty} = \psi_N^{out,1} * \frac{1}{1 - e^{-\sum_{i=1}^N \Sigma_{ti} R_i}} \quad (4.45)$$

et donc

$$\psi_i^{out,\infty} = \psi_N^{out,\infty} + \psi_i^{out,1}, \quad i = 1, N-1. \quad (4.46)$$

Cette équation fournit le flux le long de la trajectoire et se calcule facilement après le calcul de $\psi_i^{out,1}$, $i = 1, N$ et $\psi_N^{out,\infty}$ donné par l'équation (4.45).

4.4 Schéma diamant pour la méthode des caractéristiques

On développe ici les calculs obtenus par utilisation d'un schéma diamant pour résoudre les équations de transport le long des trajectoires. Cette méthode est encore à introduire dans la version TDT de SUNSET. Ce schéma donne des résultats très voisins du schéma step caractéristique pour les cas classiques de calcul d'assemblage en milieu infini. Il permet en géométrie cartésienne d'avoir une convergence en $O(h^2)$ où h est le diamètre de la maille. Ce schéma bénéficie aussi d'une technique d'accélération très efficace et dont le nombre d'inconnu est égal au nombre de mailles (et non deux fois le nombre d'arrêtes comme c'est le cas pour la méthode d'accélération pour le schéma step caractéristique). Il présente cependant l'inconvénient de ne pas assurer la positivité de la solution ce qui est gênant surtout pour les problèmes de propagation. Des techniques de fix-up sont utilisées pour éviter d'avoir des flux négatifs (voir 7) et donnent des schémas dont on peut montrer empiriquement qu'ils convergent plus vite. L'utilisation de l'accélération par la diffusion est alors problématique.

L'obtention du schéma est aisée :

On garde l'équation bilan (4.6)

$$V_i \Sigma_{ti} \psi_i(\vec{\Omega}) = V_i q_i(\vec{\Omega}) + J_i^{in}(\vec{\Omega}) - J_i^{out}(\vec{\Omega}). \quad (4.47)$$

Il ne reste plus qu'à obtenir l'équivalent de l'équation de propagation (4.4). Pour cela on applique un schéma diamant pour chaque caractéristique sur une maille i et une trajectoire t de direction $\vec{\Omega}$:

$$\frac{\psi_i^{out}(t, \vec{\Omega}) - \psi_i^{in}(t, \vec{\Omega})}{R(t, \vec{\Omega})} + \Sigma_{ti} \psi_i(t, \vec{\Omega}) = q_i(\vec{\Omega}), \quad (4.48)$$

où :

$$\psi_i = \frac{\psi_i^{out} + \psi_i^{in}}{2}. \quad (4.49)$$

L'équation (4.48) peut donc se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \psi_i(t, \vec{\Omega}) &= \frac{q_i(\vec{\Omega}) * R(t, \vec{\Omega}) + 2 * \psi_i^{in}(t, \vec{\Omega})}{2 + \Sigma_{ti} * R(t, \vec{\Omega})}, \\ \psi_i^{out}(t, \vec{\Omega}) &= 2\psi_i(t, \vec{\Omega}) - \psi_i^{in}(t, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (4.50)$$

La résolution se fait alors de la même manière que pour le schéma step caractéristique.

4.5 Une technique d'accélération pour la méthode du schéma diamant

Cette partie est issue des travaux de Suslov (6) pour le traitement multidimensionnel du problème. On présente dans un premier temps les équations d'accélération en 1 dimension. On en déduit ensuite une technique d'accélération multidimensionnelle. Le dernier paragraphe traitera des conditions aux limites.

4.5.1 Accélération 1D

Cette technique d'accélération est issue des travaux de Khalil (8). On suppose que l'on a mis en oeuvre la méthode des caractéristiques en 1D avec le schéma diamant.

L'équation de transport s'écrit en 1D :

$$\mu \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \mu) + \Sigma_t \psi(r, \mu) = \Sigma_s \psi(r, \mu) + s(r, \mu). \quad (4.51)$$

Par la suite, on note l et r les indices indiquant un flux à gauche ou à droite d'une maille, et $h_\mu = \frac{h}{\mu}$.

Pour $\mu > 0$, on a l'équation suivante sur la maille i et taille h :

$$\begin{aligned} \psi_{r,i}(\mu) - \psi_{l,i}(\mu) + \Sigma_{t,i} \psi_i(\mu) h_\mu &= S(\mu) h_\mu, \\ \psi_{l,i}(-\mu) - \psi_{r,i}(-\mu) + \Sigma_{t,i} \psi_i(-\mu) h_\mu &= S(-\mu) h_\mu. \end{aligned} \quad (4.52)$$

On note $\Phi_{l,i}(\mu)$, $\Phi_{r,i}(\mu)$ le flux partiel dans la direction μ :

$$\begin{aligned} \Phi_{l,i}(\mu) &= 0.5 * (\psi_{l,i}(\mu) + \psi_{l,i}(-\mu)), \quad \Phi_{r,i}(\mu) = 0.5 * (\psi_{r,i}(\mu) + \psi_{r,i}(-\mu)) \\ \Phi_i(\mu) &= 0.5(\Phi_{l,i}(\mu) + \Phi_{r,i}(\mu)). \end{aligned} \quad (4.53)$$

On note $J_{l,i}(\mu)$ et $J_{r,i}(\mu)$ les "courants partiels" sur les bords gauches et droits :

$$J_{l,i}(\mu) = 0.5 * (\psi_{l,i}(\mu) - \psi_{l,i}(-\mu)), \quad J_{r,i}(\mu) = 0.5 * (\psi_{r,i}(\mu) - \psi_{r,i}(-\mu)). \quad (4.54)$$

Par l'approximation diamant, on obtient :

$$\psi_i(\mu) = 0.5 * (\psi_{li}(\mu) + \psi_{ri}(\mu)), \quad \psi_i(-\mu) = 0.5 * (\psi_{li}(-\mu) + \psi_{ri}(-\mu)). \quad (4.55)$$

Le "courant" net volumique est alors $J_i(\mu) = \psi_i(\mu) + \psi_i(-\mu)$ et on a la relation suivante sur les "courants" :

$$J_{li}(\mu) + J_{ri}(\mu) = \psi_i(\mu) - \psi_i(-\mu). \quad (4.56)$$

Par soustraction des équations (4.52), on aboutit à

$$-\psi_{r,i}(\mu) + \psi_{l,i}(\mu) + \psi_{l,i}(-\mu) - \psi_{r,i}(-\mu) + \Sigma_{t,i}(\psi_i(-\mu) - \psi_i(\mu)) h_\mu = 0, \quad (4.57)$$

soit,

$$2\Phi_{l,i}(\mu) - 2\Phi_{r,i} - \Sigma_{t,i} h_\mu (J_{r,i}(\mu) + J_{l,i}(\mu)) = 0., \quad (4.58)$$

ou encore

$$J_{r,i}(\mu) = -J_{l,i}(\mu) - \frac{4}{\Sigma_{t,i} h_\mu} \Phi_i(\mu) + \frac{4}{\Sigma_{t,i} h_\mu} \Phi_l(\mu). \quad (4.59)$$

L'équation bilan suivante peut être obtenue en sommant les équations (4.52) et en décomposant la source en une partie dépendant du terme de scattering et un reste que l'on continue à noter S :

$$-J_{l,i}(\mu) + J_{r,\mu} + \Sigma_t h_\mu \Phi_i(\mu) = \Sigma_{s,i} \Phi_i(\mu) h_\mu + S_i h_\mu \quad (4.60)$$

En combinant les équations (4.59) et (4.60), on aboutit à l'équation suivante :

$$-2J_{l,i}(\mu) + \frac{4}{\Sigma_{t,i} h_\mu} \Phi_l(\mu) + ((\Sigma_{t,i} - \Sigma_{s,i}) h_\mu - \frac{4}{\Sigma_{t,i} h_\mu}) \Phi_i(\mu) = S_i h_\mu, \quad (4.61)$$

ou bien encore

$$\Phi_{l,i}(\mu) = \frac{1}{d_i(\mu)} J_{l,i}(\mu) + a_i(\mu) \Phi_i(\mu) + b_i(\mu) S_i, \quad (4.62)$$

avec

$$\begin{aligned} d_i(\mu) &= \frac{2}{\Sigma_{t,i} h_\mu}, \\ a_i(\mu) &= 1 - \frac{(\Sigma_{t,i} - \Sigma_{s,i}) h_\mu^2 \Sigma_{t,i}}{4} \\ b_i(\mu) &= \frac{\Sigma_{t,i} h_\mu^2}{4}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

On peut procéder de manière similaire pour obtenir le flux droit partiel en fonction du courant partiel :

$$\Phi_{r,i} = -\frac{1}{d_i(\mu)} J_{r,i}(\mu) + a_i(\mu) \Phi_i(\mu) + b_i(\mu) S_i, \quad (4.64)$$

$$(4.65)$$

Pour deux mailles adjacentes i et $i+1$, on a les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \Phi_{l,i+1}(\mu) &= \frac{1}{d_{i+1}(\mu)} J_{l,i}(\mu) + a_{i+1}(\mu) \Phi_{i+1}(\mu) + b_{i+1}(\mu) S_{i+1}, \\ \Phi_{r,i}(\mu) &= -\frac{1}{d_i(\mu)} J_{r,i}(\mu) + a_i(\mu) \Phi_i(\mu) + b_i(\mu) S_i, \end{aligned} \quad (4.66)$$

On utilise la continuité du courant et la continuité du flux à l'interface des mailles i et $i+1$ pour obtenir :

$$\left(\frac{1}{d_{i+1}(\mu)} + \frac{1}{d_i(\mu)} \right) J_{r,i} = (a_i(\mu) \Phi_i(\mu) - a_{i+1}(\mu) \Phi_{i+1}(\mu)) + b_i(\mu) S_i - b_{i+1}(\mu) S_{i+1}, \quad (4.67)$$

ou encore en posant :

$$\frac{1}{d_k(\mu)} = \frac{1}{d_k(\mu)} + \frac{1}{d_{k+1}(\mu)}, \quad (4.68)$$

$$J_{r,i}(\mu) = d_i(\mu)(a_i(\mu) \Phi_i(\mu) - a_{i+1}(\mu) \Phi_{i+1}(\mu)) + d_i(\mu)(b_i(\mu) S_i - b_{i+1}(\mu) S_{i+1}). \quad (4.69)$$

On a donc la même relation sur la maille précédente $i-1$:

$$J_{r,i-1}(\mu) = d_{i-1}(\mu)(a_{i-1}(\mu) \Phi_{i-1}(\mu) - a_i(\mu) \Phi_i(\mu)) + d_{i-1}(\mu)(b_{i-1}(\mu) S_{i-1} - b_i(\mu) S_i). \quad (4.70)$$

On peut injecter les équations (4.69) et (4.70) dans l'équation bilan (4.60) pour obtenir finalement une relation reliant les flux de trois mailles successives :

$$\begin{aligned} -d_{i-1}(\mu) a_{i-1}(\mu) \Phi_{i-1}(\mu) + a_i(\mu) * (d_i(\mu) + d_{i-1}(\mu)) \Phi_i(\mu) - a_{i+1}(\mu) * d_i(\mu) \Phi_{i+1}(\mu) + \\ (\Sigma_{t,i} - \Sigma_{s,i}) h_{\mu,i} \Phi_i(\mu) = d_{i-1}(\mu) b_{i-1}(\mu) S_{i-1} + \\ (h_{\mu,i} - (d_i(\mu) + d_{i-1}(\mu)) b_i(\mu)) S_i + d_i(\mu) b_{i+1}(\mu) S_{i+1}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Jusqu'ici aucune approximation n'a été faite. On suppose maintenant que le flux est isotrope. On va noter alors $\Phi_{i-1} = \Phi_{i-1}(\mu)$ indépendamment de μ . On multiplie chaque équation (4.71) par le poids W_μ associé à une direction positive μ et on effectue la somme sur toutes les directions positives μ (au nombre de $M/2$) pour obtenir une équation reliant les flux de trois mailles successives :

$$\begin{aligned} -\sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_{i-1}(\mu_j) a_{i-1}(\mu_j)) \Phi_{i-1} + \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} a_i(\mu_j) * (d_i(\mu_j) + d_{i-1}(\mu_j))) \Phi_i \\ - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} a_{i+1}(\mu_j) * d_i(\mu_j)) \Phi_{i+1} + \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} (\Sigma_{t,i} - \Sigma_{s,i}) h_{\mu_j,i}) \Phi_i = \\ \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_{i-1}(\mu_j) b_{i-1}(\mu_j)) S_{i-1} + \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} (h_{\mu_j,i} - (d_i(\mu_j) + d_{i-1}(\mu_j)) b_i(\mu_j))) S_i + \\ \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_i(\mu_j) b_{i+1}(\mu_j)) S_{i+1}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

On remarque alors que $\sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} h_{\mu_j, i}) = \frac{h_i}{2}$ pour obtenir finalement :

$$\begin{aligned}
& - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_{i-1}(\mu_j) a_{i-1}(\mu_j)) \Phi_{i-1} + \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} a_i(\mu_j) * (d_i(\mu_j) + d_{i-1}(\mu_j))) \Phi_i \\
& - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} a_{i+1}(\mu_j) * d_i(\mu_j)) \Phi_{i+1} + (\Sigma_{t,i} - \Sigma_{s,i}) \frac{h_i}{2} \Phi_i = \\
& \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_{i-1}(\mu_j) b_{i-1}(\mu_j)) S_{i-1} + \left(\frac{h_i}{2} - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} (d_i(\mu_j) + d_{i-1}(\mu_j)) b_i(\mu_j)) \right) S_i + \\
& \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_i(\mu_j) b_{i+1}(\mu_j)) S_{i+1}.
\end{aligned} \tag{4.73}$$

4.5.2 Accélération 2D

L'accélération 2D est basée sur l'accélération 1D et elle se fait de manière évidente. Prenons un exemple simple (sur la figure 15) et indiquons comment calculer les éléments de la matrice de diffusion

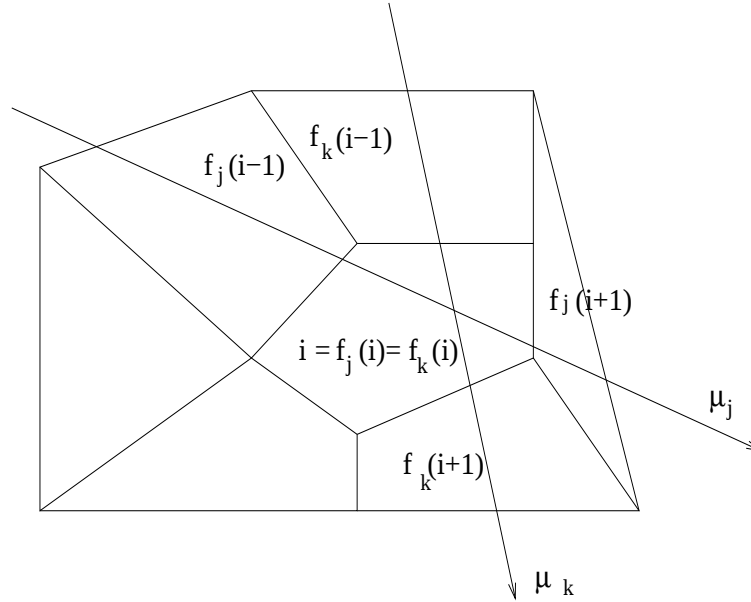


FIGURE 15 – tracé 2D.

$A(i, *)$. On note $f_j(i-1)$ et $f_j(i+1)$ les numéros des éléments traversés par la trajectoire μ_j et voisins de la maille i (voir figure 15).

L'algorithme est le suivant :

- Boucle sur les trajectoires μ_j
 - Calcul de $d_{f_j(i-1)}$, d_i , a_i , $a_{f_j(i-1)}$, $a_{f_j(i+1)}$, $b_{f_j(i-1)}$, b_i et $b_{f_j(i+1)}$ pour les volumes traversés par une trajectoire représentée sur la figure 15.
 - $A(i, i-1) = A(i, i-1) + W_{\mu_j} d_{f_j(i-1)}(\mu_j) a_{f_j(i-1)}(\mu_j) * S_{\perp}$
 - $A(i, i) = A(i, i) + W_{\mu_j} a_i(\mu_j) * (d_i(\mu_j) + d_{f_j(i-1)}(\mu_j)) * S_{\perp}$,

- $A(i, i+1) = A(i, i+1) + W_{\mu_j} a_{f_j(i+1)}(\mu_j) * d_i(\mu_j) * S_{\perp}$,
- Fin de boucle sur les trajectoires
- Ajout du terme d'absorption :
 $A(i, i) = A(i, i) + (\Sigma_{t,i} - \Sigma_{s,i}) * V_i$.

Remarque 4.3 On peut remplacer V_i par le volume numérique, mais la normalisation des trajectoires fait que volume intégré et volume exact sont égaux.

4.5.3 Le traitement des conditions aux limites

Les conditions aux limites ne sont pas faciles à mettre en oeuvre. On indique comment prendre en compte les conditions de type réflexion isotrope.

En cas d'albedo isotrope, il faut accélérer courants entrant et sortant de chaque trajectoire. Les équations que l'on a vues ci-dessus ne peuvent s'appliquer à une maille au bord du domaine.

Supposons donc que l'on soit sur le bord gauche du domaine en 1D.

Après une itération sur le terme de scattering, on a résolu le problème suivant pour chaque μ positif :

$$-J_{l,1}^{k+1/2}(\mu) + J_{r,1}^{k+1/2}(\mu) + \Sigma_{t1} h_{1,\mu} \Phi_1^{k+1/2}(\mu) = \Sigma_{s,1} \Phi_1^k(\mu) h_{1,\mu} + S_1 h_{1,\mu} \quad (4.74)$$

$$J_{r,1}^{k+1/2}(\mu) = d_1(\mu) \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,1}^2) h_{\mu}^2}{4}\right) \Phi_1^{k+1/2}(\mu) - \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,2}^2) h_{\mu}^2}{4}\right) \Phi_2^{k+1/2}(\mu) + d_1(\mu) (b_1(\mu) (\Sigma_{s1} \Phi_1^k + S_1) - b_2(\mu) (\Sigma_{s2} \Phi_2^k + S_2)). \quad (4.75)$$

On injecte l'équation (4.75) dans l'équation (4.74) pour obtenir :

$$\begin{aligned} & -J_{l,1}^{k+1/2}(\mu) + (\Sigma_t h_{1,\mu} + d_1(\mu) \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,1}^2) h_{\mu}^2}{4}\right)) \Phi_1^{k+1/2}(\mu) \\ & - d_1(\mu) \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,2}^2) h_{\mu}^2}{4}\right) \Phi_2^{k+1/2}(\mu) = (h_{1,\mu} - d_1(\mu) b_1(\mu)) \Sigma_{s,1} \Phi_1^k(\mu) + \\ & (h_{1,\mu} - d_1(\mu) b_1(\mu)) S_1 + d_1(\mu) b_2(\mu) (\Sigma_{s2} \Phi_2^k + S_2). \end{aligned} \quad (4.76)$$

A l'itération suivante, on veut avoir convergé : on veut donc avoir une solution Φ^{k+1} qui vérifie :

$$\begin{aligned} & (\Sigma_t h_{1,\mu} + d_1(\mu) \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,1}^2) h_{\mu}^2}{4}\right)) \Phi_1^{k+1}(\mu) - d_1(\mu) \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,2}^2) h_{\mu}^2}{4}\right) \Phi_2^{k+1}(\mu) = \\ & (h_{1,\mu} - d_1(\mu) b_1(\mu)) \Sigma_{s,1} \Phi_1^{k+1}(\mu) + (h_{1,\mu} - d_1(\mu) b_1(\mu)) S_1 + d_1(\mu) b_2(\mu) (\Sigma_{s2} \Phi_2^{k+1} + S_2). \end{aligned} \quad (4.77)$$

En faisant la différence entre les équations (4.77) et (4.76), on aboutit à une équation vérifiée par le terme correcteur $\Phi^{k+1}(\mu) - \Phi^{k+1/2}(\mu)$. En effectuant une sommation sur les μ positifs et en supposant les courants et flux isotropes, on aboutit à une condition aux limites pour l'équation de diffusion :

$$\begin{aligned} & (\Sigma_t \frac{h_1}{2} + \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_1(\mu_j) a_1(\mu_j))) \Phi_1 - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_1(\mu_j) a_2(\mu_j)) \Phi_2 = \\ & \left(\frac{h_1}{2} - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_1(\mu_j) b_1(\mu_j))\right) \Sigma_{s1} (\Phi_1^{k+1/2} - \Phi_1^k) + \\ & \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} d_1(\mu_j) b_2(\mu_j)) (\Phi_2^{k+1/2} - \Phi_2^k) - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} J_{l,1}^{k+1/2}(\mu_j)). \end{aligned} \quad (4.78)$$

On obtient bien sûr une équation similaire pour le bord droit. On peut alors résoudre l'équation de diffusion sur le domaine entier et ajouter le terme de correction au flux volumique.

Il reste alors à indiquer comment on peut accélérer le flux entrant sur le bord du domaine (que l'on continue à supposer 1D). Après une itération sur le terme de scattering on obtient aussi pour le flux sur le bord du domaine une expression semblable à celle donnée par l'équation (4.66) :

$$\Phi_{l,1}^{k+1/2}(\mu) = \frac{1}{d_1(\mu)} J_{l,1}^{k+1/2}(\mu) + \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,1}^2)h_\mu^2}{4}\right) \Phi_1^{k+1/2}(\mu) + b_1(\mu)(\Sigma_{s,1}\Phi_1^k(\mu) + S_1). \quad (4.79)$$

A l'itération suivante on voudrait $\Phi_{l,1}^{k+1}$ solution de

$$\Phi_{l,1}^{k+1} = \left(1 - \frac{(\Sigma_{t,1}^2)h_\mu^2}{4}\right) \Phi_1^{k+1} + b_1(\mu)(\Sigma_{s,1}\Phi_1^{k+1} + S_1). \quad (4.80)$$

On fait alors la différence des équations (4.80) et (4.79) et on effectue une sommation sur les angles μ positifs. Par différence des deux précédentes équations, le flux correcteur toujours appelé $\Phi_{l,1}$ doit vérifier l'équation :

$$\begin{aligned} \Phi_{l,1} &= \sum_{j=1}^{M/2} W_{\mu_j} a_1(\mu_j) \Phi_1 + \\ &\sum_{j=1}^{M/2} W_{\mu_j} b_1(\mu_j) (\Sigma_{s,1}(\Phi_1^{k+1/2} - \Phi_1^k) - \sum_{j=1}^{M/2} (W_{\mu_j} \frac{1}{d_1(\mu_j)}) J_{l,i}^{k+1/2}). \end{aligned} \quad (4.81)$$

Après résolution du problème de diffusion dont les inconnues sont les flux volumiques, l'utilisation de l'équation (4.81) permet d'accélérer le flux au bord du domaine.

5 Traitement du terme de collision dans l'équation de transport

Dans le cas où la collision des chocs n'est pas isotrope, l'équation de transport devient (toujours sous l'hypothèse d'un matériau isotrope) :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t \psi(r, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(r, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(r, \vec{\Omega}') + S(r, E, \vec{\Omega}). \quad (5.1)$$

On fait maintenant abstraction de la dépendance en espace et on développe la section de scattering sur la base des polynômes de Legendre :

$$\Sigma_s(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \sum_{k=0}^M \Sigma_{sk} P_k(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'). \quad (5.2)$$

Remarque 5.1 On choisit de prendre ici la notation Apollo où le terme Σ_{sk} est relié à la section anisotrope de moment k $\tilde{\Sigma}_{sk}$ par la relation :

$$\Sigma_{sk} = (2k+1) \tilde{\Sigma}_{sk}.$$

On introduit la relation de décomposition suivante :

$$P_k(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{l=-k}^k Y_k^l(\vec{\Omega}) Y_k^{l*}(\vec{\Omega}'), \quad (5.3)$$

où l'étoile indique le complexe conjugué et les $Y_k^l(\vec{\Omega})$ sont les harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned} Y_k^l(\vec{\Omega}) &= \sqrt{\frac{2k+1}{4\pi}} \sqrt{(k-l)!(k+l)!} P_k^l(\mu) e^{il\phi}, \\ Y_k^{-l}(\vec{\Omega}) &= (-1)^l Y_k^l(\vec{\Omega}), \end{aligned} \quad (5.4)$$

où on a décrit $\vec{\Omega}$ en coordonnées sphériques :

$$\vec{\Omega} = (\mu, \phi) = \mu \vec{e}_z + \cos(\phi) \sqrt{1-\mu^2} \vec{e}_x + \sin(\phi) \sqrt{1-\mu^2} \vec{e}_y, \quad (5.5)$$

et les P_k^l sont les fonctions de Legendre :

$$P_k^l(\mu) = (1-\mu^2)^{\frac{l}{2}} \frac{d^l P_k(\mu)}{d\mu^l}, \quad (5.6)$$

qui satisfont à la relation d'orthogonalité :

$$\int_{-1}^1 d\mu P_k^l(\mu) P_{k'}^l(\mu) = \delta_{kk'} \frac{2}{2k+1} \frac{(k+l)!}{(k-l)!}. \quad (5.7)$$

Les harmoniques sphériques forment un système complet de fonctions sur la sphère et obéissent aux relations d'orthogonalité suivantes :

$$\int_{S_2} d\vec{\Omega} Y_k^l(\vec{\Omega}) Y_{k'}^{l'*}(\vec{\Omega}) = \delta_{kk'} \delta_{ll'}. \quad (5.8)$$

A l'aide des relations (5.3), (5.4) et (5.6), l'équation (5.7) devient :

$$\Sigma_s(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \sum_{k=0}^M \Sigma_{sk} \sum_{l \geq 0}^k (2 - \delta_{l0}) \frac{(k-l)!}{(k+l)!} P_k^l(\mu) P_k^l(\mu') \cos(l(\phi - \phi')). \quad (5.9)$$

L'équation (5.1) s'écrit alors :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_t \psi(r, \vec{\Omega}) = \sum_{k=0}^M \Sigma_{sk}(r) \sum_{l=0}^k (A_k^l(\vec{\Omega}) \psi_k^l(r) + A_k^{-l}(\vec{\Omega}) \psi_k^{-l}(r)). \quad (5.10)$$

On remarque que dans la somme en l , on ne prend que le premier terme pour $l = 0$. Dans cette expression, le $A_k^l(\vec{\Omega})$ sont les coefficients géométriques :

$$A_k^l(\vec{\Omega}) = \begin{cases} \sqrt{2 - \delta_{l0}} \sqrt{\frac{(k+l)!}{(k-l)!}} P_k^l(\mu) \cos(l\phi), l \geq 0, \\ \sqrt{2} \sqrt{\frac{(k-l)!}{(k+l)!}} P_k^{|l|}(\mu) \sin(|l|\phi), l < 0, \end{cases} \quad (5.11)$$

qui obéissent aux relations d'orthogonalité suivantes :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} A_k^l(\vec{\Omega}) A_{k'}^{l'}(\vec{\Omega}) = \frac{1}{2k+1} \delta_{kk'} \delta_{ll'}, \quad (5.12)$$

et où les $\psi_k^l(r)$ sont les moments angulaires du flux :

$$\psi_k^l(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} A_k^l(\vec{\Omega}) \psi(r, \vec{\Omega}). \quad (5.13)$$

Dans le cas des méthodes S_n vues dans le chapitre précédent, on utilise la formule de quadrature suivante pour calculer les intégrales :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} f(\vec{\Omega}) = \sum_{n=1}^N w_n f(\vec{\Omega}_n), \quad (5.14)$$

où les $\vec{\Omega}_n$ sont les directions angulaires des trajectoires et les w_n les poids associés à ces trajectoires et normalisés à 1 :

$$\sum_{n=1}^N w_n = 1. \quad (5.15)$$

Avec ces notations, l'équation (5.10) devient dans le cas de l'approximation S_n et pour une maille numérotée i :

$$\vec{\Omega}_n \cdot \nabla \psi_i(\vec{\Omega}_n) + \Sigma_{ti} \psi_i(\vec{\Omega}_n) = \sum_{k=0}^M \Sigma_{sk,i} \sum_{l=0}^k (A_k^l(\vec{\Omega}_n) \psi_{k,i}^l + A_k^{-l}(\vec{\Omega}_n) \psi_{k,i}^{-l}), \quad (5.16)$$

avec :

$$\psi_{k,i}^l = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} A_k^l(\vec{\Omega}) \psi_i(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{m=1}^N w_m A_k^l(\vec{\Omega}_m) \psi_i(\vec{\Omega}_m). \quad (5.17)$$

Le noyau de collision peut aussi être approché par :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} \Sigma_{s,i}(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{m=1}^N A_{nm,i} \psi_i(\vec{\Omega}_n), \quad (5.18)$$

avec

$$A_{nm,i} = w_m \Sigma_{si}(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\Omega}_m) = w_m \sum_{k=0}^M \Sigma_{sk,i} P_k(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\Omega}_m). \quad (5.19)$$

$\psi_{k,i}^l$ est approché par la formule de quadrature :

$$\psi_{k,i}^l = \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} A_k^l(\vec{\Omega}) \psi_i(\vec{\Omega}) \simeq \sum_{p=0}^M w_p A_k^l(\vec{\Omega}_p) \psi_i(\vec{\Omega}_p). \quad (5.20)$$

Les quantités $A_{nm,i}$ sont presque symétriques dans les indices n et m :

$$w_n A_{nm,i} = w_m A_{mn,i}. \quad (5.21)$$

De plus, si on connaît les moments du noyau de diffusion, il est bon de renormaliser les $A_{nmn,i}$ de façon à conserver ces moments :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} d\vec{\Omega} P_k(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\Omega}) \Sigma_{si}(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\Omega}) \simeq \sum_{m=1}^N P_k(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\Omega}) A_{nm,i} = \frac{\Sigma_{sk,i}}{2k+1} \quad (5.22)$$

6 Les techniques de tracé de trajectoires

Ce chapitre est dédié aux techniques de tracé de trajectoires dans le code TDT. Dans une première partie on s'attachera à décrire les techniques générales de tracé. Dans une seconde partie, on s'attachera à décrire les techniques de tracé pour les rotations et symétries dans un domaine ouvert (reflexion isotrope ou void sur un bord). La troisième partie traite des techniques de tracé pour un domaine fermé (pour des réflexions spéculaires sur tous les bords par exemple) Ce chapitre reprend les techniques de tracés décrites et implantées dans TDT.

6.1 Techniques générales de tracé de trajectoires

Le tracé dans les géométries à deux dimensions est le résultat d'une intégration sur deux variables, l'angle φ et la position ρ de la projection de la trajectoire sur le plan horizontal. Les angles sont en général déterminés par une formule de quadrature S_n .

Le tracé dans une direction $\vec{\Omega}$ s'effectue alors par projection du domaine sur la direction orthogonale à $\vec{\Omega}$ (voir figure 10). Cette projection fournit un intervalle $[\rho_-, \rho_+]$ de taille Δ .

L'intégration en ρ s'effectue par la formule des rectangles ou avec une formule de Gauss-Legendre par morceaux :

- Dans le premier cas, le résultat est que pour chaque angle, on a une série de trajectoires parallèles à une distance constante $\Delta\rho$ sensiblement égale ou plus grande qu'une distance de tracé Δ_{min} entrée par l'utilisateur. Le poids associé à chaque direction est constant et égal à $\Delta\rho$.
- Dans le second cas, on commence par projeter toutes les discontinuité du domaine (noeuds et tangentes à des courbes (voir figure 16)). On traite alors chaque morceau de longueur $\Delta\rho_i$ ainsi défini. Pour les petites longueurs on emploie une formule de quadrature à un ou deux points. Pour les très petites longueurs, on renonce à tracer les trajectoires. Pour les grandes longueurs, on découpe chaque intervalle $\Delta\rho_i$ en $M_{gauss} = 1 + \frac{\Delta\rho_i}{N_{gauss}\Delta_{min}}$ segments de longueur $\Delta\rho_{i,m}$ ($m = 1 \dots M_{gauss}$), où N_{gauss} est le nombre de points de Gauss d'intégration choisis par l'utilisateur. Les points d'intégration sont alors définis par leur abscisse sur la direction de projection :

$$\rho_{i,m,n} = \rho_- + \sum_{k=1, i-1} \Delta\rho_k + \Delta\rho_{i,m} \left(m + \frac{x_n - 1}{2}\right), \quad (6.1)$$

et leur poids $w_{imn} = w_n \frac{\Delta\rho_{i,m}}{2}$, où (x_n, w_n) est le n-ième point de Gauss dans $[-1, 1]$, m le m-ième segment d'intégration du i-ième intervalle.

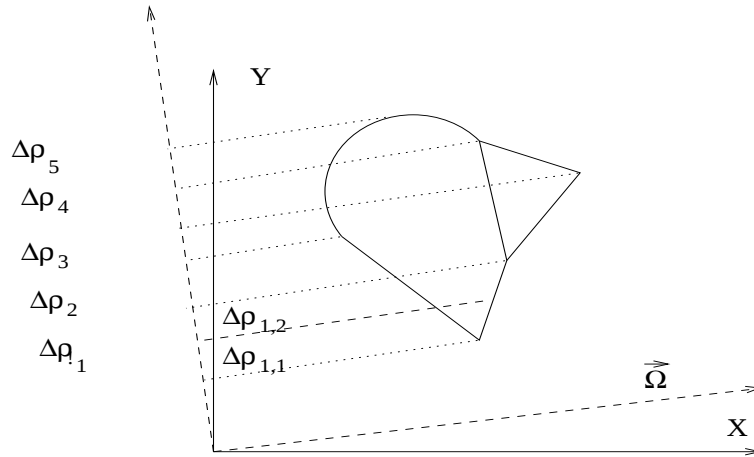


FIGURE 16 – Détermination des intervalles $\Delta\rho_i$ et $\Delta\rho_{i,j}$ pour l'intégration de Gauss des trajectoires

L'intégration de Gauss peut poser problème quand la dérivée de la fonction que l'on intègre devient infini au bord des intervalles : il y a alors perte de précision à cause du manque de régularité de la fonction. Ceci arrive avec les cercles et arcs de cercles. Considérons la valeur du parcours optique intersecté par

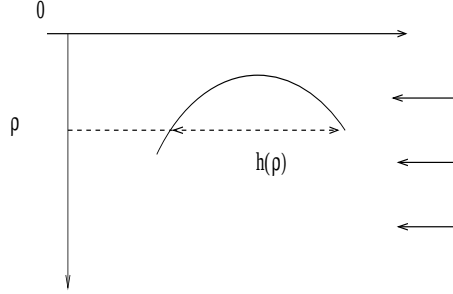


FIGURE 17 – Cas de problème d'intégration des trajectoires par formule de Gauss

la trajectoire dans la région i (voir figure 17) : $\tau_i(\rho) = \Sigma_{ti}h(\rho)$ de dérivée $\partial_\rho \tau_i(\rho) = \Sigma_{ti}\partial_\rho h(\rho)$. Comme $\lim_{\rho \rightarrow 0} h(\rho) = 0$ on doit avoir un comportement de la forme $h(\rho) \simeq C\rho^\alpha$ avec $\alpha > 0$. En conséquence la dérivée $\partial_\rho h(\rho)$ deviendra infinie au point $\rho = 0$ pour $0 < \alpha < 1$. Pour éviter la perte de précision, on fera le changement de variable $\rho = x^\beta$ avec $\beta > \frac{1}{\alpha}$ de façon à ce que la dérivée soit bornée. Pour un cercle ou arc de cercle, on a $h^2 = \rho^2 + 2\rho R$ ce qui implique $\alpha = 1/2$: on emploiera donc $\beta = 2$.

6.2 Techniques de tracé de trajectoires pour un domaine ouvert

Un domaine ouvert est un domaine pour lequel les conditions aux limites engendrent des trajectoires de longueur finie.

On rappelle que l'on souhaite effectuer un tracé de trajectoires pour des angles $\varphi \in [0, \pi]$ et sur un domaine de tracé V_0 . Le tracé se faisant dans une direction puis l'autre sur chaque trajectoire, on décrit le domaine angulaire $[0, 2\pi]$.

6.2.1 Géométries avec rotation d'angle $\theta = \frac{2\pi}{N}$

On suppose que la géométrie a deux axes de rotation formant un angle $\theta = \frac{2\pi}{N}$ (voir figure 18). On suppose que la géométrie a pour centre $O(0, 0)$, que l'axe X est l'un des axes de rotation et que le second se situe au dessus de l'axe des X .

Dans toute la suite, on utilisera la terminologie suivante :

- on appellera axe R l'axe de symétrie ou rotation autre que l'axe des X ,
- le tracé dans un domaine pour $x \in [a, b]$ indiquera le tracé d'une direction telle que son intersection avec l'axe des X soit un point dont l'abscisse appartient à l'intervalle $[a, b]$,
- le tracé d'un domaine pour $r \in [a, b]$ indiquera le tracé d'une direction telle que son intersection avec l'axe R soit un point dont l'abscisse sur cet axe appartient à l'intervalle $[a, b]$,
- La géométrie de calcul est la géométrie restreinte tenant compte des symétries et rotations sur laquelle le calcul est effectué.
- La donnée d'un angle le sera modulo π , pour tenir compte du fait que deux sens opposés définissent la même trajectoire.

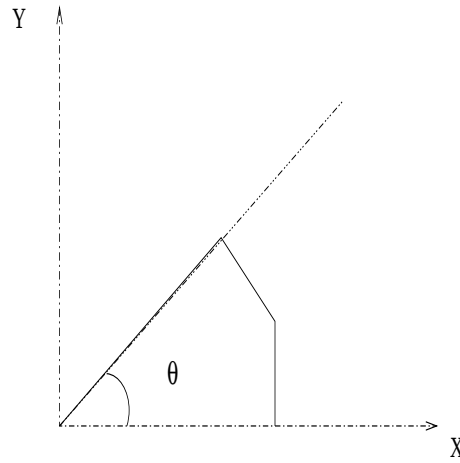
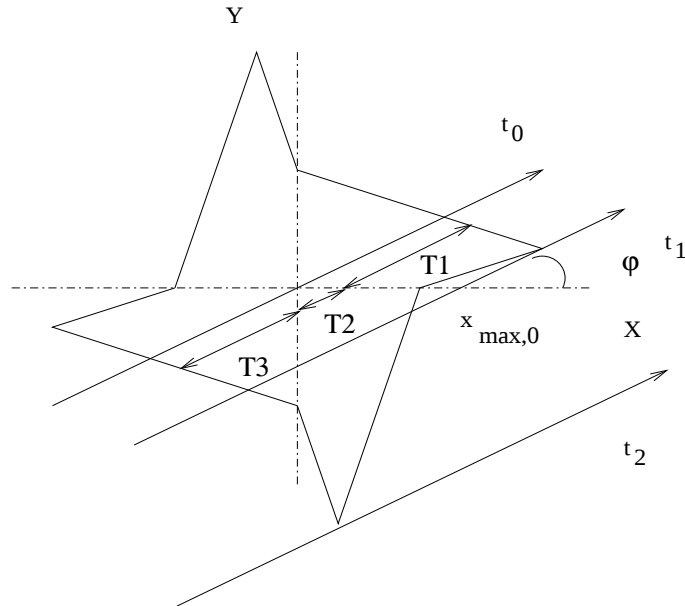


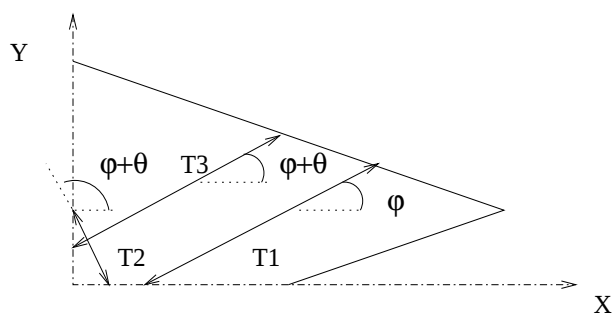
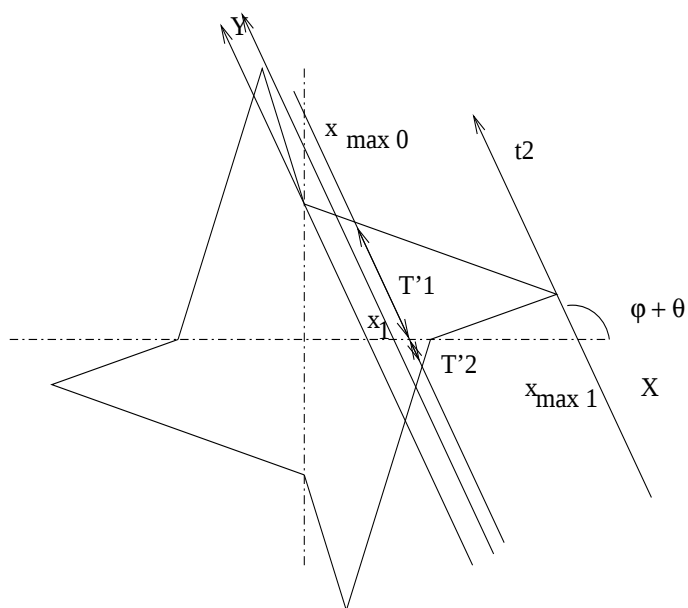
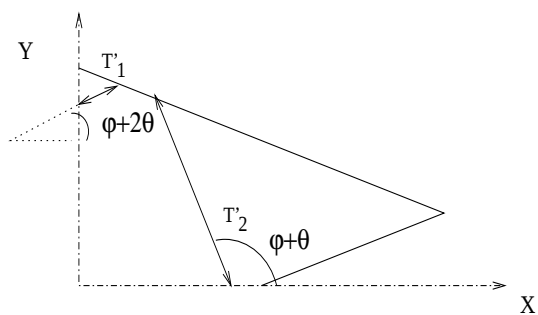
FIGURE 18 – Domaine de tracé de trajectoire

6.2.2 Rotation d'angle $\frac{2\pi}{N}$ avec n pair

Dans ce cas-ci la géométrie possède une symétrie centrale par rapport au centre des coordonnées $(0,0)$. Pour cette raison de symétrie, on ne trace que la moitié du domaine pour un angle $\varphi \in [0; \frac{2\pi}{n}]$. Sur la figure 19 (pour un exemple avec $n = 4$), on ne trace que le domaine en dessous de la trajectoire t_0 définissant une droite $y = \tan(\phi)x$, où $\phi \in [0; \frac{2\pi}{n}]$.

FIGURE 19 – Domaine de tracé d'une trajectoire d'angle φ pour $n = 4$.

La procédure de tracé pour un angle $\varphi \in [0; \frac{2\pi}{n}]$ est la suivante :

FIGURE 20 – Tracé de la trajectoire T de la figure 19 sur le domaine initial.FIGURE 21 – Définition du domaine de tracé d'angle $\varphi + \frac{\pi}{2}$.FIGURE 22 – Tracé de la trajectoire T' de la figure 21 sur le domaine initial.

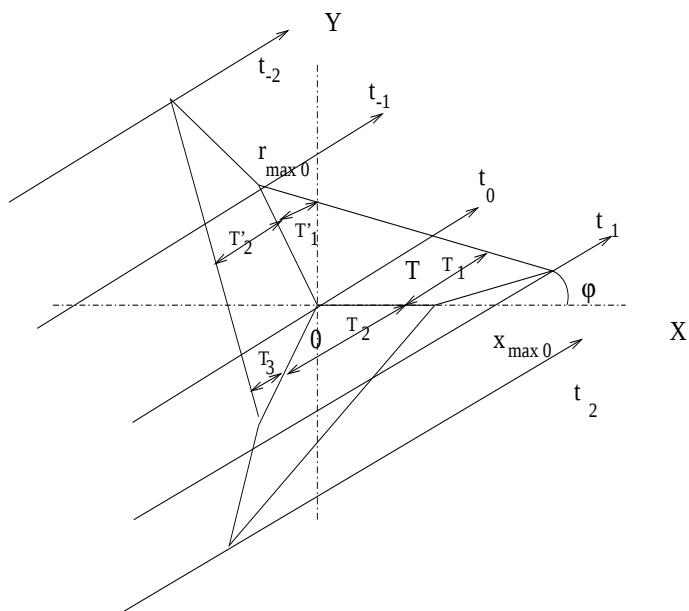
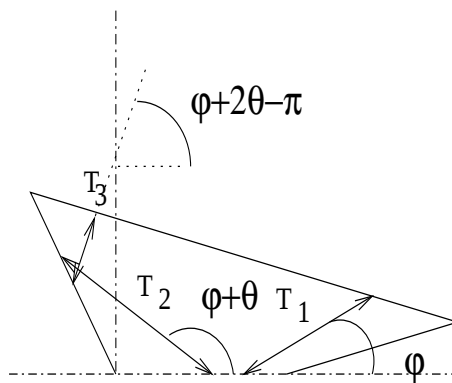
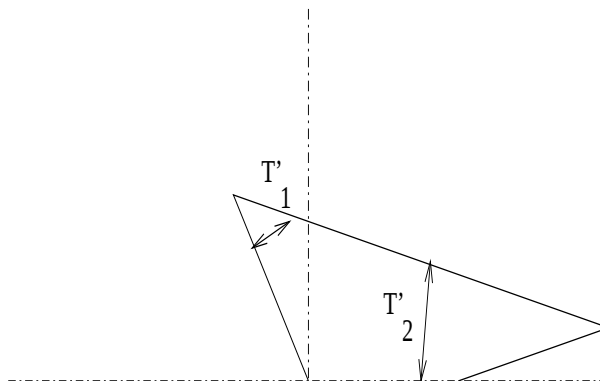
1. On trace le domaine $x \in [0, x_{max,0}]$ avec l'angle φ , où $x_{max,0}$ est la plus grande projection du domaine géométrique avec l'angle φ sur l'axe X .
 Sur la figure 19, ceci correspond pour $n = 4$, au tracé des directions telles que la direction T composée des sous-trajectoires $T1$, $T2$ et $T3$. Cette trajectoire T est effectuée sur le domaine de tracé initial (voir figure 20), la sous-trajectoire $T2$ ayant subi une rotation d'angle $\varphi + \frac{2\pi}{n}$, la sous-trajectoire $T3$ ayant subi une rotation d'angle $\varphi + \frac{4\pi}{n}$.
2. On trace le domaine $x \in (x_1, x_{max1})$ avec l'angle $\varphi_1 = \varphi + \theta$, où $x_1 = x_{max,0} \frac{\sin(\varphi_1 - \theta)}{\sin(\pi - \varphi_1)}$ et x_{max1} est la plus grande projection du domaine géométrique de calcul avec l'angle $\varphi + \theta$.
 La figure 21 montre comment effectuer le tracé d'une trajectoire comprise entre les trajectoires t_1 et t_2 de la figure 19 : par rotation d'angle $\varphi + \theta$, on retrouve les directions t_1 et t_2 de la figure 19 sur la figure 21. Le tracé d'une trajectoire T' sur la figure 21 se décompose en deux sous-trajectoires T'_1 et T'_2 de la figure 22. Si $\varphi_i \geq \pi$ ou $x_1 \geq x_{max1}$, on arrête.
 Dans le cas contraire ...
3. On trace le domaine $x \in (x_2, x_{max2})$ avec l'angle $\varphi_2 = \varphi + 2\theta$, où $x_2 = x_{max1} \frac{\sin(\varphi_2 - \theta)}{\sin(\pi - \varphi_2)}$ et x_{max2} est la plus grande projection du domaine géométrique avec l'angle $\varphi + 2\theta$.
 Si $\varphi_2 \geq \pi$ ou $x_2 \geq x_{max2}$, on arrête.
 Sinon on poursuit la procédure ...

6.2.3 Rotation d'angle $\theta = \frac{2\pi}{N}$ avec n impair

Dans ce cas-ci la géométrie ne possède plus de symétrie centrale par rapport au centre des coordonnées $(0,0)$. En conséquence, le domaine spatial doit couvrir toute la géométrie. Cependant, si l'angle de tracé balaye les directions de l'intervalle $[0, \frac{2\pi}{n}]$, les rotations font que l'on balaye en fait $[0; 2\pi]$. On peut montrer facilement qu'en fait il suffit que l'angle de départ balaye l'angle $[0, \frac{\pi}{n}]$ pour que les rotations engendrent en fait un balayage de la géométrie sur $[0, \pi]$. Comme classiquement, le fait que l'on parcourt en fait les trajectoires dans un sens et dans l'autre engendre alors un balayage de $[0, 2\pi]$.

La procédure de tracé est la suivante pour un angle $\varphi \in [0, \frac{\pi}{n}]$:

- Tracé dans le domaine de la partie en dessous de la droite $y = \tan(\varphi)x$:
 1. Tracé du domaine $x \in [0, x_{max0}]$ avec un angle φ , x_0 est la plus grande projection de la géométrie avec un angle φ sur l'axe X .
 Un exemple est donné pour $n = 3$ sur la figure 23. Le tracé effectif sur le domaine initial réduit est décrit sur la figure 24 pour une trajectoire T décrite initialement sur la figure 23 (à chaque traversée d'un axe de rotation l'angle de tracé change $\varphi \rightarrow \varphi + \theta$).
 2. Tracé (pour $i \geq 1$) du domaine $x \in (x_i, x_{max,i})$ avec un angle $\varphi_i = (\varphi + i * \theta)$, et $x_i = x_{max,i-1} \frac{\sin(\varphi_i - \theta)}{\sin(\pi - \varphi_i)}$, $x_{max,i}$ est la plus grande projection de la géométrie de calcul sous un angle φ_i sur l'axe X . Un exemple est donné sur la figure 26 pour le tracé d'une direction comprise initialement entre les directions t_1 et t_2 sur la figure 23 pour $i = 1$.
 3. Quand $\varphi_i \geq \pi$, ou $x_i \geq x_{max,i}$, le tracé s'arrête,
- Tracé du domaine de la partie au dessus de la droite $y = \tan(\varphi)x$:
 1. Tracé du domaine $r \in [0, r_{max,0}]$ avec l'angle φ , $r_{max,0}$ est la plus grande projection de la géométrie avec un angle φ sur l'axe R .
 Sur l'exemple de la figure 23, la trajectoire T' est encadrée par les trajectoires t_0 et t_{-1} . Son tracé effectif dans le domaine de calcul est décrit sur la figure 25.

FIGURE 23 – Découpage du domaine global pour un angle φ pour $n = 3$.FIGURE 24 – Tracé de la trajectoire T de la figure 23 sur le domaine initial.FIGURE 25 – Tracé de la trajectoire T' de la figure 23 sur le domaine initial.

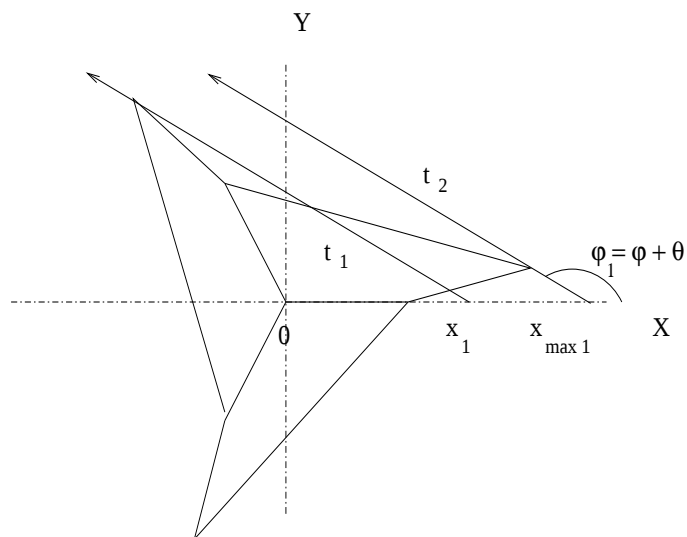


FIGURE 26 – tracé d'angle $\varphi + \frac{2\pi}{3}$ pour les trajectoires comprises entre t_1 et t_2 sur la figure 23.

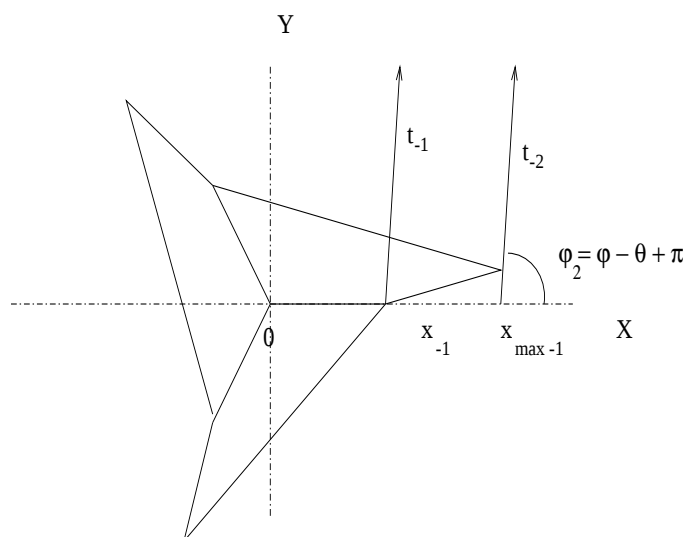


FIGURE 27 – tracé d'angle $\varphi + \frac{\pi}{3}$ pour les trajectoires comprises entre t_{-1} et t_{-2} sur la figure 23.

2. On trace dans le domaine $x \in [x_{-i}, x_{max,-i}]$ avec l'angle $\varphi_{-i} = \varphi - i\theta$, avec $x_{-1} = r_{max,0}$,
 $x_{-i} = x_{max,-(i-1)} * \frac{\sin(\pi - \varphi_{-i})}{\sin(\varphi_{-i} - \theta)}$ (pour $i \geq 2$), $x_{max,-i}$ est la plus grande projection de la géométrie avec l'angle φ_{-i} sur l'axe X.
 Un exemple toujours pour $n = 3$ et pour le tracé d'une direction comprise entre t_{-1} et t_{-2} sur la figure 23 est donné sur la figure 27. Après rotation, on revient sur le domaine de calcul et la direction devient une direction comprise entre les directions t_{-1} et t_{-2} de la figure 27.
3. Quand $\varphi_{-i} \leq -\pi$, ou $x_{-i} \geq x_{max,-i}$, le tracé s'arrête.

6.2.4 Géométries avec deux axes de symétrie d'angle $\theta = \frac{\pi}{N}$

On suppose que la géométrie a deux axes de symétrie formant un angle $\theta = \frac{\pi}{N}$ (voir figure 18). On

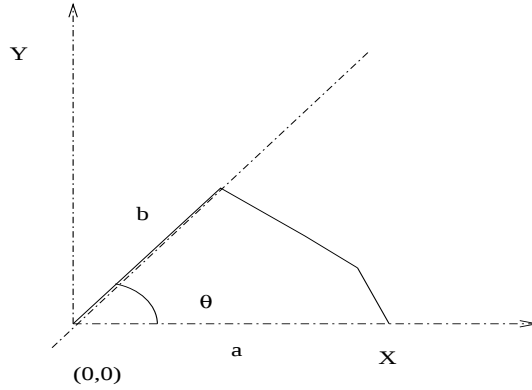


FIGURE 28 – Domaine de tracé de trajectoire pour le cas des symétries

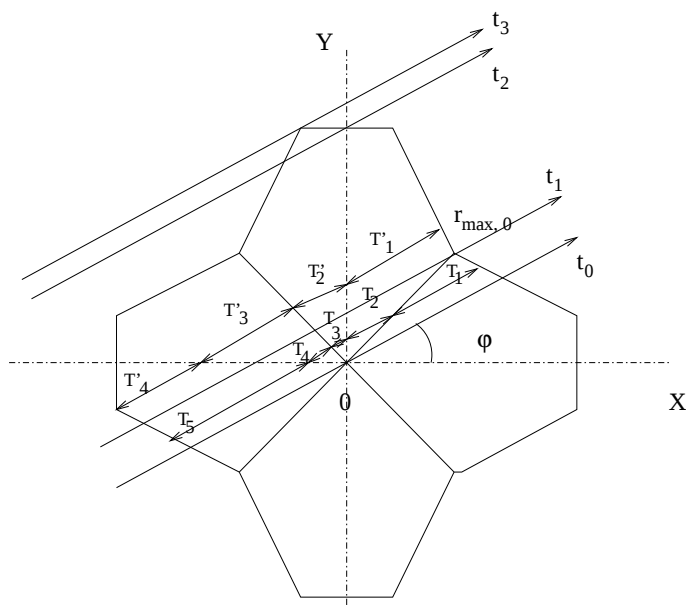
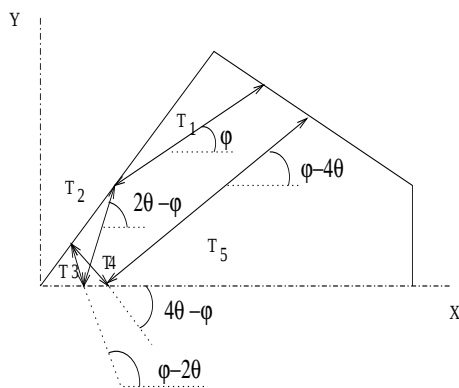
suppose que la géométrie a pour centre $O(0, 0)$, que l'axe X est l'un des axes de symétrie et que le second (l'axe R) se situe au dessus de l'axe des X .

6.2.5 Symétrie d'angle $\theta = \frac{\pi}{N}$ avec n pair

Dans ce cas-ci la géométrie possède une symétrie centrale par rapport au centre des coordonnées $(0, 0)$. Pour cette raison de symétrie, on ne trace que la moitié du domaine pour un angle $\varphi \in [0, \frac{\pi}{n}]$. Sur la figure 29 (pour un exemple avec $n = 4$), on ne trace que le domaine au dessus de la trajectoire t_0 (équation $y = \tan(\varphi)x$).

Pour chaque angle $\varphi \in [0, \frac{\pi}{n}]$, la procédure de tracé est la suivante :

1. On trace le domaine $r \in [0, r_{max,0}]$ avec l'angle φ , $r_{max,0}$ est la projection maximale du domaine sur l'axe R .
 Un exemple est donné sur la figure 29 où le tracé de la trajectoire T est effectué dans le domaine initial ainsi que c'est décrit sur la figure 30 : à chaque fois que l'on aboutit à un axe de symétrie, la trajectoire change d'angle.
2. – Quand i est impair (i varie de 1 à ..), on trace le domaine $x \in [x_i, x_{max,i}]$ avec un angle $\varphi_i = (i + 1)\theta - \varphi$, où $x_i = r_{max,i-1} * \frac{\sin(\varphi_i - \theta)}{\sin(\pi - \varphi_i)}$, $x_{max,i}$ est la projection maximale du domaine de calcul sur l'axe X .

FIGURE 29 – Domaine de tracé des trajectoires d'angle φ pour $n = 4$.FIGURE 30 – Tracé de la trajectoire T de la figure 29 sur le domaine initial.

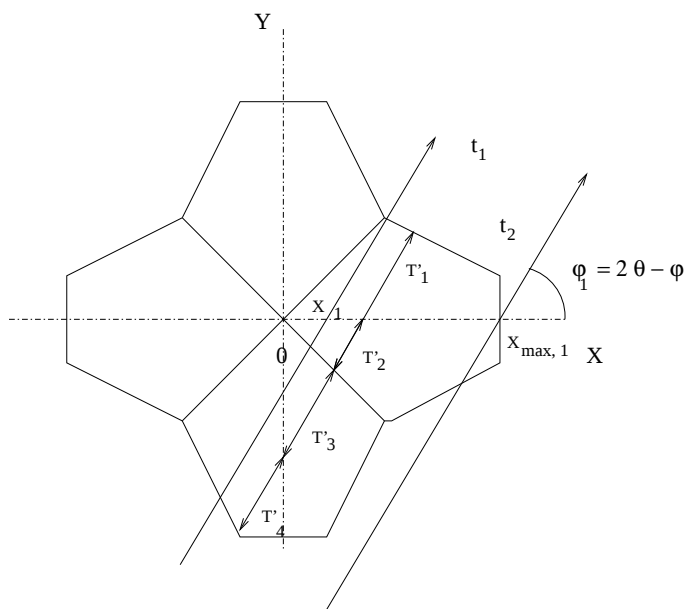


FIGURE 31 – Définition du domaine de tracé d'angle $\varphi_1 = \frac{\pi}{2} - \varphi$ pour une trajectoire entre les trajectoires t_1 et t_2 .

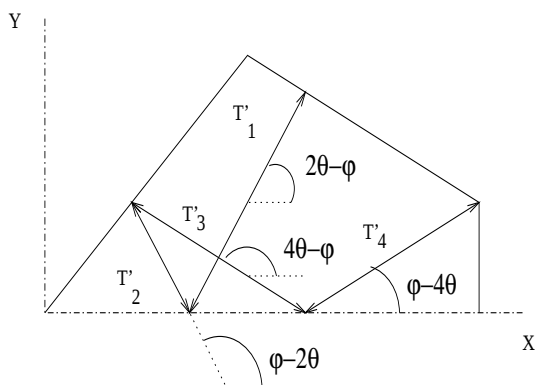


FIGURE 32 – Tracé de la trajectoire T' de la figure 31 sur le domaine initial.

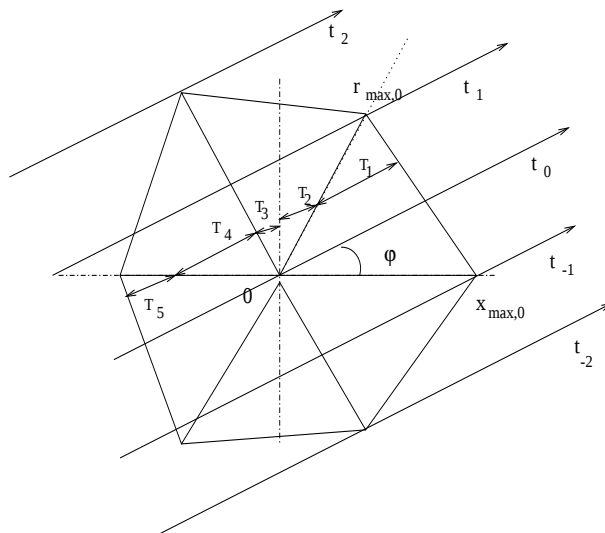


FIGURE 34 – Domaine de tracé des trajectoires d'angle φ pour $n = 3$ pour des trajectoires comprises entre les trajectoires t_0, t_1 ou t_0, t_{-1} .

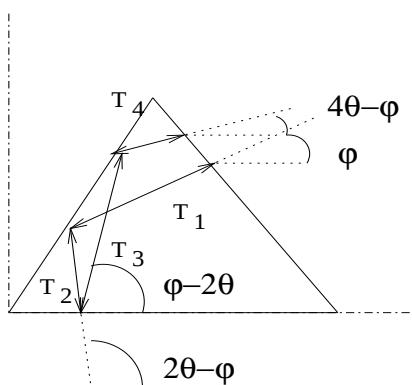


FIGURE 35 – Tracé de la trajectoire T de la figure 34 sur le domaine initial.

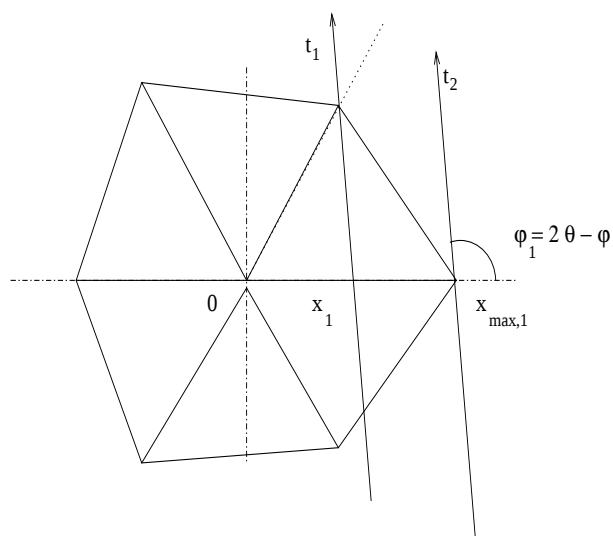


FIGURE 36 – Tracé de trajectoires d'angle $\varphi_1 = 2\theta - \phi$ entre les trajectoires t_1 et t_2 .

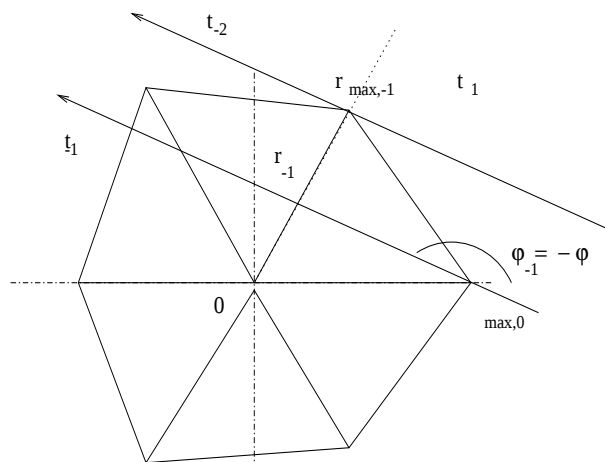


FIGURE 37 – Tracé de trajectoires d'angle $\varphi_2 = -\phi$ entre les trajectoires t_{-1} et t_{-2} .

2. $i = i + 1$, quand i est impair, on trace le domaine $x \in [x_i, x_{max,i}]$ avec un angle $\varphi_i = (i+1)\theta - \varphi$, où $x_i = r_{max,i-1} \frac{\sin(\varphi_i - \theta)}{\sin(\pi - \varphi_i)}$, $x_{max,i}$ est la projection maximale du domaine de calcul sur l'axe X suivant φ_i . Quand i est pair, on trace le domaine $r \in (r_i, r_{max,i})$ avec un angle $\varphi_i = -\varphi_{i-1}$, $r_i = x_{max,i-1} \frac{\sin(\pi - \varphi_i)}{\sin(\varphi_i - \theta)}$, $r_{max,i}$ est la projection maximale du domaine de calcul sur l'axe R suivant φ_i . Un exemple de tracé est effectué sur la figure 36 pour la direction $\varphi_1 = 2\theta - \varphi$.
 3. Lorsque $|\varphi_i| > \pi$, ou $r_i \geq r_{max,i}$ ou $x_i \geq x_{max,i}$, le tracé s'arrête.
- Partie basse de la géométrie (au dessous de la droite $y = \tan(\varphi)x$) :
1. $i = 0$, on trace le domaine $x \in [0, x_{max,0}]$ avec un angle φ , $x_{max,0}$ est la projection maximale du domaine de calcul sur l'axe X (voir figure 34),
 2. $i = i + 1$, quand i est impair, on trace le domaine $r \in [r_{-i}, r_{max,-i}]$ avec un angle $\varphi_{-i} = -\varphi_{-(i-1)}$, où $r_{-i} = x_{max,-(i-1)} \frac{\sin(\pi - \varphi_{-i})}{\sin(\varphi_{-i} - \theta)}$, $r_{max,-i}$ est la projection maximale du domaine de calcul sur l'axe R suivant φ_{-i} . Quand i est pair, on trace le domaine $x \in (x_{-i}, x_{max,-i})$ avec un angle $\varphi_{-i} = -i\theta + \varphi$, $x_{-i} = r_{max,-(i-1)} \frac{\sin(\varphi_{-i} - \theta)}{\sin(\pi - \varphi_{-i})}$, $x_{max,-i}$ est la projection maximale du domaine de calcul sur l'axe X suivant φ_{-i} .

Un exemple de tracé est effectué sur la figure 37 pour la direction $\varphi_{-1} = -\varphi$.

3. Lorsque $|\varphi_{-i}| > \pi$, ou $r_{-i} \geq r_{max,-i}$ ou $x_{-i} \geq x_{max,-i}$, le tracé s'arrête.

En annexe, on donne la composition d'un fichier de tracking.

6.3 Techniques de tracé de trajectoires pour un domaine fermé

Un domaine fermé est un domaine pour lequel les conditions aux limites engendrent des trajectoires de tracé infinies. Dans ce cas les méthodes numériques imposent l'utilisation de trajectoires cycliques qui ont une période finie.

6.3.1 Le domaine rectangulaire

6.3.2 Les translations sur un domaine rectangulaire

Comme on l'a vu précédemment, la trajectoire est cyclique et donnée par l'équation 3.30. La période de cette trajectoire est :

$$L = \sqrt{(na)^2 + (mb)^2} = \frac{|m|b}{\sin\varphi}, \quad (6.2)$$

où a et b sont les dimensions du rectangle dans les deux directions axiales, m et n sont des entiers premiers entre eux et φ l'angle de tracé tel que $\tan\varphi = \frac{m}{n}$.

Il faut éviter de tracer deux fois la même région. Un simple argument géométrique nous donne la longueur Δ_t à tracer (voir figure 38). Il faut que l'aire de la région tracée sur la période soit égale à l'aire du rectangle. Sur la figure, on voit que le tracé sur $[0, \Delta_t]$ entraîne le tracé sur tout le domaine. Une zone de tracé A_i se retrouve translatée sur le domaine initial en zone B_i . Le tracé du rectangle entier est donc assuré par une distance Δ_t telle que :

$$\Delta_t = \frac{ab}{L} = \frac{a}{|m|} \sin\varphi. \quad (6.3)$$

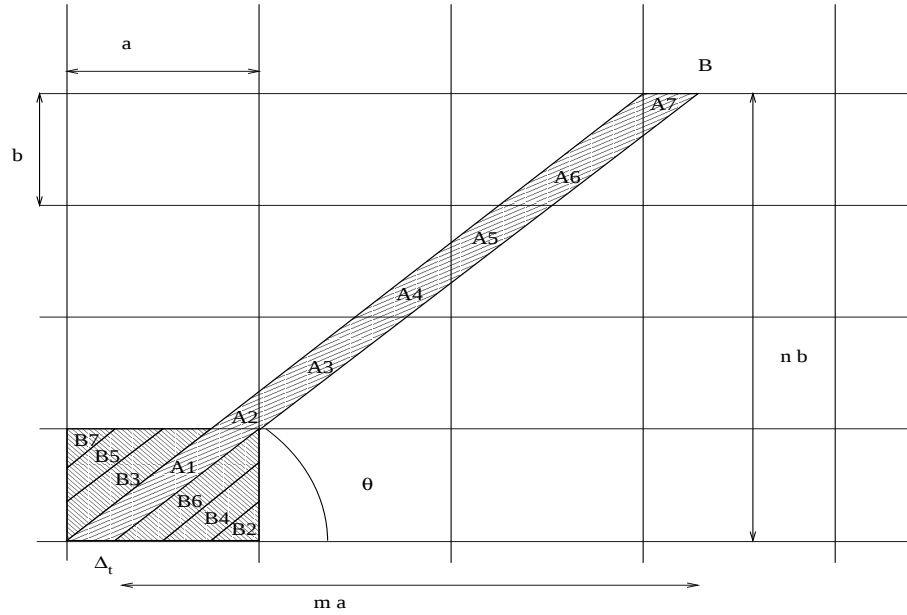


FIGURE 38 – Domaine de tracé d’une trajectoire cyclique sur une domaine rectangulaire

Le domaine de balayage pour l’angle φ est bien sur $[0, \pi]$.

6.3.3 Un rectangle avec des conditions de symétries spéculaires

Le cas où le rectangle a des conditions de symétrie spéculaires sur chaque axe se déduit de ce qui précède. Il suffit de savoir que la composée de deux symétries axiales d’axes parallèles distants de a (respectivement b) donne une translation de longueur $2a$ (respectivement $2b$). On en déduit que la longueur d’une trajectoire sur une période est :

$$L = 2\sqrt{(na)^2 + (mb)^2} = \frac{|m|b}{\sin \varphi}, \quad (6.4)$$

et aussi que la distance de tracé Δ_t est :

$$\Delta_t = \frac{2ab}{L} = \frac{a}{|m|} \sin \varphi. \quad (6.5)$$

A cause des réflexions qui transforment un angle φ en un angle $\pi - \varphi$, on ne trace que le domaine angulaire $[0, \frac{\pi}{2}]$.

6.3.4 Le cas d’un carré

Dans le premier cas, on s’intéresse au triangle au dessous de la première diagonale d’un carré de côté a . On considère le cas d’une symétrie le long de cette première diagonale ainsi que le long de l’axe vertical droit et l’axe vertical gauche. Les réflexions font de la même manière qu’au dessus. Les trajectoires sont

périodiques de période L . On a donc :

$$\begin{aligned} L &= \frac{2|m|a}{\sin \varphi}, \\ \Delta_t &= \frac{a}{|m|} \sin \varphi, \\ \tan \varphi &= \frac{m}{n}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

A cause des symétries, le long de la première diagonale et des axes, une trajectoire parcourt les angles φ , $\pi - \varphi$ et $\frac{\pi}{2} - \varphi$. On ne parcourt donc le domaine angulaire que sur $[0, \frac{\pi}{4}]$.

Dans le cas d'un carré de côté a avec des conditions de translation sur les cotés droit et haut et des conditions de rotation sur les cotés bas et gauche, les rotations génèrent un coté plus grand de taille $2a$ et une trajectoire décrit les angles φ , $\varphi + \frac{\pi}{2}$. On en déduit :

$$\begin{aligned} \Delta_t &= \frac{a}{|m|} \sin \varphi, \varphi \in [0, \frac{\pi}{2}] \\ \tan \varphi &= \frac{m}{n}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Enfin dans le cas où le précédent carré a des conditions de rotations en bas et à gauche, ainsi que des relations de réflexion en haut et à droite, par application des rotations et symétries, on obtient un carré de taille $4a$ avec des conditions de translation au bord. On peut alors en déduire :

$$\begin{aligned} \tan \varphi &= \frac{m}{n}, \\ L &= \frac{4|m|a}{\sin \varphi}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

A cause des symétries et rotation, une trajectoire parcourt les angles φ , $\pi - \varphi$ et $\frac{\pi}{2} - \varphi$. On ne tracera que les trajectoires pour des angles $\varphi \in [0, \frac{\pi}{4}]$.

On peut cependant remarquer que l'application successive de deux symétries (suivant les deux axes de symétrie) et d'une double rotation donne l'identité. On peut donc voir la figure 39 que l'application de ces quatre opérations donne une translation de longueur $4\sqrt{2}a$ le long de la première diagonale. La combinaison de cette translation avec des translations de type $2a\vec{e}_x$ et $2a\vec{e}_y$ engendre des translations suivant les vecteurs $2a[(1+2n)\vec{e}_x + (1+2m)\vec{e}_y]$. On peut générer des trajectoires cycliques suivant la formule :

$$\tan \varphi = \frac{1+2m}{1+2n} \quad L = \frac{2|1+2m|a}{\sin \varphi}, \quad (6.9)$$

et

$$\Delta_t = \frac{2a}{|1+2m|} \sin \varphi, \quad \varphi \in [0, \frac{\pi}{4}]. \quad (6.10)$$

6.3.5 Le domaine hexagonal

Sous l'action de translations et de symétries axiales, un hexagone de coté a définit un réseau infini de cellules d'hexagones similaires.

On considère tout d'abord un hexagone avec des conditions de translation sur son périmètre entier. Le domaine est invariant par translation de type $h(n\vec{e}_1 + m\vec{e}_2)$ où $\vec{e}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_x + \frac{1}{2}\vec{e}_y$ et $h = \sqrt{3}a$. La figure 40 montre deux translations simples de l'hexagone. Une trajectoire sera cyclique si elle est parallèle à une

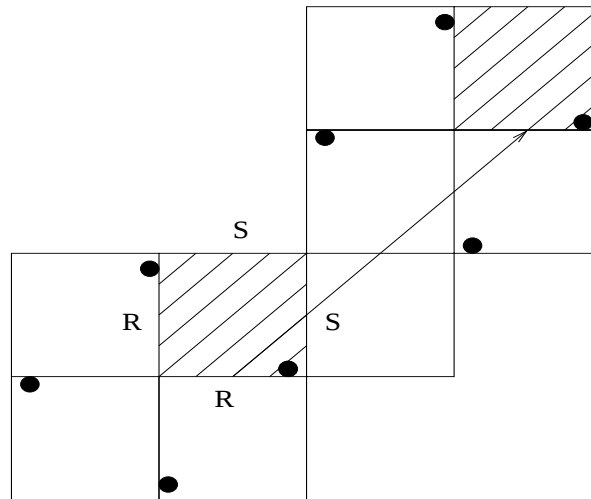


FIGURE 39 – Translation engendrée par rotations et symétries

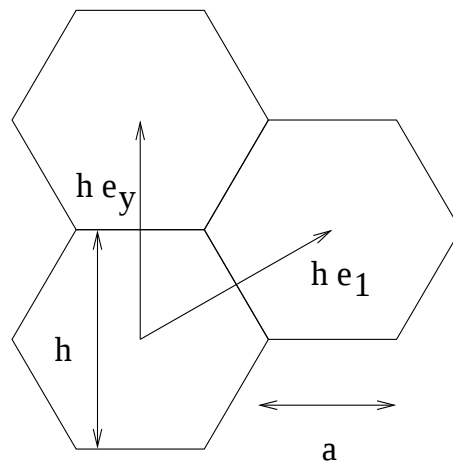


FIGURE 40 – Translation élémentaire d'un hexagone.

direction de translation ci-dessus. On obtient donc :

$$\tan \varphi = \frac{2m+n}{\sqrt{3}n}, \quad L = \frac{\sqrt{3}|n|h}{2|\cos \varphi|}, \quad (6.11)$$

où m et n sont premiers entre eux. La distance minimale à tracer s'obtient comme pour le cas rectangulaire en égalant $\Delta_t L$ à la surface de l'hexagone $\sqrt{3}h^2/2$:

$$\Delta_t = \frac{h}{|n|} |\cos \varphi| \quad \varphi \in [0, \pi]. \quad (6.12)$$

On considère ensuite un hexagone avec des conditions de réflexion sur son périmètre. Les symétries axiales externes réduisent le problème à triangle de côté a avec des conditions de réflexion sur ses bords. Une trajectoire engendre alors les angles φ , $\pi - \varphi$, $\frac{2\pi}{3} \pm \varphi$ et $\frac{\pi}{3} \pm \varphi$. La distance minimale à tracer s'obtient comme ci-dessus. On en déduit :

$$\Delta_t = \frac{h}{|n|} |\cos \varphi| \quad \varphi \in [0, \pi/6]. \quad (6.13)$$

7 Accélération des itérations multigroupes

La résolution de (2.22) se fait de la manière suivante : Dans certains problèmes, il n'y a pas de scattering d'un groupe de bas niveau d'énergie vers un groupe de haut niveau d'énergie. On a alors :

$$H_{gg'} = 0 \text{ si } g' > g. \quad (7.1)$$

L'équation (2.22) est alors facile à résoudre car le système matriciel est triangulaire inférieur : on résout par groupe d'énergie successif :

$$\begin{aligned} \psi_1 &= H_{11}^{-1} S_1, \\ \psi_2 &= H_{22}^{-1} (S_2 - H_{21} \psi_1), \\ \psi_G &= H_{GG}^{-1} (S_G - \sum_{g' < G} H_{Gg'} \psi_{g'}). \end{aligned} \quad (7.2)$$

Dans le cas où il y a une remontée en énergie, un schéma itératif peut être utilisé pour la résolution de (2.22). Le plus simple (appelé itération de Gauss Seidel) est le suivant :

Pour $i = 0, \dots$ jusqu'à convergence

Pour $g = 1, G$

$$\psi_{g+1}^{i+1} = H_{gg}^{-1} (S_g - \sum_{g' < g} H_{gg'} \psi_{g'}^{i+1} - \sum_{g' > g} H_{gg'} \psi_{g'}^i) \quad (7.3)$$

Les équations (7.2) et (7.3) se ramènent toujours à l'inversion de H_{gg} .

Dans la plupart des cas industriels, l'upscattering (remontée en énergie des neutrons) est important. Le rayon spectral de la méthode tend même vers 1 pour certains matériaux (0.9998 pour l'eau lourde, 0.998 pour le graphite et 0.61 pour l'aluminium). Dans le cas de l'eau lourde, Adams et Morel montrent que plusieurs dizaines de milliers d'itérations sur i sont nécessaires pour converger. Adams et Morel ont donc proposé une technique d'accélération de ce schéma que nous avons déjà utilisée pour le 2D.

Avec des notations standards, on note avec l'indice $k + \frac{1}{2}$, le résultat de l'équation non accélérée :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi_g^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_{tg}(r) \psi_g^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) &= \sum_{g' \leq g} \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}^{k+\frac{1}{2}}(r) + \\ &\sum_{g' > g} \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}^k(r) + s_g(r). \end{aligned} \quad (7.4)$$

On lui soustrait l'équation suivante :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi_g^{k+1}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_{tg}(r) \psi_g^{k+1}(r, \vec{\Omega}) = \sum_{g'} \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}^{k+1}(r) + s_g(r). \quad (7.5)$$

En notant $\xi_g^{k+\frac{1}{2}} = \psi_g^{k+1} - \psi_g^{k+\frac{1}{2}}$, on obtient l'équation suivante :

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \xi_g^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_{tg}(r) \xi_g^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) = \sum_{g'} \Sigma_{sgg'}(r) \xi_{g',0}^{k+\frac{1}{2}}(r) + R_g^{k+\frac{1}{2}}(r), \quad (7.6)$$

où :

$$R_g^{k+\frac{1}{2}}(r) = \sum_{g' > g} \Sigma_{sgg'}(r) (\psi_{g'}^{k+\frac{1}{2}} - \psi_{g'}^k), \quad (7.7)$$

et

$$\xi_{g,0}(r) = \int_{S_2} d\vec{\Omega} \xi_g(r, \vec{\Omega}). \quad (7.8)$$

La résolution de l'équation (7.6) est bien sûr aussi chère que la résolution de l'équation initiale. Le but de la méthode multigrille est de donner une estimation économique de l'erreur solution de (7.6).

On commence par approcher (7.6) par une équation de diffusion multigroupe .

$$-div(D_g grad(\xi_{g,0}^{k+\frac{1}{2}}))(r) + \Sigma_{tg}(r) \xi_{g,0}^{k+\frac{1}{2}}(r) = \sum_{g'} \Sigma_{sgg'}(r) \xi_{g',0}^{k+\frac{1}{2}}(r) + R_g^{k+\frac{1}{2}}(r), \quad (7.9)$$

où

$$D_g = \frac{1}{3\Sigma_{tg}}. \quad (7.10)$$

On suppose que le milieu est homogène (mêmes sections efficaces partout). On suppose encore pour simplifier que l'erreur est le produit d'une fonction $E(r)$ par une fonction de forme Ξ_g (indépendante de r) où $\sum_g \Xi_g = 1$ et

$$\xi_{g0}(r) = \Xi_g E(r). \quad (7.11)$$

On montre (par une analyse de Fourier que la vitesse de convergence de l'itération de Gauss Seidel est liée au rayon spectral de l'opérateur :

$$(T - S_{D0})^{-1} S_{U0} \quad (7.12)$$

où :

- T est la matrice carrée d'ordre G de section efficace totale : $T_{ij} = \delta_{ij} \Sigma_{ti}$
- S_{D0} est la matrice carrée d'ordre G de downscattering : $S_{D0,ij} = \Sigma_{sij}$ si $i \geq j$ et $S_{D0,ij} = 0$ sinon,
- S_{U0} est la matrice carrée d'ordre G d'upscattering : $S_{U0,ij} = \Sigma_{sij}$ si $i < j$ et $S_{U0,ij} = 0$ sinon.

On espère qu'en choisissant Ξ_g égal au mode propre dominant de (7.12) , on va pouvoir éliminer le mode propre dominant (déflation) du schéma itératif global et donc accélérer la convergence du schéma global.

On résout donc :

Trouver le vecteur propre $\Xi = \{\Xi_g\}_{g=1,N}$ associé à la plus grande valeur propre de :

$$(T - S_{D0})^{-1} S_{U0} \Xi = \rho \Xi, \quad (7.13)$$

Cette méthode n'a un intérêt que si la seconde valeur propre de l'itération de Gauss-Seidel est suffisamment éloignée de la première.

En injectant (7.11) dans (7.9) et en effectuant une sommation sur tous les groupes, on obtient l'équation :

$$-div(< D > grad E(r)) + < \Sigma_a > E(r) = < R >, \quad (7.14)$$

où

$$\begin{aligned} < D > &= \sum_g D_g \Xi_g, \\ < \Sigma_a > &= \sum_g (\Sigma_{tg} \Xi_g - \sum_{g'} \Sigma_{sgg'} \Xi_{g'}), \\ < R > &= \sum_g R_g^{k+\frac{1}{2}}(r). \end{aligned}$$

On aboutit donc à :

$$-div(< D > grad E(r)) + < \Sigma_a > E(r) = < R >. \quad (7.15)$$

Après le calcul de Ξ grâce à (7.13) , le schéma global se récapitule ainsi :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \psi_g^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) + \Sigma_{tg}(r) \psi_g^{k+\frac{1}{2}}(r, \vec{\Omega}) &= \sum_{g' \leq g} \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}^{k+\frac{1}{2}}(r) + \\ &\sum_{g' > g} \Sigma_{sgg'}(r) \phi_{g'}^k(r) + s_g(r), \end{aligned} \quad (7.16)$$

On pose :

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= \sum_g D_g \Xi_g, \\ \langle \Sigma_a \rangle &= \sum_g (\Sigma_{t,g} \Xi_g - \sum_{g'} \Sigma_{s,gg'} \Xi_{g'}), \\ \langle R \rangle &= \sum_g R_g^{k+\frac{1}{2}}(r). \end{aligned}$$

On résout :

$$-div(\langle D \rangle grad E(r)) + \langle \Sigma_a \rangle E(r) = \langle R \rangle. \quad (7.17)$$

On pose $\xi_{g0}(r) = \Xi_g E(r)$ et $\phi_g^{k+1}(r) = \phi_g^{k+\frac{1}{2}}(r) + \xi_{g0}(r)$.

Dans le cas où le milieu n'est pas homogène, on suppose que l'on peut généraliser la démarche précédente. Ξ est alors un vecteur constant par milieu.

Cette approche a été implantée et doit être testée sur des cas réalistes dans le cadre de SUNSET.

Un autre accélérateur a été développé qui résout directement l'équation 7.9. Cet accélérateur nécessite de résoudre un problème de diffusion couplé et est donc beaucoup plus cher que l'accélérateur d'Adams et Morel. Des tests sont à effectuer dans le cadre de SUNSET pour déterminer quel accélérateur choisir.

8 Conclusion

Cette note définit et détaille les méthodes de TDT qui ont été mises en oeuvre dans le cadre du projet Descartes et que l'on retrouve dans les nombreuses notes citées dans la bibliographie.

Cette version de la notice théorique n'est qu'une première version qui détaille aussi :

- les méthodes (et leurs équations) à tester concernant les différentes accélérations multigroupe,
- les équations du schéma diamant et de l'accélération de Igor Suslov obtenues après examen du code MCGG et dont la programmation et les tests restent à finir.

Une extension de cette méthode est à envisager pour le 3D général avec une mise en oeuvre des techniques de parallélisme pour faire face au volume des calculs à effectuer. Une première étape consistera à examiner les méthodes existants pour un tracé 3D efficace et voir comment adapter les techniques de TDT à cette représentation de la géométrie.

9 Description d'un fichier de tracking

Le fichier de tracking est constitué d'un certain nombre d'enregistrement égal au nombre de trajectoires N_{traj} . Pour chaque trajectoire, on stocke :

1. un tableau d'entier que l'on note *itrack*,
2. un tableau de réels que l'on note *rtrack*.

itrack est composé ;

1. d'un buffer contenant :
 - l'adresse de la dernière donnée de la trajectoire,
 - le nombre de sous-trajectoires n_t contenues dans cette trajectoire,
 - le numéro de la surface gauche à la trajectoire (si on a une représentation isotrope des conditions aux limites sur les surfaces (un seul cone)) ou le numéro du cône gauche dans le cas d'une représentation par cône (un nombre de cône supérieur à un) sur chaque surface,
 - le numéro de la surface droite (ou bien du cône),
2. d'un ensemble d'entiers donnant les numéros des régions $i_{k,j}$ successivement traversées :

$$(i_{1,j}, i_{2,j}, \dots, i_{n_j,j}), \quad j = 1, n_t$$

où n_j est le nombre de régions traversées par la sous-trajectoire j ,

3. d'un ensemble de n_t couplets (n_j, n_{phi}) où n_{phi} est le numéro de l'angle 2D de la sous-trajectoire.

rtrack est composé ;

1. d'un buffer contenant :
 - le cosinus de l'angle entre la trajectoire et la normale à la surface gauche,
 - le cosinus de l'angle entre la trajectoire et la normale à la surface droite,
 - delr la taille du tube de discrétisation spatial,
 - le poids total : delr * poids de la trajectoire,
2. d'un ensemble de réels donnant les longueurs des régions successivement traversées :

$$(l_{1,j}, l_{2,j}, \dots, l_{n_j,j}), \quad j = 1, n_t$$

où $l_{i,j}$ est la longueur de la i^{ieme} région traversée par la sous-trajectoire j .

Références

- [1] A. Ribes and C. Caremoli, “Salomé platform component model for numerical simulation,” *COMP-SAC 07 : Proceeding of the 31st Annual International Computer Software and Applications Conference*, pages 553-564, Washington, DC, USA, 2007, IEEE Computer Society. See the website at <http://www.salome-platform.org>.
- [2] A. Hébert, *Applied Reactor Physics*, Presses Internationales Polytechnique, ISBN 978-2-553-01436-9, 424 p., Montréal, 2009.
- [3] R. Sanchez, “TDT, an advanced Integral Transport Method,” *Annual Meeting of the American Nuclear Society*, San-Diego, California, June 20-24, 1993.
- [4] N. Lyoussi-Charrat, “Calcul du transport neutronique dans le code APOLLO2 par la méthode des probabilités de collision dans une géométrie cartésienne générale,” Thèse de doctorat, Université de Clermont-Ferrand 2, France, Mars 1994.
- [5] M. J. Halsall, “CACTUS, a characteristics solution to the neutron transport equations in complicated geometries,” Report AEEW-R 1291, United Kingdom Atomic Energy Establishment, Winfrith, 1980.
- [6] I. R. Suslov, “Solution of Transport Equation in 2- and 3-Dimensional Irregular Geometry by the Method of Characteristics”, *Joint Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*, Karlsruhe, Germany, April 19-23, 1993.
- [7] I. R. Suslov, “An Algebraic Collapsing Acceleration Method for Acceleration of the Inner (Scattering) Iterations in Long Characteristics Transport Theory”, *Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Applications*, Paris, France, September 22-24, 2003.
- [8] H. Khalil, “A Nodal Diffusion Technique for Synthetic Acceleration of Nodal Sn Calculations,” *Nucl. Sci. Eng.*, **90**, 263 (1985).