

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Cette thèse intitulée :

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE LA DIFFUSION NEUTRONIQUE POUR UNE GÉOMÉTRIE HEXAGONALE

présentée par : Abdelhak BENABOUD

en vue de l'obtention du grade de : Philosophiæ Doctor (Ph.D.)

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

M. ROZON Daniel, Ph.D., président

M. HÉBERT Alain, D. ing., directeur de recherche

M. MARLEAU Guy, Ph.D., co-directeur de recherche

M. ROY Robert, Ph.D., membre

M. BEAUDET Michel, Ph.D., membre externe

SOMMAIRE

La conception des réacteurs sous-modérés à variation de spectre (RSMVS), des réacteurs de recherche et des réacteurs surgénérateurs rapides est basée sur une distribution du combustible suivant un réseau hexagonal. Une telle disposition permet un durcissement du spectre neutronique à l'intérieur du réacteur, tout en garantissant une évacuation adéquate de la chaleur, ce qui permet l'obtention d'un réseau sous-modéré présentant des caractéristiques de sûreté intéressantes. Cependant, les logiciels de calcul de réacteur couramment utilisés, y compris TRIVAC-3, bien que très efficaces pour traiter la géométrie cartésienne, sont totalement inadéquats pour traiter un réseau hexagonal.

L'objectif de cette thèse est de généraliser les méthodes de collocations nodales et variationnelles pour des géométries hexagonales en 2D et 3D. Ceci implique que la représentation polynomiale et les algorithmes de résolution des systèmes linéaires couramment utilisés dans TRIVAC-3 seront réévalués et reprogrammés afin de tenir compte de nouvelles géométries. Un algorithme ADI (Alternate Direction Implicit) à quatre axes avec la méthode préconditionnée des puissances sera développé pour traiter les réseaux hexagonaux en 3D.

ABSTRACT

The fuel elements inside advanced PWR, research and fast reactors are often arranged in a hexagonal lattice. Such fuel distribution helps to obtain an under moderated reactor which presents many practical advantages over the classical designs. However, many codes, including TRIVAC-3, cannot represent such a lattice.

The aim of this thesis is to generalize the nodal and variational collocation methods to hexagonal geometry in 2D and 3D. This implies that the polynomial representation and the linear system resolution algorithms, currently used in TRIVAC-3, have to be reevaluated and reprogrammed to take into account the new geometries. A four-swap ADI (Alternate Direction Implicit) preconditioned power method is developed for treating 3D hexagonal lattices.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé à l'Institut de Génie Énergétique de l'École Polytechnique de Montréal.

Que Monsieur D. ROZON, Directeur de l'Institut de Génie Énergétique, trouve ici le témoignage de ma profonde reconnaissance pour son accueil et pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Que Monsieur A. HÉBERT, Professeur à l'Institut de Génie Énergétique, qui a assumé la direction de cette thèse ainsi que son soutien financier, trouve ici le témoignage de ma profonde gratitude.

Je tiens à remercier Monsieur G. MARLEAU, Chercheur à l'Institut de Génie Énergétique, d'avoir accepté la co-direction de cette thèse.

Je remercie également Messieurs R. ROY, Chercheur à l'Institut de Génie Énergétique, et M. BEAUDET, Ingénieur à Hydro-Québec, d'avoir bien voulu être membres du jury.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
SOMMAIRE	v
ABSTRACT	vi
REMERCIEMENTS	vii
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES TABLEAUX	xiv
LISTE DES ANNEXES	xv
1 INTRODUCTION	1
1.1 TRAVAUX ANTÉRIEURS	4
1.2 CARACTÉRISTIQUES DU PRÉSENT TRAVAIL	5
2 THÉORIE	10
2.1 L'ÉQUATION DE LA DIFFUSION NEUTRONIQUE	10
2.1.1 Introduction	10
2.1.2 Équation de la diffusion statique	11

2.1.2.1	Formulation générale	12
2.1.2.2	Formulation multigroupe	13
2.1.2.3	Équation de la diffusion à deux groupes	15
2.1.2.4	Équation de la diffusion monocinétique	16
2.2	DISCRÉTISATION EN ÉLÉMENTS FINIS DE LAGRANGE . . .	21
2.2.1	Introduction	21
2.2.2	La fonctionnelle de diffusion	22
2.2.3	Élément fini triangulaire	29
2.2.4	Élément fini hexagonal	34
2.2.5	De deux à trois dimensions	43
2.2.6	Assemblage des éléments	45
2.3	DISCRÉTISATION EN DIFFÉRENCES FINIES À MAILLES	
	CENTRÉES	49
2.3.1	Cas hexagonal	51
2.3.2	Cas triangulaire	58
2.4	NUMÉROTATION DES INCONNUES	61
2.5	RÉSOLUTION DIRECTE DU PROBLÈME MONOCINÉTIQUE .	67
2.5.1	Introduction	67
2.5.2	Résolution du problème direct	67
2.5.3	Résolution accélérée du problème direct	72
2.6	RÉSOLUTION ADI DU PROBLÈME MONOCINÉTIQUE	78
2.6.1	Introduction	78
2.6.2	Méthode préconditionnée des puissances	79

	x
2.6.3	Convergence de la méthode préconditionnée des puissances 82
2.6.4	Accélération de la convergence 85
2.6.5	La méthode ADI 85
3	RÉSULTATS NUMÉRIQUES 88
3.1	STRUCTURATION INFORMATIQUE DU CODE TRIVAC-3 88
3.1.1	Introduction 88
3.1.2	Description 89
3.2	TRAITEMENT DE QUELQUES BENCHMARKS 90
3.2.1	Premier benchmark 92
3.2.2	Deuxième benchmark 93
3.2.3	Troisième benchmark 94
3.2.4	Quatrième benchmark 94
3.3	DESCRIPTION ET TRAITEMENT DU RÉACTEUR
	SLOWPOKE 95
3.3.1	Introduction 95
3.3.2	Description du réacteur SLOWPOKE 96
3.3.3	Traitement du réacteur SLOWPOKE 97
	CONCLUSION 99
	BIBLIOGRAPHIE 137

LISTE DES FIGURES

1.1	Maillage en différences finies centrées.	8
1.2	Maillage en éléments finis.	9
2.1	Élément fini triangulaire de base	32
2.2	Fonctions d'interpolation linéaires pour un élément fini triangulaire	32
2.3	Exemple d'élément fini rationnel	36
2.4	Élément fini hexagonal de base	38
2.5	Fonctions d'interpolation linéaires pour un élément fini hexagonal .	41
2.6	Élément fini linéaire de base	44
2.7	Exemple de correspondance entre la numérotation globale et locale (cas triangulaire)	47
2.8	Exemple de correspondance entre la numérotation globale et locale (cas hexagonal)	48
2.9	Schéma d'un hexagone avec ses voisins	52
2.10	Schéma d'un triangle avec ses voisins	53
2.11	Numérotation des inconnues : cas des différences finies centrées au niveau d'un hexagone	63
2.12	Numérotation des inconnues : cas des différences finies centrées au niveau d'un triangle	64
2.13	Numérotation des inconnues : cas d'un élément fini triangulaire . .	65

2.14	Numérotation des inconnues : cas d'un élément fini hexagonal . . .	66
3.1	Organigramme thématique de TRIVAC-3	117
3.2	Organigramme thématique de PHASE1	118
3.3	Organigramme thématique de PHASE2	119
3.4	Schéma du réacteur : premier benchmark	120
3.5	Comparaison des facteurs de puissance : CRONOS et TRIVAC-3 .	121
3.6	Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : premier benchmark	122
3.7	Coupe verticale du réacteur : deuxième benchmark	123
3.8	Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : deuxième benchmark	124
3.9	Schéma d'un réacteur HTGR de petite taille	125
3.10	Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : troisième benchmark (SET1)	126
3.11	Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : troisième benchmark (SET2)	127
3.12	Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : troisième benchmark (SET3)	128
3.13	Comparaison des facteurs de puissance SET2	129
3.14	Comparaison des facteurs de puissance SET3	130
3.15	Évolution du facteur de multiplication effectif : toutes barres extraites	131
3.16	Évolution du facteur de multiplication effectif : toutes barres insérées	132

3.17 Évolution du facteur de multiplication effectif en fonction de la position des barres	133
3.18 Coupe radiale du cœur du réacteur SLOWPOKE	134
3.19 Évolution de la réactivité en fonction du rayon équivalent	135
3.20 Schéma du réacteur SLOWPOKE	136

LISTE DES TABLEAUX

3.1	Propriétés nucléaires du premier benchmark	103
3.2	Comparaison de CRONOS et de TRIVAC-3	104
3.3	Comparaison des modules Bivac et Trivac	105
3.4	Condition de $\beta = 1$ axialement	106
3.5	Calcul tridimensionnel avec condition de flux nul axialement	107
3.6	Propriétés nucléaires du troisième benchmark (SET1)	108
3.7	Propriétés nucléaires du troisième benchmark (SET2)	109
3.8	Propriétés nucléaires du troisième benchmark (SET3)	110
3.9	Comparaison de BUG-180 et de TRIVAC-3 (SET1)	111
3.10	Comparaison de BUG-180 et de TRIVAC-3 (SET2)	112
3.11	Comparaison de BUG-180 et de TRIVAC-3 (SET3)	113
3.12	Évolution du K_{eff} : toutes barres extraites	114
3.13	Évolution du K_{eff} : toutes barres insérées	114
3.14	Propriétés nucléaires utilisées pour le calcul de SLOWPOKE	115
3.15	Maillage axial du réacteur SLOWPOKE	116
3.16	Comparaison des facteurs de multiplication effectifs (SLOWPOKE)	116

LISTE DES ANNEXES

A FICHIERS DE DONNÉES TRIVAC-3 DES BENCHMARKS	140
A.1 Données du premier benchmark	140
A.2 Données du deuxième benchmark	142
A.3 Données du troisième benchmark	143
A.4 Données du quatrième benchmark	145
A.5 Données du test SLOWPOKE	154
B MODIFICATIONS AU GUIDE DE L'USAGER TRIVAC-3	165

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

La plupart des ingénieurs et scientifiques qui étudient les phénomènes physiques font face à deux tâches majeures :

1. La formulation mathématique du processus physique.
2. La simulation numérique de ce processus.

La formulation mathématique d'un processus physique requiert les données de base ayant rapport avec les sujets traités (par exemple : les lois physiques) et le plus souvent, certains outils mathématiques.

Dans certains cas, l'approche finale est l'établissement d'équations différentielles, permettant la compréhension et/ou la simulation du phénomène physique. Le développement d'un modèle mathématique pour un processus donné est finalisé par les hypothèses concernant son comportement. Pour la simulation on fait appel à des méthodes numériques éprouvées et aux ordinateurs pour étudier le modèle mathématique et estimer les caractéristiques du processus.

La dérivation des équations régissant plusieurs problèmes n'est pas difficile, par ailleurs la solution exacte par le biais de méthodes numériques est souvent un véritable défi. Dans ce cas, des méthodes approximatives donnent une excellente alternative pour la recherche de solutions. Parmi ces méthodes, on trouve les

différences finies et les méthodes variationnelles telle que la méthode de Ritz et Galerkin qui sont fréquemment discutées dans la littérature. L'approximation des équations différentielles par les différences finies, consiste à remplacer les dérivées par des quotients de différences finies qui font intervenir les valeurs de la solution à des endroits prédéterminés du maillage du domaine considéré. Les équations algébriques résultantes, sont résolues en tenant compte des conditions appliquées aux frontières du domaine.

Dans l'approche variationnelle, l'équation différentielle est remplacée par une forme intégrale équivalente. La solution est alors une combinaison linéaire ($\Phi = \sum_i \varphi_i \psi_i$) de fonctions d'approximation (ψ_i) judicieusement choisies et des inconnues du problème que constituent les coefficients (φ_i). Ces coefficients (φ_i) sont déterminés de sorte que la forme intégrale qui est l'équivalente de l'équation différentielle originale soit satisfaite. Il existe plusieurs méthodes variationnelles, par exemple, la méthode de Rayleigh-Ritz, Galerkin, . . . , ces méthodes diffèrent les unes des autres par le choix de la forme intégrale, des poids des fonctions et/ou des fonctions d'approximation. Les méthodes variationnelles présentent certains désavantages liés à la difficulté de déterminer les fonctions d'approximation pour les problèmes ayant des domaines arbitraires.

La méthode des éléments finis est une technique numérique puissante qui utilise les méthodes variationnelles et la théorie de l'interpolation pour résoudre des équations différentielles et intégrales. Cette méthode est très générale et son application est très répandue dans le monde de l'ingénierie. La méthode des éléments finis est

très recommandée pour la description des géométries complexes, la modélisation et la simulation de la plupart des phénomènes physiques^[1].

Depuis plusieurs années, de nombreux chercheurs ont étudié les techniques de discrétisation des équations régissant l'évolution de la population neutronique dans un réacteur afin de calculer les paramètres clés servant au design. Au fil des années il y a eu l'émergence de nouvelles filières différentes de celles qui existaient déjà soit par la nature du combustible, du caloporteur, du modérateur ou de l'emplacement des éléments combustibles dans le réacteur. Ceci a permis grâce aux particularités propres à la filière considérée, de faire un certain nombre de simplifications au niveau des calculs. C'est ainsi que plusieurs codes de calcul ont pu être développés, certains spécifiques à une filière particulière, d'autres plus globaux sont en développement constant.

La conception des réacteurs de recherche, des réacteurs surgénérateurs rapides et des réacteurs sous-modérés à variation de spectre (RSMVS) est basée sur une distribution du combustible suivant un réseau hexagonal. Une telle disposition permet un durcissement du spectre neutronique à l'intérieur du réacteur, tout en garantissant une évacuation adéquate de la chaleur, ce qui permet l'obtention d'un réseau sous-modéré présentant des caractéristiques de sûreté intéressantes. Cependant, les logiciels de calcul de réacteur couramment utilisés, bien que très efficaces pour traiter la géométrie cartésienne, sont totalement inadéquats pour traiter un réseau hexagonal.

1.1 TRAVAUX ANTÉRIEURS

Depuis le début du développement de moyens de calcul puissants pouvant résoudre des systèmes d'équations avec des milliers d'inconnues, les neutroniciens ont appliqué plusieurs techniques pour résoudre l'équation de la diffusion. Initialement la méthode la plus fréquente et aussi la plus populaire était celle des différences finies qui a dominé durant plusieurs décennies. Cette méthode avait l'avantage de décrire le comportement détaillé des neutrons dans un réacteur. Bien entendu, la précision de la solution dépend du nombre d'intervalles sur lesquels la discrétisation est opérée.

La méthode des éléments finis a été proposée par plusieurs auteurs pour résoudre l'équation de la diffusion neutronique. Par exemple, nous pouvons citer les travaux suivants :

- Semenza, Lewis et Rossow^[2], ont appliqué cette méthode à l'équation de la diffusion multigroupe. Ils ont en premier lieu discrétisé l'équation de la diffusion monocinétique en utilisant des éléments de base triangulaires et rectangulaires. Puis ils ont généralisé leur approche au cas multigroupe, en traitant celui-ci comme un ensemble d'équations monocinétiques dont les termes de sources sont les fissions et les transferts issus des autres groupes. Notons aussi que les fonctions de représentation étaient linéaires. Cette technique a été utilisée pour étudier les réacteurs à eau.
- Kaper, Leaf et Lindeman^[3], ont comparé les résultats détaillés d'une étude

utilisant des éléments finis d'ordre élevé avec une approximation en différence finie d'ordre faible. Ils ont conclu que l'utilisation de la méthode des éléments finis d'ordre élevé conduit à un gain substantiel sur les coûts de calcul. De plus, les solutions de l'équation de la diffusion multigroupe avec la méthode d'ordre élevé sont suffisamment précises, de sorte que les erreurs que l'on peut rencontrer sont attribuables, soit à l'approximation de la diffusion soit aux autres approximations dues à la modélisation du réacteur et non pas à l'approximation numérique.

- Kang et Hansen^[4], ont utilisé des polynômes d'Hermite pour la résolution de l'équation de la diffusion sur des éléments rectangulaires. Cette dernière méthode permet d'obtenir des courbes de courant neutronique très précises car la continuité du courant est forcée sur l'ensemble du réacteur lors de l'assemblage des éléments.

1.2 CARACTÉRISTIQUES DU PRÉSENT TRAVAIL

L'ancienne version du code TRIVAC^[5] (TRIVAC-2) ne permettait pas le traitement de géométries hexagonales. De ce fait, faire un calcul de diffusion pour des réacteurs de recherche, surgénérateurs ou sous-modérés était impossible. Afin d'avoir une chaîne de calcul neutronique complète il était nécessaire de se doter d'un code pouvant traiter les géométries hexagonales. D'où l'idée d'écrire une nouvelle version appelée TRIVAC-3, composée de deux modules Bivac et Trivac. Le

module Bivac est issu de l'ancienne version du code BIVAC et comme son nom l'indique permet de faire des calculs à une et deux dimensions. Quant au module Trivac, il est issu du code TRIVAC-2 et permet de traiter des géométries à une, deux et trois dimensions. Ces deux modules diffèrent par la méthode de résolution des systèmes matriciels issus de la discrétisation. En effet, alors que Bivac utilise la méthode inversée des puissances pour la résolution des systèmes d'équations issus de la discrétisation, Trivac utilise la méthode préconditionnée des puissances avec un préconditionnement de type ADI. Nous verrons plus loin la description de chaque module.

L'objectif du présent travail est d'étudier les différentes techniques de discrétisation de l'équation de la diffusion qui soient cohérentes et à la fois compatibles avec un réseau hexagonal bi ou tridimensionnel et avec un algorithme de résolution ADI des systèmes matriciels discrétisés.

Pour des raisons que nous verrons plus tard, nous allons considérer les méthodes de collocation nodales et variationnelles à l'ordre 1. Pour la première méthode, la discrétisation sera faite au niveau de l'hexagone au complet et aussi au niveau du triangle quand on divise l'hexagone en triangles équilatéraux. La méthode de collocation nodale à l'ordre 1 est équivalente à une méthode de différences finies centrées. La figure (1.1) montre l'emplacement des inconnues pour la méthode de différences finies centrées. Quant à la deuxième discrétisation, on utilisera des éléments finis linéaires. Cette discrétisation sera réalisée, d'une part en prenant un élément triangulaire ce qui représente l'approche classique pour résoudre ce type

de problème. Et d'autre part en prenant comme élément de base l'hexagone au complet, tout en restant compatible avec l'algorithme ADI. La figure (1.2) montre l'emplacement des inconnues pour ce cas.

Dans le cas du module Trivac, il est question de développer un algorithme ADI à quatre axes pour traiter une géométrie tridimensionnelle hexagonale.

Ces techniques seront ensuite qualifiées et appliquées à l'étude du réacteur SLOWPOKE de l'École Polytechnique.

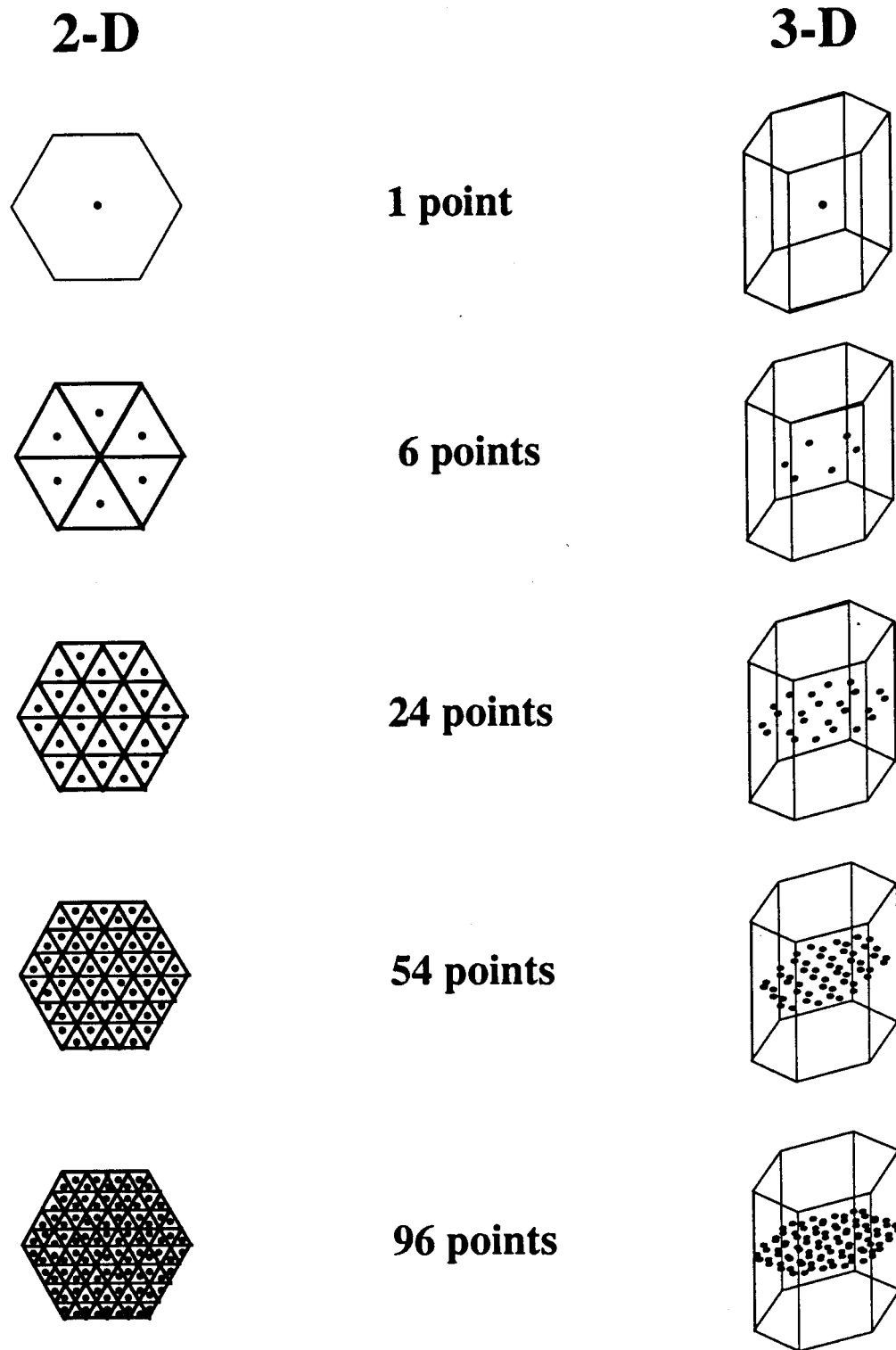


Figure 1.1: Maillage en différences finies centrées.

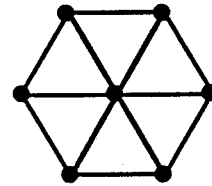
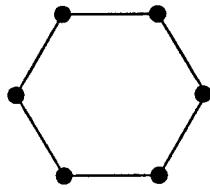
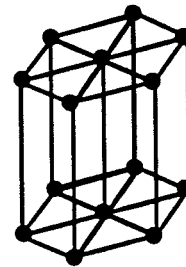
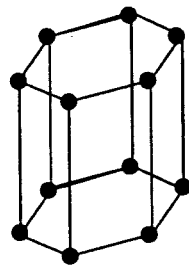
Hexagone complet**Triangle****2-D****3-D**

Figure 1.2: Maillage en éléments finis.

CHAPITRE 2

THÉORIE

2.1 L'ÉQUATION DE LA DIFFUSION NEUTRONIQUE

2.1.1 Introduction

Si l'on néglige le phénomène de fluctuation, l'équation de Boltzman (dite aussi équation de transport) donne une description exacte du comportement des neutrons en fonction de l'espace, de l'énergie et du temps. Toutefois, il n'est pas économiquement raisonnable de résoudre cette équation pour les problèmes de design des réacteurs nucléaires.

Il est bien connu qu'il est généralement plus simple de résoudre les équations différentielles que les équations intégrales. C'est pourquoi on fait souvent une approximation, dite de la diffusion de l'équation du transport, pour la remplacer par une équation aux dérivées partielles^[6].

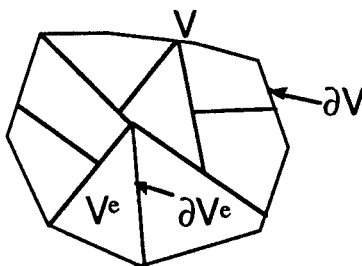
C'est ainsi que les études portant sur la physique des réacteurs peuvent, dans une large mesure, être réalisées avec l'équation de la diffusion statique des neutrons. Mentionnons entre autres, les études préliminaires servant à finaliser la configuration du réacteur (position des mécanismes de réactivité, etc...), les études de design détaillé (servant à fixer les limites d'exploitation), et enfin le suivi du réacteur en marche (gestion du combustible).

Cependant, la complexité de la représentation spatiale des réacteurs empêche qu'on résolve analytiquement l'équation de la diffusion de sorte qu'une approche, numérique doit être employée. Ceci nécessite les deux étapes suivantes :

1. **Discrétisation de l'équation de la diffusion** : l'inconnue de cette équation est une fonction continue définie sur l'espace du réacteur. Il est donc nécessaire de discrétiser l'équation de la diffusion de façon à la transformer en système matriciel.
2. **Résolution du système matriciel** : une fois le processus de discrétisation terminé, l'inconnue est un vecteur de R^n qui peut être explicité par certaines techniques d'analyse numérique.

2.1.2 Équation de la diffusion statique

Considérons une région V dans un espace à n dimensions et soit ∂V sa frontière. Supposons que V soit composée de plusieurs régions disjointes V^e , $e = 1, 2, \dots, E$, chacune d'elles ayant sa propre frontière ∂V^e , comme indiqué dans la figure ci-dessous :



2.1.2.1 Formulation générale

La forme générale de l'équation de la diffusion statique est donnée par^[8] :

$$\begin{aligned}
 -\nabla \cdot D(\vec{r}, E) \nabla \Phi(\vec{r}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E) - \lambda \chi(E) \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \Phi(\vec{r}, E') dE' \\
 - \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \Phi(\vec{r}, E') dE' = 0
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

où on a négligé le terme source indépendant du flux neutronique.

Et où :

$\Phi(\vec{r}, E)$ représente le flux de neutrons (n/cm²sec),

$D(\vec{r}, E)$ est le coefficient de diffusion (cm),

$\Sigma_t(\vec{r}, E)$ est la section efficace macroscopique totale (cm⁻¹),

$\Sigma_f(\vec{r}, E)$ est la section efficace macroscopique de fission (cm⁻¹),

$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E)$ est la section efficace de transfert de l'énergie E' vers E (cm⁻¹),

ν est le nombre moyen de neutrons produit par fission,

$\chi(E)$ représente le spectre de fission,

λ valeur propre. Le facteur de multiplication effectif correspond à $K_{\text{eff}} = \lambda^{-1}$ où λ^{-1} est la plus grande valeur propre en valeur absolue.

Les constantes nucléaires D , Σ_t , Σ_s et Σ_f de l'équation (2.1) sont continues dans chaque sous région V^e et peuvent être discontinues sur ∂V^e . Sur ∂V^e on

avoir les conditions d'interface suivantes : $\Phi(\vec{r}, E)$ et $D(\vec{r}, E) \nabla\Phi(\vec{r}, E)$ qui sont continues, où la première représente la continuité du flux et la seconde celle du courant.

Sur ∂V , qui représente la frontière externe du réacteur on a :

$$D(\vec{r}, E) \nabla\Phi(\vec{r}, E) \cdot \vec{n}(\vec{r}) + \frac{1 - \beta(\vec{r}, E)}{2 + \beta(\vec{r}, E)} \Phi(\vec{r}, E) = 0 ; \vec{r} \in \partial V_\beta \quad (2.2)$$

si ∂V_β est une frontière avec condition d'albédo, ou :

$$\Phi(\vec{r}, E) = 0 ; \vec{r} \in \partial V_0 \quad (2.3)$$

si ∂V_0 est une condition de flux nul. La condition de réflexion est obtenue en posant $\beta(\vec{r}, E) = 1$ alors que la condition de courant réentrant nul est obtenue en posant $\beta(\vec{r}, E) = 0$. Notons que $\beta(\vec{r}, E)$ représente l'albédo de la surface et doit être positif.

2.1.2.2 Formulation multigroupe

D'une manière générale, la variable énergie est traitée de façon discrétisée en groupes d'énergie. La transformation de la formulation générale (2.1) en une formulation multigroupe, se fait par un partage du domaine énergétique :

$$\Delta E_g = E_{g-1} - E_g , \quad g = 1, 2, \dots, G. \text{ avec } E_G \approx 0 \text{ Mev et } E_0 \approx 10 \text{ Mev.}$$

Nous pouvons donc écrire en supposant que la dépendance énergétique du flux séparable de la variable espace que :

$$\Phi(\vec{r}, E) \approx \Phi_g(\vec{r}) \Psi_g(E) \quad (2.4)$$

où $\Psi_g(E)$ est définie par :

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Psi_g(E) dE = 1, \quad g = 1, 2, \dots, G.$$

En substituant (2.4) dans (2.1) et après intégration sur chaque groupe d'énergie on obtient les moyennes des paramètres nucléaires dans chaque groupe : $D_g(\vec{r})$, $\Sigma_{tg}(\vec{r})$, χ_g , $\nu\Sigma_{fg}(\vec{r})$ et $\Sigma_{gg'}(\vec{r})$ par :

$$\begin{aligned} D_g(\vec{r}) &= \int_{\Delta E_g} D(\vec{r}, E) \Psi_g(E) dE \\ \Sigma_{tg}(\vec{r}) &= \int_{\Delta E_g} \Sigma_t(\vec{r}, E) \Psi_g(E) dE \\ \chi_g &= \int_{\Delta E_g} \chi(E) \Psi_g(E) dE \\ \nu\Sigma_{fg}(\vec{r}) &= \int_{\Delta E_g} \nu\Sigma_f(\vec{r}, E) \Psi_g(E) dE \\ \Sigma_{gg'}(\vec{r}) &= \int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \Psi_{g'}(E') dE \\ -\nabla \cdot D_g(\vec{r}) \nabla \Phi_g(\vec{r}) + \Sigma_{tg}(\vec{r}) \Phi_g(\vec{r}) - \sum_{g'=1}^G [\lambda \chi_g \nu\Sigma_{fg'}(\vec{r}) + \Sigma_{gg'}(\vec{r})] \Phi_{g'}(\vec{r}) &= 0 \\ &g = 1, 2, \dots, G. \end{aligned} \quad (2.5)$$

C'est l'équation de la diffusion multigroupe.

L'équation précédente peut aussi être mise sous la forme suivante :

$$[A + \lambda B] \vec{\Phi} = \vec{0} \quad (2.6)$$

où A et B sont des opérateurs différentiels, agissant sur le vecteur $\vec{\Phi}$ qui représente le flux neutronique.

$$\vec{\Phi} = \begin{Bmatrix} \Phi_1(\vec{r}) \\ \Phi_2(\vec{r}) \\ \vdots \\ \Phi_G(\vec{r}) \end{Bmatrix}$$

où $\Phi_i(\vec{r})$; $i = 1, 2, \dots, G$ sont des fonctions réelles continues par morceaux et intégrables sur le volume V du réacteur. G représente le nombre de groupes d'énergie du problème de diffusion. L'équation (2.6) est un problème singulier de Sturm-Liouville. $\vec{\Phi}$ est un vecteur propre, et λ^{-1} est la valeur propre correspondante. L'ensemble de tous les vecteurs propres et de toutes les valeurs propres est appelé le "spectre" de ce problème. Nous nous intéressons à connaître la valeur propre la plus grande en valeur absolue, que l'on désigne par $\lambda^{-1} = K_{\text{eff}}$, et le vecteur propre correspondant qui sera toujours positif sur le domaine V . Cette solution est appelée "fondamentale" et représente la réactivité du réacteur ainsi que le flux neutronique.

Remarque : Il y a deux approches générales pour résoudre numériquement ce type de problème. La première consiste à approximer l'opérateur A et on trouve dans cette catégorie la méthode des différences finies. La seconde consiste à approximer la solution et la méthode des éléments finis est un exemple parmi d'autres dans cette catégorie.

2.1.2.3 Équation de la diffusion à deux groupes

La formulation différentielle à deux groupes de l'équation de la diffusion peut s'écrire sous la forme de deux équations monocinétiques en définissant des termes de source $S_g(\vec{r})$ fonction des arrivées de neutrons en provenance des autres groupes (on suppose qu'il n'y a pas de remontée de neutrons par diffusion). Nous supposons

que tous les neutrons secondaires de fission sont rapides :

$$-\nabla \cdot D_g(\vec{r}) \nabla \Phi_g(\vec{r}) + \Sigma_{rg}(\vec{r}) \Phi_g(\vec{r}) = S_g(\vec{r}) \quad , \quad g = 1, 2 \quad (2.7)$$

avec :

$$S_1(\vec{r}) = \frac{1}{K_{\text{eff}}} [\nu \Sigma_{f1}(\vec{r}) \Phi_1(\vec{r}) + \nu \Sigma_{f2}(\vec{r}) \Phi_2(\vec{r})] \quad (2.8)$$

$$S_2(\vec{r}) = \Sigma_{1 \rightarrow 2}(\vec{r}) \Phi_1(\vec{r})$$

et :

$$\Sigma_{rg}(\vec{r}) = \Sigma_{tg}(\vec{r}) - \Sigma_{gg'}(\vec{r})$$

Pour la formulation à deux groupes d'énergie, les opérateurs A et B de (2.6) sont des matrices 2x2 respectivement égales à :

$$A = \begin{bmatrix} \nabla \cdot D_1(\vec{r}) \nabla - \Sigma_{r1}(\vec{r}) & 0 \\ \Sigma_{1 \rightarrow 2}(\vec{r}) & \nabla \cdot D_2(\vec{r}) \nabla - \Sigma_{r2}(\vec{r}) \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

$$B = \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{f1}(\vec{r}) & \nu \Sigma_{f2}(\vec{r}) \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

2.1.2.4 Équation de la diffusion monocinétique

Dans la théorie à un groupe, on traite les neutrons en les regroupant sans distinguer leurs énergies cinétiques. On raisonne donc comme s'ils étaient monocinétiques. Cependant, cette remarque ne doit pas laisser penser que les résultats que l'on obtient sont purement académiques. On montre, au contraire, qu'à condition

d'y introduire des paramètres correctement moyennés en énergie, la théorie à un groupe permet d'obtenir de façon relativement précise la condition critique et la distribution spatiale des neutrons dans un réacteur^[6].

Par la suite, dans ce chapitre nous n'allons considérer que la formulation monocinétique de l'équation de la diffusion, car cela nous permettra d'introduire d'une façon simple le concept de discrétisation. Par ailleurs, la résolution de (2.5) fait en réalité apparaître plusieurs équations monocinétiques qui ont toutes la forme suivante :

$$-\nabla \cdot D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) = S(\vec{r}) \quad (2.10)$$

avec pour le cas à un groupe :

$$S(\vec{r}) = \frac{1}{K_{\text{eff}}} \nu \Sigma_f(\vec{r}) \Phi(\vec{r})$$

Les opérateurs A et B de l'équation (2.6) seront donnés par :

$$A = \nabla \cdot D(\vec{r}) \nabla - \Sigma_r(\vec{r}) \quad (2.11)$$

$$B = \nu \Sigma_f(\vec{r})$$

Remarque : pour le cas ($G = 1$), on a $\Sigma_r = \Sigma_a$.

Il est utile de rappeler que l'équation (2.10) est basé sur la loi de Fick qui permet d'exprimer le courant neutronique $\vec{J}(\vec{r})$ en fonction du gradient du flux par la relation :

$$\vec{J}(\vec{r}) = -D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \quad (2.12)$$

La loi de Fick n'est bien entendu qu'une approximation. Elle est tout à fait similaire à la loi de conduction de la chaleur et exprime un fait très intuitif : les neutrons, en moyenne, vont des zones où ils sont nombreux vers celles où ils le sont moins, à un rythme d'autant plus intense que les différences sont grandes^[6].

Si nous examinons attentivement l'équation (2.10), nous remarquerons qu'elle n'a de sens que si $D(\vec{r})$, $\nabla\Phi(\vec{r})$ et $\Phi(\vec{r})$ sont dérivables en espace. Ces conditions seront observées si nous imposons certaines exigences de continuité à la solution de l'équation (2.10).

1. Le flux neutronique $\Phi(\vec{r})$ doit être une distribution continue de l'espace.
2. Soit un élément de surface dS de position et d'orientation (normale unitaire \vec{n}) arbitraires à l'intérieur du réacteur. Le courant net $\vec{J}(\vec{r}) \cdot \vec{n}dS$ traversant dS doit être une fonction continue de l'espace.

Ces conditions seront utiles pour coupler la solution de l'équation (2.10) aux interfaces entre régions physiques différentes. Leur signification physique est la suivante :

1. La densité de population des neutrons est continue en espace.
2. Le nombre net de neutrons traversant toute surface imaginaire est conservé.

La seconde condition a pour conséquence que le gradient du flux $\nabla\Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}$ est discontinu sur toute interface où le coefficient de diffusion est discontinu. De plus, le courant net $\vec{J}(\vec{r}) \cdot \vec{n}$ pourra présenter des discontinuités ponctuelles sur

l'intersection de deux ou plusieurs interfaces séparant des milieux de coefficients de diffusion différents^[9]. Cela soulève donc le problème des points singuliers qui est dû à la formulation mathématique de l'équation de la diffusion et n'a pas de signification physique^[9].

En plus de ces conditions aux interfaces, la résolution de l'équation (2.10) demande la définition des conditions frontières. Soit V le domaine sur lequel sont définies les propriétés nucléaire de l'équation (2.10). Ce domaine peut correspondre au réacteur entier ou à une partie de celui-ci si certaines symétries géométriques existent. La frontière ∂V de ce domaine est ensuite divisée en éléments de frontière ∂V^e , et une condition frontière est appliquée sur chacun d'eux. En théorie de la diffusion, deux types de conditions frontières peuvent être utilisées :

1. **Condition frontière de flux nul** (condition essentielle ou forcée) :

Dans ce cas, nous supposons que la population neutronique s'annule sur ∂V_0 . Cette condition ne sera physiquement réalisée que si la surface ∂V_0 est précédée d'un milieu fortement absorbant. La condition de flux nul est cependant fréquemment utilisée en raison de sa simplicité et par ce qu'elle demeure une excellente approximation pour traiter les réacteurs pourvus d'un large réflecteur de neutron (la condition est alors appliquée à l'extérieur du réflecteur). On aura :

$$\Phi(\vec{r}) = 0 ; \vec{r} \in \partial V_0 \quad (2.13)$$

2. Condition frontière en albédo (condition naturelle) :

Cette condition, plus générale que la précédente, permet de bien prendre en compte la physique du phénomène. L'albédo $\beta(\vec{r})$ est défini comme le rapport du courant entrant de ∂V_β sur le courant sortant. La condition frontière consiste alors à forcer l'albédo à être égal à une valeur pré-déterminée. Nous pourrions donc représenter autant de conditions frontières différentes qu'il y a de valeur de $\beta(\vec{r})$ supérieures à zéro. Les deux possibilités les plus fréquentes sont les suivantes :

$\beta(\vec{r}) = 0$ condition frontière de courant entrant nul. C'est la condition physiquement correcte pour représenter une frontière externe de réacteur.

$\beta(\vec{r}) = 1$ condition frontière de symétrie. Cette condition est utile lorsque des symétries géométriques et matérielles du réacteur permettent de ne calculer qu'une partie de celui-ci. Le courant net sera alors nul sur les plans de symétrie.

En utilisant la loi de Fick (2.12) ainsi qu'une approximation P-1 du flux angulaire de surface, il est possible d'obtenir l'expression suivante de l'albédo^[9] :

$$\beta(\vec{r}) = \frac{J_-(\vec{r})}{J_+(\vec{r})} = \frac{\Phi(\vec{r}) + 2 D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r})}{\Phi(\vec{r}) - 2 D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r})} ; \vec{r} \in \partial V_\beta \quad (2.14)$$

où $J_-(\vec{r})$ et $J_+(\vec{r})$ représentent respectivement le courant entrant et le courant sortant au point \vec{r} de la frontière ∂V_β . $\vec{n}(\vec{r})$ est la normale unitaire sortante au point \vec{r} de cette frontière. En explicitant le flux, nous obtenons l'expression mathématique

de la condition frontière en albédo :

$$D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r}) + \frac{1 - \beta(\vec{r})}{2(1 + \beta(\vec{r}))} \Phi(\vec{r}) = 0 ; \vec{r} \in \partial V_{\beta} \quad (2.15)$$

2.2 DISCRÉTISATION EN ÉLÉMENTS FINIS DE LAGRANGE

2.2.1 Introduction

La méthode aux éléments finis permet la résolution numérique d'équations différentielles partielles en utilisant la formulation variationnelle de ces équations. Cette méthode a été développée au début des années 1950 par des ingénieurs civils, pour résoudre des problèmes de structures. Plus tard, on l'introduisit en mécanique des continus (élasticité, plasticité, mécanique des fluides, etc ...), et dans certaines branches de la physique^[10]. L'utilisation de la méthode aux éléments finis de Lagrange en physique des réacteurs a été rapportée en 1971, et fut suivie par deux publications décrivant l'ensemble de ces travaux. La première, écrite par Semenza, Lewis et Rossow^[2] décrit une procédure d'ordre faible utilisant des polynômes d'interpolation linéaires définis sur des éléments triangulaires. La seconde publication, écrite par Kaper, Leaf et Linderman^[3] décrit une procédure d'ordre variable utilisant des polynômes d'interpolation de Lagrange définis sur des éléments triangulaires.

La méthode aux éléments finis présente certains avantages qui la distinguent des approches concurrentes. Son ordre de convergence variable lui permet de s'adapter au degré d'hétérogénéité présent dans le réacteur. Comme elle utilise

un principe variationnel, la solution approximative obtenue est une fonction continue de l'espace connue en tous points. La nature polynomiale de cette solution rend très facile le calcul de produits bilinéaires du flux ainsi que l'utilisation de stratégies itératives évoluées.

2.2.2 La fonctionnelle de diffusion

Nous allons utiliser une formulation variationnelle permettant d'obtenir une solution de l'équation (2.10) à l'intérieur d'un espace de fonctions de représentation. L'espace de Sobolev est le plus général qu'il soit possible d'utiliser. Il s'agit de l'espace vectoriel des fonctions $f(\vec{r})$ définies sur le volume V (correspondant au volume du réacteur) et bornées au sens de Sobolev :

$$H^1[V] = \left\{ f(\vec{r}) ; f(\vec{r}) \in L^2[V] \text{ et } \nabla f(\vec{r}) \in L^2[V] \right\}$$

où $L^2[V]$ est l'ensemble des fonctions définies sur le domaine V dont la norme quadratique est bornée :

$$L^2[V] = \left\{ f(\vec{r}) ; \left[\int_V d^3r (f(\vec{r}))^2 \right]^{1/2} < \infty \right\}$$

Les éléments de l'espace de Sobolev $H^1[V]$ sont des fonctions continues sur V dont les dérivées possèdent des exigences de continuité les moins restrictives possibles. C'est en ce sens qu'une formulation variationnelle est appelée "formulation faible".

Il est également possible de travailler avec un espace de fonctions de représentation plus restreint que $H^1[V]$ lorsque l'on connaît à priori certaines conditions

supplémentaires de la solution recherchée. Nous avons adopté ce point de vue. Nous nous limiterons donc à un espace vectoriel $H_0^1[V]$ composé des fonctions $f(\vec{r})$ éléments de l'espace de Sobolev $H^1[V]$ et satisfaisant certaines conditions supplémentaires.

$$H_0^1[V] = \left\{ f(\vec{r}) ; f(\vec{r}) \in H^1[V] \cap D[V] \right\}$$

où $D[V]$: ensemble des fonctions s'annulant sur ∂V_0 .

La formulation variationnelle permet la résolution de l'équation (2.10) par la recherche d'un point stationnaire d'une fonctionnelle correspondante. Considérons la fonctionnelle suivante, définie sur $H_0^1[V]$:

$$\begin{aligned} F\{\Phi(\vec{r})\} &= \frac{1}{2} \int_V d^3r \{ D(\vec{r}) [\nabla\Phi(\vec{r}) \cdot \nabla\Phi(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) [\Phi(\vec{r})]^2 - 2 \Phi(\vec{r}) S(\vec{r})] \} \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\partial V_\beta} d^2r \frac{1 - \beta(\vec{r})}{2(1 + \beta(\vec{r}))} [\Phi(\vec{r})]^2 \end{aligned} \quad (2.16)$$

Un point stationnaire de cette équation est défini par la relation :

$$\delta_{\delta\Phi} F[\Phi(\vec{r})] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{d}{d\epsilon} F[\Phi(\vec{r}) + \epsilon \delta\Phi(\vec{r})] \right\} = 0 \quad (2.17)$$

où $\delta\Phi(\vec{r})$ est un élément arbitraire de l'espace vectoriel $H_0^1[V]$. On obtient donc :

$$\begin{aligned} &\int_V d^3r \{ D(\vec{r}) [\nabla\delta\Phi(\vec{r}) \cdot \nabla\Phi(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) \delta\Phi(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) - \delta\Phi(\vec{r}) S(\vec{r})] \} \\ &+ \int_{\partial V_\beta} d^2r \frac{1 - \beta(\vec{r})}{2(1 + \beta(\vec{r}))} \delta\Phi(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) = 0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Divisons le volume total V du réacteur en sous-volumes ($V^e; e = 1, E$) sur lesquels sont définis des coefficients de diffusion constants ($D^e; e = 1, E$). Définissons

de plus ($\partial V^e; e = 1, E$) les surfaces entourant chaque sous-volume et $\vec{n}_e(\vec{r})$ les vecteurs normaux unitaires pointant vers l'extérieur de ∂V^e au point \vec{r} .

Appliquons le théorème de divergence de Gauss sur le sous-volume V^e :

$$\begin{aligned} \int_{V^e} d^3r D(\vec{r}) [\nabla \delta\Phi(\vec{r})] \cdot \nabla \Phi(\vec{r}) &= - \int_{V^e} d^3r \delta\Phi(\vec{r}) \nabla \cdot D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \\ + \int_{\partial V^e} d^2r \delta\Phi(\vec{r}) D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}_e(\vec{r}) ; e = 1, E \end{aligned} \quad (2.19)$$

Séparons chaque surface ∂V^e en trois parties :

$$\partial V^e = \partial W^e + \partial U^e + \partial T^e ;$$

$$\partial W^e = \text{partie de } \partial V^e \text{ interne au domaine } V ;$$

$$\partial U^e = \text{partie de } \partial V^e \text{ appartenant à } \partial V_\beta ;$$

$$\partial T^e = \text{partie de } \partial V^e \text{ appartenant à } \partial V_0.$$

Substituons l'équation (2.19) dans (2.18) :

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^E \left\{ \int_{V^e} d^3r \delta\Phi(\vec{r}) [-\nabla \cdot D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) - S(\vec{r})] + \right. \\ \left. \int_{\partial W^e} d^2r \delta\Phi(\vec{r}) D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}_e(\vec{r}) + \right. \\ \left. \int_{\partial U^e} d^2r \delta\Phi(\vec{r}) \left[D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}_e(\vec{r}) + \frac{1}{2} \frac{1 - \beta(\vec{r})}{1 + \beta(\vec{r})} \Phi(\vec{r}) \right] \right\} = 0 \end{aligned}$$

L'intégrale sur ∂T^e est nulle puisque $\delta\Phi(\vec{r})$ est nulle sur ∂V_0 .

Donc $\Phi(\vec{r})$ est un point stationnaire de la fonctionnelle (2.16) par rapport à une variation arbitraire $\delta\Phi(\vec{r})$ si et seulement si :

$$-\nabla \cdot D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) = S(\vec{r}) ; \vec{r} \in V \quad (2.20)$$

$$\sum_{e=1}^E \delta_e(\vec{r}) D^e \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}_e(\vec{r}) = 0 \quad (2.21)$$

avec $\delta_e(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{r} \in \partial W^e \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

$$D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \frac{1 - \beta(\vec{r})}{1 + \beta(\vec{r})} \Phi(\vec{r}) = 0 ; \vec{r} \in \partial V_\beta \quad (2.22)$$

Nous avons ainsi obtenu les équations d'Euler de la fonctionnelle (2.16). La condition (2.20) n'est autre que l'équation de la diffusion (2.10). L'équation (2.21) est la condition de Weierstrass-Erdmann de la fonctionnelle et correspond à la condition de continuité du courant aux points non singuliers. Finalement, l'équation (2.22) est la condition frontière naturelle. En conclusion, une fonction $\Phi(\vec{r})$ correspondant à un point stationnaire de la fonctionnelle (2.16) respectera la continuité du courant et les conditions frontières naturelles en plus de satisfaire l'équation de la diffusion.

Supposons maintenant que l'on trouve un point stationnaire de la fonctionnelle (2.16) à l'intérieur d'un sous-ensemble de $H_0^1[V]$. La valeur obtenue de $\Phi(\vec{r})$ à l'intérieur du domaine V ne serait pas la solution exacte, mais la meilleure solution approximative (au sens variationnel) de l'équation de la diffusion (2.10) qui soit élément de ce sous-ensemble. C'est la situation qui se produit lorsque l'on contraint $\Phi(\vec{r})$ et $\delta\Phi(\vec{r})$ à être exprimés par des combinaisons linéaires d'un ensemble fini de fonctions de représentation $\{\psi_i(\vec{r}) ; i = 1, N\}$ (où N représente le nombre de nœuds) satisfaisant les deux conditions suivantes :

1. Les fonctions $\psi_i(\vec{r})$ sont éléments de $H_0^1[V]$;

2. Les fonctions $\psi_i(\vec{r})$ sont linéairement indépendantes entre elles.

On aura alors :

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \varphi_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.23)$$

$$\delta\Phi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta\varphi_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.24)$$

Pour un ensemble fini de fonctions de forme choisies à priori, la meilleure solution $\Phi(\vec{r})$ sera donnée par l'ensemble des "coefficients variationnels" $\{\varphi_i ; i = 1, N\}$ correspondant à un point stationnaire de la fonctionnelle (2.16). Substituons les équations (2.23) et (2.24) dans (2.18) :

$$\sum_{i=1}^N \varphi_i \left\{ \int_V d^3r \left(D(\vec{r}) \nabla\psi_i(\vec{r}) \nabla\psi_j(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \right) + \int_{\partial V_\beta} d^2r \frac{1 - \beta(\vec{r})}{2(1 + \beta(\vec{r}))} \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \right\} = \int_V d^3r \psi_j(\vec{r}) S(\vec{r}) \quad (2.25)$$

$j = 1, N$

On a obtenu un système linéaire de N équations en N inconnues dont la solution nous donne les coefficients variationnels recherchés.

La méthode des éléments finis est basée sur la formulation variationnelle de l'équation de la diffusion et se caractérise par le choix de la base de représentation $\{\psi_i(\vec{r}) ; i = 1, N\}$. Dans notre étude nous avons adopté le choix de deux types d'éléments de base. La première approche, consiste à diviser l'hexagone en six triangles équilatéraux et de prendre comme élément de base : le triangle. C'est d'ailleurs la voie choisie par plusieurs écoles (Française, Suisse, ...). Quant à la deuxième, nous avons pris comme élément de base l'hexagone au complet. Rappelons que le

choix de l'ordre et du type de fonctions de représentation détermine la nature de la méthode utilisée. Seules des contraintes liées soit à des considérations géométriques, physiques voire mathématiques peuvent dans certains cas imposer l'ordre et la nature des fonctions de représentation. Ce fut notre cas, car l'algorithme ADI implanté dans TRIVAC-3, associé à une géométrie hexagonale, ne permet pas beaucoup de flexibilité quant à la résolution de l'équation de la diffusion par la méthode d'éléments finis d'ordre élevé. En effet, lors de notre analyse du problème nous avons constaté qu'il était difficile de trouver un algorithme de numérotation, à la fois simple et compatible avec l'approche ADI, permettant de choisir un ordre supérieur à 1. Notons que cette difficulté n'a pas été rencontrée dans le cas cartésien qui s'adapte très bien avec un algorithme ADI. Nous avons donc retenu pour notre approche des polynômes linéaires de Lagrange, dans ce cas les coefficients variationnels correspondent à des valeurs du flux évalué aux sommets des éléments considérés.

Étant donné que toutes les propriétés nucléaires apparaissant dans l'équation (2.25) sont constantes par élément, il sera possible d'obtenir analytiquement les intégrales apparaissant dans cette équation. Néanmoins, pour des raisons de compatibilité avec la méthode ADI (nécessité d'avoir une matrice de masse diagonale) nous allons aussi utiliser une quadrature de type Gauss-Lobatto dans le cas du module Trivac. L'équation (2.25) nous permet d'écrire sur chaque élément e :

$$\int_{V^e} d^3r D(\vec{r}) \nabla \psi_i(\vec{r}) \nabla \psi_j(\vec{r}) = D^e \int_{V^e} d^3r \nabla \psi_i(\vec{r}) \nabla \psi_j(\vec{r})$$

$$\int_{V^e} d^3r \Sigma_r(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) = \Sigma_r^e \int_{V^e} d^3r \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r})$$

$$\int_{\partial V^e} d^2r \frac{1}{2} \frac{1 - \beta(\vec{r})}{1 + \beta(\vec{r})} \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) = \sum_{c=1}^{N_c} F_c^e \int_{\partial V^e} d^2r \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r})$$

où N_c représente le nombre de côtés de l'élément considéré et F_c^e défini par :

$$F_c^e = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{1 - \beta_c^e}{1 + \beta_c^e} & \text{si le côté } c \text{ de l'élément } e \text{ possède} \\ & \text{une condition frontière en albédo} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On remarque que l'on doit évaluer trois types différents d'intégration ayant la forme de produits bilinéaires des fonctions de représentation :

$$\langle \nabla \psi_i, \nabla \psi_j \rangle = \int_{V^e} d^3r \nabla \psi_i(\vec{r}) \nabla \psi_j(\vec{r}) \quad (2.26)$$

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \int_{V^e} d^3r \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \quad (2.27)$$

$$\{\psi_i, \psi_j\} = \int_{\partial V^e} d^2r \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \quad (2.28)$$

Dans le cas monocinétique on a vu que :

$$S(\vec{r}) = \frac{1}{K_{\text{eff}}} \nu \Sigma_f(\vec{r}) \Phi(\vec{r})$$

d'où l'évaluation du terme de droite de l'équation (2.25) revient au calcul d'un produit bilinéaire identique à l'équation (2.27).

Pour le terme de surface, si on considère le cas bidimensionnel par exemple, son évaluation sera calculée pour chaque côté c à partir de (2.28) et on aura :

$$\{\psi_i, \psi_j\}_c = R_{Lc} \quad (2.29)$$

où R_{Lc} est la matrice de masse d'un élément linéaire. Nous verrons plus loin le calcul explicite de cette matrice.

2.2.3 Élément fini triangulaire

Ce type d'éléments est couramment utilisé car il permet d'approximer d'une façon très satisfaisante les géométries les plus complexes. La solution recherchée sur cet élément pour un cas linéaire à deux dimensions est donnée par^[11] :

$$\Phi(x, y) = c_1 + c_2 x + c_3 y \quad (2.30)$$

L'équation (2.30) montre que le flux à l'intérieur d'un élément est linéaire en x et y , notons aussi que $\{1, x, y\}$ sont linéairement indépendants et forment une base complète.

Dans l'équation (2.23), les termes φ_i représentent les valeurs de Φ au point (x_i, y_i) .

Il est évident que l'approximation (2.30) doit satisfaire les conditions suivantes :

$$\Phi(x_i, y_i) = \varphi_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.31)$$

où $\{(x_i, y_i) ; i = 1, 2, 3\}$ sont les coordonnées des trois sommets du triangle. Cherchons maintenant à exprimer les trois constantes c_i de l'équation (2.30) en fonction de φ_i de l'équation (2.31) :

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \Phi(x_1, y_1) = c_1 + c_2 x_1 + c_3 y_1 \\ \varphi_2 &= \Phi(x_2, y_2) = c_1 + c_2 x_2 + c_3 y_2 \\ \varphi_3 &= \Phi(x_3, y_3) = c_1 + c_2 x_3 + c_3 y_3 \end{aligned} \quad (2.32)$$

Sous forme matricielle nous avons :

$$\begin{Bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{Bmatrix} \quad (2.33)$$

En résolvant ce système on obtient :

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2A_e} [\varphi_1(x_2y_3 - x_3y_2) + \varphi_2(x_3y_1 - x_1y_3) + \varphi_3(x_1y_2 - x_2y_1)] \\ c_2 &= \frac{1}{2A_e} [\varphi_1(y_2 - y_3) + \varphi_2(y_3 - y_1) + \varphi_3(y_1 - y_2)] \\ c_3 &= \frac{1}{2A_e} [\varphi_1(x_3 - x_2) + \varphi_2(x_1 - x_3) + \varphi_3(x_2 - x_1)] \end{aligned} \quad (2.34)$$

où A_e représente la surface du triangle :

$$\begin{aligned} 2A_e &= \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} \\ &= (x_2y_3 - x_3y_2) + (x_3y_1 - x_1y_3) + (x_1y_2 - x_2y_1) \end{aligned} \quad (2.35)$$

En remplaçant les constantes c_i par leurs valeurs dans l'équation (2.30) on obtient :

$$\begin{aligned} \Phi(x, y) &= \varphi_1 \psi_1(x, y) + \varphi_2 \psi_2(x, y) + \varphi_3 \psi_3(x, y) \\ &= \sum_{i=1}^3 \varphi_i \psi_i^{(e)} \end{aligned} \quad (2.36)$$

où les $\psi_i^{(e)}$ sont des fonctions d'interpolation linéaires pour un élément triangulaire :

$$\psi_i^{(e)} = \frac{1}{2A_e} (\alpha_i + \beta_i x + \gamma_i y) \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.37)$$

et α_i, β_i et γ_i sont des constantes données par :

$$\left. \begin{aligned} \alpha_i &= x_j y_k - x_k y_j \\ \beta_i &= y_j - y_k \\ \gamma_i &= x_k - x_j \end{aligned} \right\} \quad i \neq j \neq k \quad (2.38)$$

avec i, j et k permutant dans un ordre naturel. Par exemple si on veut calculer α_2 , on prend $i = 2, j = 3$ et $k = 1$, on a alors :

$$\alpha_2 = x_3 y_1 - x_1 y_3$$

La figure (2.2) montre l'allure des fonctions de représentation linéaires $\psi_i^{(e)}$, notons aussi que les ψ_i ont certaines propriétés :

$$\begin{aligned} \psi_i(x_j, y_j) &= \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3 \\ \sum_{i=1}^3 \psi_i &= 1 \end{aligned}$$

Prenons par exemple le triangle équilatéral de côté a de la figure (2.1) et calculons les fonctions ψ_i , on obtient :

$$\begin{aligned} \alpha_1 = x_2 y_3 - x_3 y_2 &= \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} & \beta_1 = y_2 - y_3 &= -\frac{a \sqrt{3}}{2} & \gamma_1 = x_3 - x_2 &= -\frac{a}{2} \\ \alpha_2 = x_3 y_1 - x_1 y_3 &= \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} & \beta_2 = y_3 - y_1 &= \frac{a \sqrt{3}}{2} & \gamma_2 = x_1 - x_3 &= -\frac{a}{2} \\ \alpha_3 = x_1 y_2 - x_2 y_1 &= 0 & \beta_3 = y_1 - y_2 &= 0 & \gamma_3 = x_2 - x_1 &= a \end{aligned}$$

Sachant que $A_e = a^2 \sqrt{3}/4$, on a :

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{2}{a^2 \sqrt{3}} \left[\frac{a^2 \sqrt{3}}{4} - \frac{a \sqrt{3}}{2} x - \frac{a}{2} y \right] \\ \psi_2 &= \frac{2}{a^2 \sqrt{3}} \left[\frac{a^2 \sqrt{3}}{4} + \frac{a \sqrt{3}}{2} x - \frac{a}{2} y \right] \\ \psi_3 &= \frac{2}{a^2 \sqrt{3}} \left[ay \right] \end{aligned} \tag{2.39}$$

Posons :

$$\psi(\vec{r}) = \begin{Bmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \\ \psi_3(\vec{r}) \end{Bmatrix} \quad \text{et} \quad \nabla \psi(\vec{r}) = \begin{Bmatrix} \nabla \psi_1(\vec{r}) \\ \nabla \psi_2(\vec{r}) \\ \nabla \psi_3(\vec{r}) \end{Bmatrix}$$

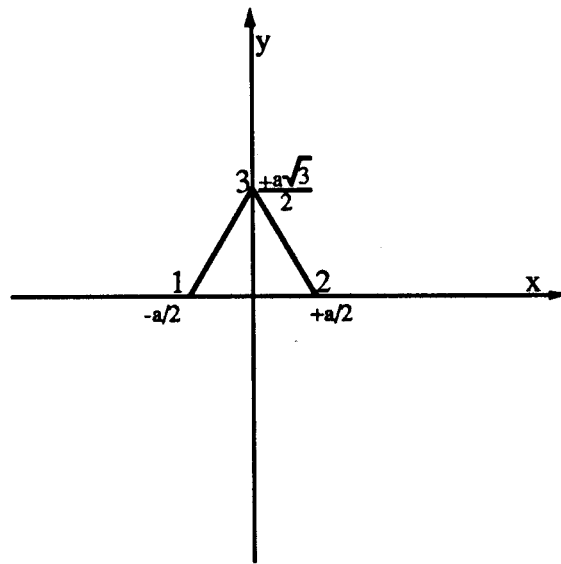


Figure 2.1: Élément fini triangulaire de base

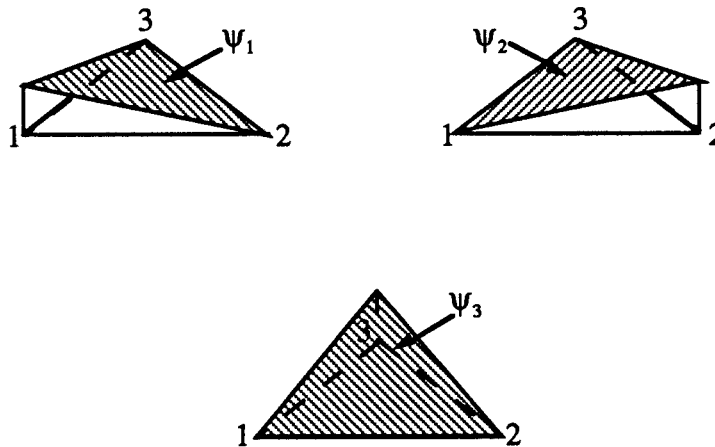


Figure 2.2: Fonctions d'interpolation linéaires pour un élément fini triangulaire

Notons Q la matrice de rigidité et R la matrice de masse, l'évaluation de ces

deux matrices peut être faite à partir des définitions suivantes :

$$R = \int_{V^e} dv \psi(\vec{r}) \otimes \psi(\vec{r}) \quad (2.40)$$

$$Q = \int_{V^e} dv \nabla \psi(\vec{r}) \otimes \nabla \psi(\vec{r}) \quad (2.41)$$

où \otimes représente le produit tensoriel.

Comme nous l'avons déjà mentionné l'évaluation de ces intégrales sera faite analytiquement et par une quadrature de Gauss-Lobatto. Nous allons considérer le cas à deux dimensions sachant que le passage à trois dimensions ne pose pas de difficulté supplémentaire et sera discuté ultérieurement.

1. Calcul analytique :

En substituant (2.39) dans (2.40) et (2.41) et en intégrant sur l'élément e de la figure (2.1) on a :

$$R = \frac{a^2 \sqrt{3}}{48} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$Q = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

2. Quadrature de Gauss-Lobatto :

La quadrature de Gauss-Lobatto, comme toute quadrature remplace l'intégrale d'une fonction polynomiale par une combinaison linéaire de ses valeurs à des points pré-fixés. Soit $f(x, y)$ une fonction polynomiale on peut donc écrire :

$$\int \int_V f(x, y) dx dy = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i, y_i)$$

où les points (x_i, y_i) représentent les coordonnées des nœuds de l'élément et n le nombre de nœuds par élément. Les coefficients w_i sont dans notre cas égaux puisque le triangle est équilatéral, ce qui nous permet d'écrire :

$$\int \int_V f(x, y) dx dy = w \sum_{i=1}^n f(x_i, y_i)$$

et en posant $f(x, y) \equiv 1$ on en déduit que dans le cas d'un triangle nous avons :

$$w = \frac{1}{3} \int \int_{V^e} dx dy = \frac{A_e}{3}$$

Les matrices de masse et de rigidité dans ce cas seront calculées à l'aide de :

$$R = \frac{A_e}{3} \sum_{i=1}^3 \psi(x_i, y_i) \otimes \psi(x_i, y_i) \quad (2.42)$$

$$Q = \frac{A_e}{3} \sum_{i=1}^3 \nabla \psi(x_i, y_i) \otimes \nabla \psi(x_i, y_i) \quad (2.43)$$

À l'aide de la figure (2.1) et des équations (2.39) nous pouvons établir que :

$$R = \frac{a^2 \sqrt{3}}{12} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$Q = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

On notera que la matrice de masse ainsi obtenue est diagonale.

2.2.4 Élément fini hexagonal

Ce type d'éléments n'existe presque pas dans la littérature étant donné la grande difficulté de construction des fonctions de représentation avec l'approche dite "clas-

sique". Wachspress^[12, 13, 14] a proposé une approche bien particulière pour le traitement d'éléments finis de formes complexes et inusitées. Il propose, des fonctions de base de type rationnel. Le terme rationnel a deux sens :

- Les fonctions de représentation sont rationnelles (sous forme de rapport de polynômes).
- Leur construction à partir des propriétés géométriques des éléments est faite d'une manière rationnelle.

Dans un souci de simplicité nous allons considérer un espace à deux dimensions uniquement. Soit un polygone ayant n côtés et soit $\psi_i(x, y)$ la fonction de représentation associée au nœud i intersection des côtés \bar{i} et $\overline{i+1}$. Cette fonction a les propriétés suivantes :

1. elle est continue sur tout le polygone.
2. normalisée à l'unité au nœud i , (c'est-à-dire $\psi_i(x_i, y_i) = 1$).
3. $\psi_i(x, y) = 0$ pour $(x, y) \in \bar{j}$ et $\bar{j} \neq \bar{i}, \overline{i+1}$.
4. $\psi_i(x, y) > 0$ pour (x, y) interne au polygone.
5. linéaire sur les deux côtés adjacents au nœud i (c'est-à-dire les côtés $\bar{j} = \bar{i}, \overline{i+1}$).
6. $\sum_{i=1}^n \psi_i(x, y) = 1$ pour (x, y) appartenant au polygone.

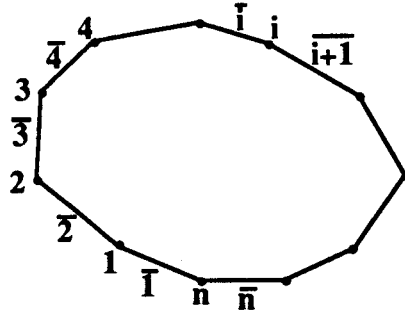


Figure 2.3: Exemple d'élément fini rationnel

Par exemple, il est possible de construire des fonctions d'interpolation de Lagrange pour un polygone bidimensionnel avec des côtés droits tel que présenté à la figure (2.3) avec des fonctions linéaires sur chaque côté \bar{i} :

$$f_{\bar{i}}(x, y) = a_i + b_i x + c_i y$$

qui définit l'équation de la ligne correspondant au côté \bar{i} tel que :

$$f_{\bar{i}}(x, y) = 0 \quad \bar{1} \leq \bar{i} \leq \bar{n}$$

Wachspress a montré que la forme générale de la fonction d'interpolation de Lagrange correspondant au nœud i est donnée par :

$$\psi_i(x, y) = K_i \frac{f_{\bar{i}+2}(x, y) f_{\bar{i}+3}(x, y) \cdots \cdots f_{\bar{i}-1}(x, y)}{g_1(x, y) g_2(x, y) \cdots \cdots g_{n-3}(x, y)} \quad (2.44)$$

où les constantes K_i sont choisies de sorte que :

$$\psi_i(x_j, y_j) = \delta_{ij} \quad 1 \leq i, j \leq n$$

et les fonctions $g_i(x, y)$ sont linéaires choisies tel que :

- $\frac{f_{\bar{i}+2}}{g_1}, \frac{f_{\bar{i}+3}}{g_2}, \dots$ soient constantes sur le côté \bar{i} du polygone, et
- $\frac{f_{\bar{i}+3}}{g_1}, \frac{f_{\bar{i}+4}}{g_2}, \dots$ soient constantes sur le côté $\overline{i+1}$ du polygone.

d'où :

$$\begin{aligned}\psi_i(x, y) &= C_1 f_{\bar{i}-1}(x, y) && \text{sur } \bar{i}. \\ &= C_2 f_{\bar{i}+2}(x, y) && \text{sur } \overline{i+1}.\end{aligned}$$

Il arrive parfois que la propriété 6 ne soit pas satisfaite surtout pour $n > 4$ (sauf cas particulier). Dans ce cas si on note $\psi'_i(x, y)$ la fonction au nœud i donnée par (2.44) nous pouvons la normaliser de telle sorte que :

$$\psi_i(x, y) = \frac{\psi'_i(x, y)}{\sum_{i=1}^n \psi'_i(x, y)}$$

et enfin :

$$\sum_{i=1}^n \psi_i(x, y) = 1$$

Considérons l'hexagone de la figure (2.4) et évaluons les fonctions $\psi'_i(x, y)$ on obtient alors :

$$\psi'_1(x, y) = \frac{2(y + \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x+a))(y - \sqrt{3}(x+a))(y - \sqrt{3}a/2)}{18a^4}$$

$$\psi'_2(x, y) = \frac{-(y + \sqrt{3}(x+a))(y - \sqrt{3}(x+a))(y - \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x-a))}{18a^4}$$

$$\psi'_3(x, y) = \frac{-(y - \sqrt{3}(x+a))(y - \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x-a))(y - \sqrt{3}(x-a))}{18a^4}$$

$$\psi'_4(x, y) = \frac{2(y - \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x - a))(y - \sqrt{3}(x - a))(y + \sqrt{3}a/2)}{18a^4}$$

$$\psi'_5(x, y) = \frac{-(y + \sqrt{3}(x - a))(y - \sqrt{3}(x - a))(y + \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x + a))}{18a^4}$$

$$\psi'_6(x, y) = \frac{-(y - \sqrt{3}(x - a))(y + \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}(x + a))}{18a^4}$$

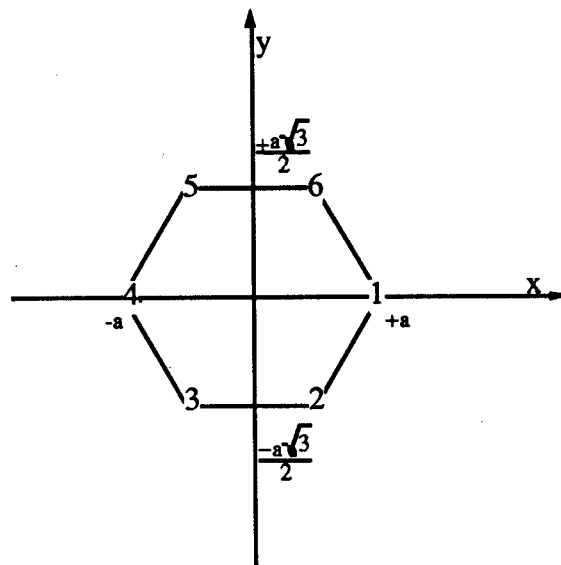


Figure 2.4: Élément fini hexagonal de base

On peut remarquer que ces fonctions vérifient les quatre premières propriétés et afin de satisfaire la dernière propriété il nous faut calculer $\sum_{i=1}^6 \psi'_i(x, y)$. On peut montrer que :

$$\sum_{i=1}^6 \psi'_i(x, y) = \frac{(3a^2 - x^2 - y^2)}{2a^2}$$

et enfin les fonctions $\psi_i(x, y)$ seront données par :

$$\psi_1(x, y) = \frac{2(y + \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}a/2)}{9a^2(3a^2 - x^2 - y^2)}$$

$$\psi_2(x, y) = \frac{-(y + \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x - a))}{9a^2(3a^2 - x^2 - y^2)}$$

$$\psi_3(x, y) = \frac{-(y - \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x - a))(y - \sqrt{3}(x - a))}{9a^2(3a^2 - x^2 - y^2)}$$

$$\psi_4(x, y) = \frac{2(y - \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x - a))(y - \sqrt{3}(x - a))(y + \sqrt{3}a/2)}{9a^2(3a^2 - x^2 - y^2)}$$

$$\psi_5(x, y) = \frac{-(y + \sqrt{3}(x - a))(y - \sqrt{3}(x - a))(y + \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x + a))}{9a^2(3a^2 - x^2 - y^2)}$$

$$\psi_6(x, y) = \frac{-(y - \sqrt{3}(x - a))(y + \sqrt{3}a/2)(y + \sqrt{3}(x + a))(y - \sqrt{3}(x + a))}{9a^2(3a^2 - x^2 - y^2)}$$

Aussi, il reste à montrer la propriété 5 concernant la linéarité des fonctions $\psi_i(x, y)$ sur les côtés adjacents au nœud i . Pour cela prenons par exemple le nœud 6 et montrons la linéarité de $\psi_6(x, y)$ sur le côté $\bar{1}$ et sur le côté $\bar{6}$, on a alors :

- sur le côté $\bar{1}$, on a $y = -\sqrt{3}(x - a)$:

$$\begin{aligned} (y - \sqrt{3}(x - a)) &= -2\sqrt{3}(x - a) \\ (y + \sqrt{3}a/2) &= -\sqrt{3}(x - 3a/2) \\ (y + \sqrt{3}(x + a)) &= 2\sqrt{3}a \\ (y - \sqrt{3}(x + a)) &= -2\sqrt{3}x \\ (3a^2 - x^2 - y^2) &= -4x(x - 3a/2) \end{aligned}$$

en reportant dans la définition de $\psi_6(x, y)$ et après simplification nous obtenons

alors :

$$[\psi_6(x, y)]_{\Gamma} = \frac{2(a-x)}{a}$$

- et sur le côté $\bar{6}$, on a $y = \sqrt{3}a/2$:

$$\begin{aligned} (y - \sqrt{3}(x-a)) &= -\sqrt{3}(x - 3a/2) \\ (y + \sqrt{3}a/2) &= \sqrt{3}a \\ (y + \sqrt{3}(x+a)) &= \sqrt{3}(x + 3a/2) \\ (y - \sqrt{3}(x+a)) &= -\sqrt{3}(x + a/2) \\ (3a^2 - x^2 - y^2) &= -(x - 3a/2)(x + 3a/2) \end{aligned}$$

d'où :

$$[\psi_6(x, y)]_{\bar{6}} = \frac{(x + a/2)}{a}$$

Ainsi nous avons démontré la propriété 5. La figure (2.5) montre l'allure des fonctions de représentation linéaires $\psi_i^{(e)}$.

Posons :

$$\psi(\vec{r}) = \begin{Bmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \\ \psi_3(\vec{r}) \\ \psi_4(\vec{r}) \\ \psi_5(\vec{r}) \\ \psi_6(\vec{r}) \end{Bmatrix} \quad \text{et} \quad \nabla\psi(\vec{r}) = \begin{Bmatrix} \nabla\psi_1(\vec{r}) \\ \nabla\psi_2(\vec{r}) \\ \nabla\psi_3(\vec{r}) \\ \nabla\psi_4(\vec{r}) \\ \nabla\psi_5(\vec{r}) \\ \nabla\psi_6(\vec{r}) \end{Bmatrix}$$

Comme pour le cas triangulaire, notons Q la matrice de rigidité et R la matrice de masse, définies par :

$$R = \int_{V^e} dv \psi(\vec{r}) \otimes \psi(\vec{r}) \quad (2.45)$$

$$Q = \int_{V^e} dv \nabla\psi(\vec{r}) \otimes \nabla\psi(\vec{r}) \quad (2.46)$$

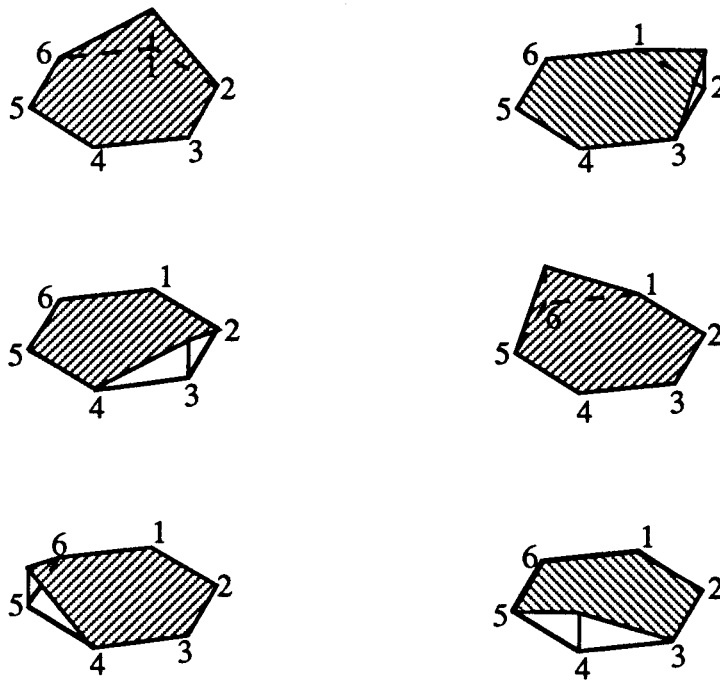


Figure 2.5: Fonctions d'interpolation linéaires pour un élément fini hexagonal

Là aussi l'évaluation de ces intégrales sera faite analytiquement et par une quadrature de Gauss-Lobatto.

1. Calcul analytique :

Étant donné que l'intégration analytique de R et Q est très difficile à évaluer, nous avons utilisé une intégration numérique avec 9 points de Gauss. En substituant les fonctions $\psi_i(x, y)$ dans (2.45) et (2.46) et en intégrant sur l'élément e de la figure (2.4) on a :

$$R = a^2 \begin{bmatrix} 0.15847 & 0.08658 & 0.03676 & 0.02787 & 0.03676 & 0.08658 \\ 0.08658 & 0.15847 & 0.08658 & 0.03676 & 0.02787 & 0.03676 \\ 0.03676 & 0.08658 & 0.15847 & 0.08658 & 0.03676 & 0.02787 \\ 0.02787 & 0.03676 & 0.08658 & 0.15847 & 0.08658 & 0.03676 \\ 0.03676 & 0.02787 & 0.03676 & 0.08658 & 0.15847 & 0.08658 \\ 0.08658 & 0.03676 & 0.02787 & 0.03676 & 0.08658 & 0.15847 \end{bmatrix}$$

$$Q = \begin{bmatrix} 0.76064 & -0.16198 & -0.16931 & -0.09806 & -0.16931 & -0.16198 \\ -0.16198 & 0.76064 & -0.16198 & -0.16931 & -0.09806 & -0.16931 \\ -0.16931 & -0.16198 & 0.76064 & -0.16198 & -0.16931 & -0.09806 \\ -0.09806 & -0.16931 & -0.16198 & 0.76064 & -0.16198 & -0.16931 \\ -0.16931 & -0.09806 & -0.16931 & -0.16198 & 0.76064 & -0.16198 \\ -0.16198 & -0.16931 & -0.09806 & -0.16931 & -0.16198 & 0.76064 \end{bmatrix}$$

2. Quadrature de Gauss-Lobatto :

De la même façon que pour le cas triangulaire nous devons évaluer les expressions suivantes :

$$R = w \sum_{i=1}^6 \psi(x_i, y_i) \otimes \psi(x_i, y_i) \quad (2.47)$$

$$Q = w \sum_{i=1}^6 \nabla \psi(x_i, y_i) \otimes \nabla \psi(x_i, y_i) \quad (2.48)$$

avec :

$$w = \frac{1}{6} \int \int_{V^e} dx dy = \frac{A_e}{6}$$

où $A_e = 3\sqrt{3}a^2/2$.

À l'aide de la figure (2.4) et des fonctions $\psi_i(x, y)$ nous pouvons établir que :

$$R = \frac{a^2\sqrt{3}}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$Q = \frac{5\sqrt{3}}{30} \begin{bmatrix} 10 & -6 & 1 & -6 & 1 & 0 \\ -6 & 10 & -6 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & -6 & 10 & 0 & 1 & -6 \\ -6 & 1 & 0 & 10 & -6 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -6 & 10 & -6 \\ 0 & 1 & -6 & 1 & -6 & 10 \end{bmatrix}$$

2.2.5 De deux à trois dimensions

Le passage de deux à trois dimensions peut être fait de deux façons :

- soit en faisant le calcul explicite et ce en prenant comme éléments de base des éléments finis tridimensionnels par exemple dans le cas du triangle : le prisme.
- l'autre méthode, consiste à considérer le produit tensoriel d'un élément linéaire avec les éléments bidimensionnels déjà étudiés.

Dans un cas comme dans l'autre les matrices de masse et de rigidité résultantes sont identiques. Notons aussi que seul le module Trivac de TRIVAC-3 permet des calculs à trois dimensions ; par conséquent et pour les raisons (utilisation de la méthode ADI) que nous avons évoqué auparavant là aussi le calcul de l'élément linéaire sera fait par une quadrature de Gauss-Lobatto.

Considérons l'élément linéaire de longueur h donné par la figure (2.6). Soit $\psi_1(z)$ et $\psi_2(z)$ les fonctions de représentation linéaires associées aux nœuds 1 et 2 respectivement.

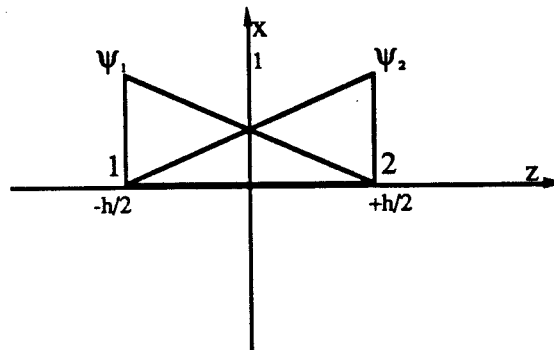


Figure 2.6: Élément fini linéaire de base

Ces fonctions sont données par :

$$\begin{aligned}\psi_1(z) &= \frac{1}{2} - \frac{z}{h} \\ \psi_2(z) &= \frac{1}{2} + \frac{z}{h}\end{aligned}$$

Comme pour le cas triangulaire et le cas hexagonal nous pouvons à l'aide du même raisonnement calculer les matrices de rigidité et de masse pour un élément linéaire en utilisant une quadrature de Gauss-Lobatto. Ainsi, on peut déduire que :

$$R = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$Q = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Désignons par R_{2D} , R_L , Q_{2D} et Q_L les matrices de masse et de rigidité obtenues pour les éléments bidimensionnels des paragraphes précédents et de l'élément linéaire que l'on vient d'étudier. Le calcul des matrices de masse et de rigidité pour le cas tridimensionnel sera donnée par les produits suivants :

$$R = R_{2D} \otimes R_L$$

$$Q = Q_{2D} \otimes R_L + R_{2D} \otimes Q_L$$

2.2.6 Assemblage des éléments

Après le choix des éléments et la discrétisation de l'équation de la diffusion sur ceux-ci, vient l'étape d'assemblage qui permet de reconstruire la solution sur le domaine initial. En effet, nous avons vu que la résolution de l'équation de la diffusion sur un élément génère un système d'équations linéaires dont le nombre d'inconnues est égale au nombre de nœuds contenus dans cet élément.

La technique d'assemblage fait appel à deux types de numérotation :

- la numérotation locale intrinsèque ou propre à l'élément,
- la numérotation globale propre au domaine d'étude considéré.

Lors du choix de l'élément et du type d'approximation qu'on désire lui associer, il est important de fixer d'une façon définitive la numérotation locale. Puis lors de l'assemblage faire le lien entre la numérotation globale et celle plus restreinte la locale. Prenons l'exemple des figures (2.7) et (2.8) ; dans la figure (2.7) le nœud 2 de l'élément de base correspond au nœud 18 dans la numérotation globale

de même que pour la figure (2.8) le nœud 6 de l'élément de base par exemple correspond au nœud 16 dans la numérotation globale. Nous pouvons donc établir une correspondance entre les deux numérotations soit $\overset{(e)}{\Lambda}$ la fonction qui associe à chaque nœud n_i^e de l'élément e son correspondant n_k dans la numérotation globale :

$$\overset{(e)}{\Lambda}: \{n_i^e\}_{i=1}^{N_e} \rightarrow \{n_k\}_{k=1}^K$$

où N_e représente le nombre de nœuds par élément et K le nombre total d'inconnues.

Étant donné que la correspondance est linéaire nous pouvons écrire pour un élément e fixé la relation suivante :

$$n_k = \sum_{i=1}^{N_e} \overset{(e)}{\Lambda}_i^k n_i^e$$

où $\overset{(e)}{\Lambda}_i^k$ est un tableau défini comme suit :

$$\overset{(e)}{\Lambda}_i^k = \begin{cases} 1 & \text{si le nœud } i \text{ de l'élément } e \text{ coïncide} \\ & \text{avec le nœud } k \text{ du maillage global} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Pour chaque élément e , les nombres $\overset{(e)}{\Lambda}_i^k$ constituent les éléments d'une matrice $\overset{(e)}{\Lambda}$ rectangulaire de dimension $(K \times N_e)$ appelée matrice Booléenne^[15].

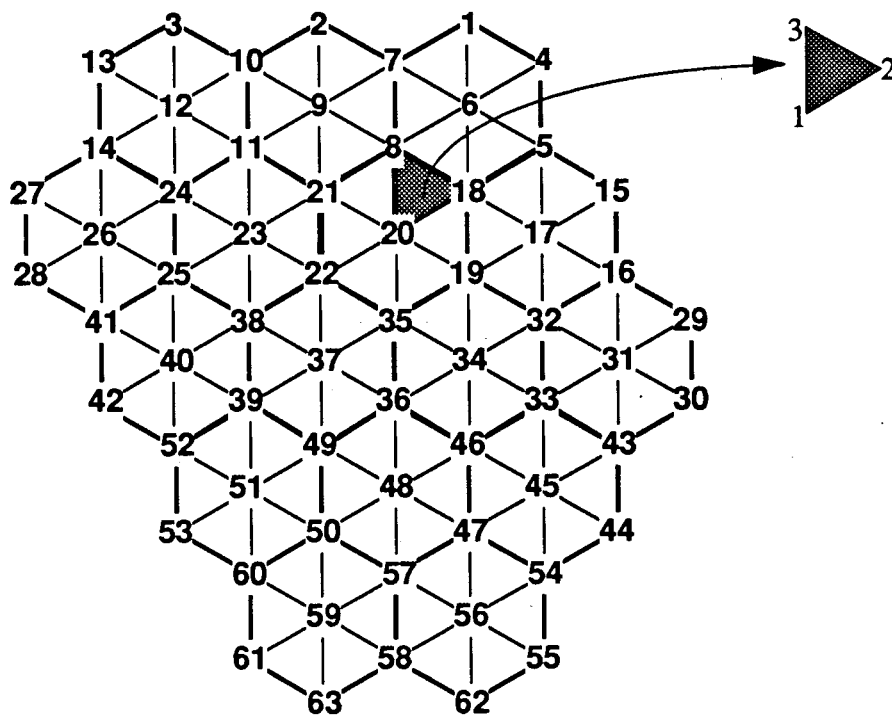


Figure 2.7: Exemple de correspondance entre la numérotation globale et locale (cas triangulaire)

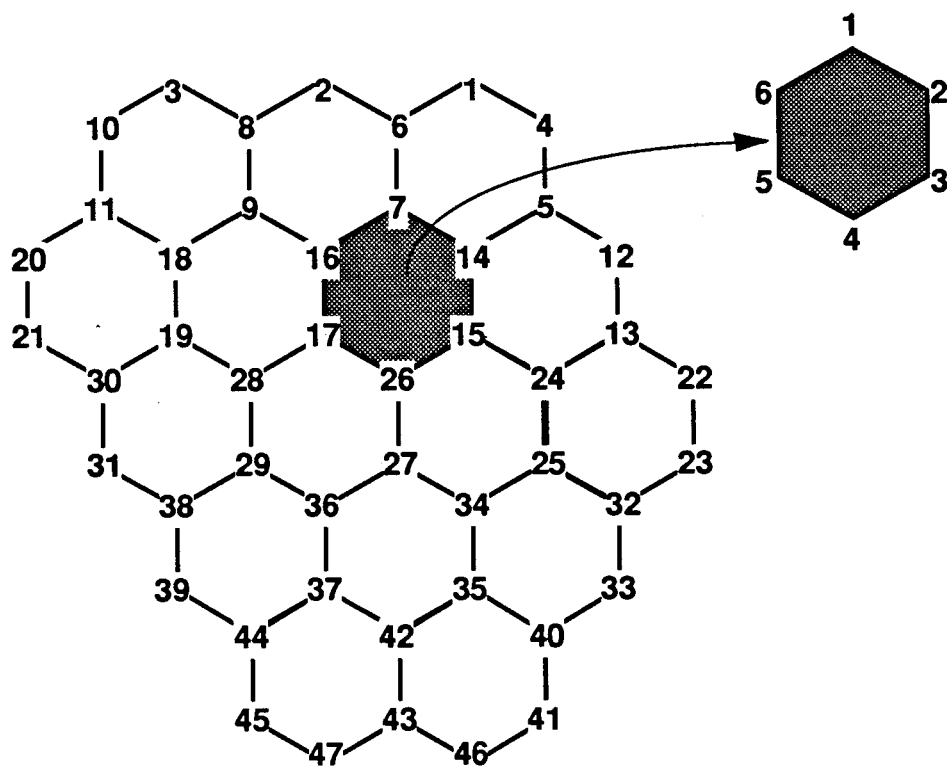


Figure 2.8: Exemple de correspondance entre la numérotation globale et locale (cas hexagonal)

2.3 DISCRÉTISATION EN DIFFÉRENCES FINIES À MAILLES CENTRÉES

La discrétisation en différences finies est la méthode la plus classique pour résoudre les équations de la diffusion. Le principe en est simple : on subdivise le domaine en un nombre fini de mailles. Les dérivées à chaque point sont alors remplacées par une approximation en différences finies. Les choses peuvent être vues autrement à savoir que la procédure de discrétisation consiste au remplacement de la solution par un polynôme d'interpolation et la dérivation de ce polynôme^[16].

La discrétisation en différences finies remplace les termes de dérivées par un développement en séries de Taylor, l'ordre de la troncature détermine l'ordre de l'approximation. Les séries de Taylor jouent un rôle important dans la formulation et la classification des schémas de différences finies. La référence [17] donne une excellente approche pour la discrétisation de l'équation de la diffusion pour des géométries cartésiennes, RZ et $R\theta$, nous nous sommes basé sur cette étude pour établir celle d'une géométrie hexagonale.

Reprenons la formulation monocinétique donnée par l'équation (2.10) et la condition frontière (2.15), nous avons :

$$-\nabla \cdot D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{K_{\text{eff}}} \nu \Sigma_f(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) \quad (2.49)$$

et

$$D(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r}) + \frac{1 - \beta(\vec{r})}{2(1 + \beta(\vec{r}))} \Phi(\vec{r}) = 0 ; \vec{r} \in \partial V_\beta \quad (2.50)$$

Nous allons discrétiser ces équations dans le cas où l'hexagone est pris dans sa globalité et aussi le cas où celui-ci est divisé en triangles équilatéraux. Sachant que les propriétés nucléaires sont constantes au niveau de l'hexagone et par conséquent aussi constantes à l'intérieur du triangle, les figures (2.9) et (2.10) illustrent une région du domaine où la discrétisation sera effectuée. Intégrons l'équation (2.49) sur le volume V_{ij} de la maille (i, j) on obtient alors :

$$-\int_{V_{ij}} d^3r \nabla \cdot D_{i,j} \nabla \Phi(\vec{r}) + \int_{V_{ij}} d^3r (\Sigma_r)_{i,j} \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{K_{\text{eff}}} \int_{V_{ij}} d^3r (\nu \Sigma_f)_{i,j} \Phi(\vec{r})$$

Posons $\Phi_{i,j} = \Phi(\vec{r}_{i,j})$ et faisons l'approximation suivante :

$$\int_{V_{ij}} \Phi(\vec{r}) d^3r \cong \Phi_{i,j} V_{ij} \quad (2.51)$$

Pour le terme contenant le Laplacien, appliquons le théorème de la divergence :

$$\int_{V_{ij}} \nabla \cdot D_{i,j} \nabla \Phi(\vec{r}) d^3r = \int_{\partial V_{ij}} D_{i,j} \nabla \Phi(\vec{r}) \cdot \vec{n} d^2r \quad (2.52)$$

où ∂V_{ij} représente la frontière du volume V_{ij} et \vec{n} la normale unitaire à cette frontière. Nous considérerons deux cas :

- cas où la maille (i, j) est une maille "normale", c'est-à-dire une maille à l'intérieur pour laquelle les conditions de continuité du flux et du courant peuvent être appliquées tout au long de sa frontière.
- et le cas où la maille est une maille "externe" et pour laquelle nous appliquerons la condition d'albédo donnée par (2.50).

2.3.1 Cas hexagonal

Considérons la figure (2.9), et posons $x_{\alpha\gamma}$ le point de coordonnées $(a\sqrt{3}/2, 0)$ et $h = a\sqrt{3}$: la distance séparant les centres de deux hexagones voisins, où a représente le côté de l'hexagone. Nous allons raisonner à deux dimensions et nous discuterons du cas tridimensionnel à la fin de cette section. Référons nous à la portion de ∂V_{ij} qui s'étend de α vers γ . Supposons que la variation du flux selon l'axe y le long de la portion qui s'étend de α vers γ soit négligeable. Dans ce cas les conditions d'interface nous permettent d'écrire :

$$\Phi(x_{\alpha\gamma}^-) = \Phi(x_{\alpha\gamma}^+) \quad (2.53)$$

$$D_{i,j} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=x_{\alpha\gamma}^-} = D_{i,j+1} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=x_{\alpha\gamma}^+}$$

Si nous faisons une expansion du flux et de sa première dérivée en série de Taylor dans la direction x on obtient :

$$\Phi(x_{\alpha\gamma}^-) = \Phi_{i,j} + \frac{h}{2} \Phi'_{i,j} + \dots$$

$$\Phi(x_{\alpha\gamma}^+) = \Phi_{i,j+1} - \frac{h}{2} \Phi'_{i,j+1} + \dots$$

$$\Phi'(x_{\alpha\gamma}^-) = \Phi'_{i,j} + h \Phi''_{i,j} + \dots$$

$$\Phi'(x_{\alpha\gamma}^+) = \Phi'_{i,j+1} - h \Phi''_{i,j+1} + \dots$$

À partir de ces équations cherchons à exprimer $\Phi_{i,j}$ et $\Phi_{i,j+1}$ en fonction du flux et de sa première dérivée :

$$\Phi_{i,j} = \Phi(x_{\alpha\gamma}^-) - \frac{h}{2} \Phi'(x_{\alpha\gamma}^-) + \dots \quad (2.54)$$

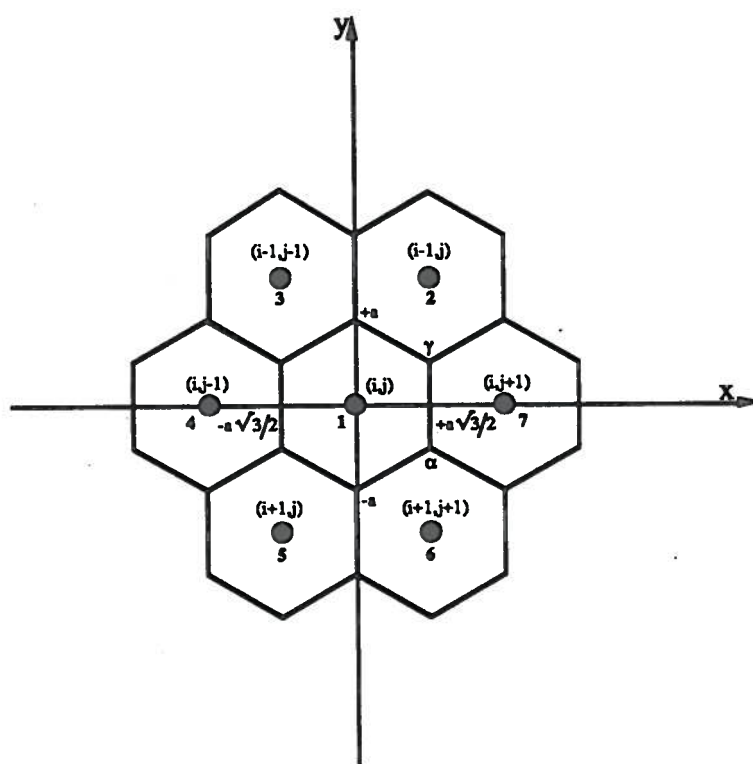


Figure 2.9: Schéma d'un hexagone avec ses voisins

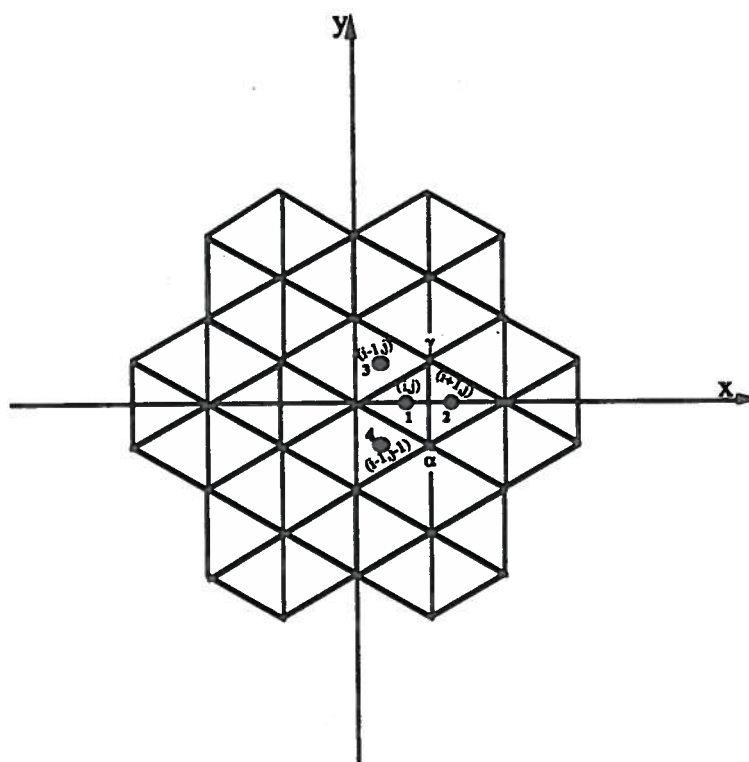


Figure 2.10: Schéma d'un triangle avec ses voisins

$$\Phi_{i,j+1} = \Phi(x_{\alpha\gamma}^+) + \frac{h}{2} \Phi'(x_{\alpha\gamma}^+) + \dots \quad (2.55)$$

En utilisant les conditions de continuité du flux $\Phi(x_{\alpha\gamma}^-) = \Phi(x_{\alpha\gamma}^+)$ et du courant $D_{i,j} \Phi'(x_{\alpha\gamma}^-) = D_{i,j+1} \Phi'(x_{\alpha\gamma}^+)$, et en multipliant la première équation par $D_{i,j}$ et la seconde par $D_{i,j+1}$, ensuite on additionne les deux équations tout en négligeant les termes d'ordre élevé on a alors :

$$\Phi(x_{\alpha\gamma}) \cong \frac{D_{i,j+1} \Phi_{i,j+1} + D_{i,j} \Phi_{i,j}}{D_{i,j+1} + D_{i,j}} \quad (2.56)$$

En substituant la relation (2.56) dans l'équation (2.54) et en résolvant pour obtenir la valeur de $D_{i,j} \Phi'(x_{\alpha\gamma}^-)$, on obtient :

$$D_{i,j} \Phi'(x_{\alpha\gamma}^-) = \frac{2}{h} \frac{D_{i,j+1} D_{i,j}}{D_{i,j+1} + D_{i,j}} (\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j})$$

Ainsi nous pouvons évaluer l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\gamma} D_{i,j} \nabla \Phi \cdot \vec{n} \, d^2r &= \frac{2}{h} \frac{D_{i,j+1} D_{i,j}}{D_{i,j+1} + D_{i,j}} (\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j}) a \\ &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i,j+1} D_{i,j}}{D_{i,j+1} + D_{i,j}} (\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j}) \end{aligned}$$

Le même raisonnement peut être appliqué pour les côtés restants. D'où pour une maille "normale" nous avons les définitions suivantes :

$$\begin{aligned} a_{i,j}^{1,2} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i-1,j} D_{i,j}}{D_{i-1,j} + D_{i,j}} & a_{i,j}^{1,5} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i+1,j} D_{i,j}}{D_{i+1,j} + D_{i,j}} \\ a_{i,j}^{1,3} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i-1,j-1} D_{i,j}}{D_{i-1,j-1} + D_{i,j}} & a_{i,j}^{1,6} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i+1,j+1} D_{i,j}}{D_{i+1,j+1} + D_{i,j}} \\ a_{i,j}^{1,4} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i,j-1} D_{i,j}}{D_{i,j-1} + D_{i,j}} & a_{i,j}^{1,7} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i,j+1} D_{i,j}}{D_{i,j+1} + D_{i,j}} \end{aligned}$$

Nous pouvons donc écrire :

$$e_{i,j} = a_{i,j}^{1,2} + a_{i,j}^{1,3} + a_{i,j}^{1,4} + a_{i,j}^{1,5} + a_{i,j}^{1,6} + a_{i,j}^{1,7} + (\Sigma_r)_{i,j} V_{ij}$$

où :

$$V_{ij} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$$

Nous devons maintenant étudier le cas où la maille (i, j) fait partie de la frontière externe du domaine. Par simplicité, nous supposons que l'hexagone numéro 7 de la figure (2.9) n'existe pas, ainsi la portion de ∂V_{ij} allant de α vers γ constitue une partie de la frontière pour laquelle on imposera une condition du type $A \nabla \Phi \cdot \vec{n} + B \Phi = C$. A , B et C sont constantes par maille. Là encore négligeons la dépendance du flux selon l'axe y . En développant le flux et sa première dérivée en série de Taylor on a :

$$\Phi(x_{\alpha\gamma}) = \Phi_{i,j} + \frac{h}{2} \Phi'_{i,j} + \dots$$

$$\Phi'(x_{\alpha\gamma}) = \Phi'_{i,j} + h \Phi''_{i,j} + \dots$$

En utilisant la relation $A \Phi'(x_{\alpha\gamma}) + B \Phi(x_{\alpha\gamma}) = C$, on obtient :

$$C = B \Phi_{i,j} + \left(A + \frac{h}{2} B\right) \Phi'_{i,j} + \dots$$

ainsi en remplaçant $\Phi'_{i,j}$ par sa valeur issue du développement de Taylor on a :

$$(C - B \Phi_{i,j}) - \left(A + \frac{h}{2} B\right) \Phi'(x_{\alpha\gamma}) \simeq 0$$

ceci en négligeant les termes d'ordre élevé. D'où :

$$\Phi'(x_{\alpha\gamma}) \simeq \frac{C - B \Phi_{i,j}}{A + \frac{h}{2} B}$$

Finalement on a :

$$\int_{\alpha} D_{i,j} \nabla \Phi \cdot \vec{n} d^2r = \frac{D_{i,j} (C - B \Phi_{i,j})}{A + \frac{h}{2} B} a$$

En identifiant les termes de la relation précédente avec ceux de l'équation (2.50)

nous avons :

$$A = D_{i,j}$$

$$B = \frac{11 - \beta}{21 + \beta}$$

$$C = 0$$

où β représente la valeur de l'albédo. Dans ce cas :

$$a_{i,j}^{1,7} = 0$$

$$e_{i,j} = a_{i,j}^{1,2} + a_{i,j}^{1,3} + a_{i,j}^{1,4} + a_{i,j}^{1,5} + a_{i,j}^{1,6} + \frac{\frac{11 - \beta}{21 + \beta} D_{i,j}}{D_{i,j} + \frac{h}{4} \frac{11 - \beta}{1 + \beta}} a + (\Sigma_r)_{i,j} V_{i,j}$$

Le raisonnement est le même pour les autres côtés. À présent que l'équation (2.49)

est discrétisée nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} & -(a_{i,j}^{1,2} \Phi_{i-1,j} + a_{i,j}^{1,3} \Phi_{i-1,j-1} + a_{i,j}^{1,4} \Phi_{i,j-1} + a_{i,j}^{1,5} \Phi_{i+1,j} + a_{i,j}^{1,6} \Phi_{i+1,j+1} + a_{i,j}^{1,7} \Phi_{i,j+1}) \\ & + e_{i,j} \Phi_{i,j} = \frac{1}{K_{\text{eff}}} (\nu \Sigma_f)_{i,j} V_{i,j} \Phi_{i,j} \end{aligned}$$

Pour le cas tridimensionnel, chaque maille dite "normale" sera entourée de 8 voisins et chaque maille "externe" entourée d'un nombre de voisins strictement inférieur à 8.

Avant d'aborder la discrétisation, nous allons fixer quelques notations pour simplifier notre exposé :

- le voisin inférieur sera numéroté 8 et $\Delta Z_{i,j,k-1}$ représentera la hauteur de la maille 8.
- le voisin supérieur sera numéroté 9 et $\Delta Z_{i,j,k+1}$ représentera la la hauteur de la maille 9.
- et enfin $\Delta Z_{i,j,k}$ représentera la hauteur de la maille 1.

Avec ces conventions les coefficients de l'équation de la diffusion discrétisée pour une maille "normale" seront donnés par :

$$\begin{aligned}
 a_{i,j,k}^{1,2} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i-1,j,k} D_{i,j,k}}{D_{i-1,j,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k} & a_{i,j,k}^{1,6} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i+1,j+1,k} D_{i,j,k}}{D_{i+1,j+1,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k} \\
 a_{i,j,k}^{1,3} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i-1,j-1,k} D_{i,j,k}}{D_{i-1,j-1,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k} & a_{i,j,k}^{1,7} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i,j+1,k} D_{i,j,k}}{D_{i,j+1,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k} \\
 a_{i,j,k}^{1,4} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i,j-1,k} D_{i,j,k}}{D_{i,j-1,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k} & a_{i,j,k}^{1,8} &= \frac{3\sqrt{3} D_{i,j,k} D_{i,j,k-1} a^2}{\Delta Z_{i,j,k-1} D_{i,j,k} + \Delta Z_{i,j,k} D_{i,j,k-1}} \\
 a_{i,j,k}^{1,5} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{D_{i+1,j,k} D_{i,j,k}}{D_{i+1,j,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k} & a_{i,j,k}^{1,9} &= \frac{3\sqrt{3} D_{i,j,k} D_{i,j,k+1} a^2}{\Delta Z_{i,j,k+1} D_{i,j,k} + \Delta Z_{i,j,k} D_{i,j,k+1}}
 \end{aligned}$$

On peut aussi écrire :

$$e_{i,j,k} = a_{i,j,k}^{1,2} + a_{i,j,k}^{1,3} + a_{i,j,k}^{1,4} + a_{i,j,k}^{1,5} + a_{i,j,k}^{1,6} + a_{i,j,k}^{1,7} + a_{i,j,k}^{1,8} + a_{i,j,k}^{1,9} + (\Sigma_r)_{i,j,k} V_{ijk}$$

où :

$$V_{ijk} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \Delta Z_{i,j,k}$$

Traisons maintenant le cas où par exemple la maille (i, j, k) est une maille "externe" et que le voisin numéro 9 n'existe pas. Nous avons alors :

$$a_{i,j,k}^{1,9} = 0$$

$$e_{i,j,k} = a_{i,j,k}^{1,2} + a_{i,j,k}^{1,3} + a_{i,j,k}^{1,4} + a_{i,j,k}^{1,5} + a_{i,j,k}^{1,6} + a_{i,j,k}^{1,7} +$$

$$a_{i,j,k}^{1,8} + \frac{\frac{3\sqrt{3}1-\beta}{4} D_{i,j}}{D_{i,j} + \frac{\Delta Z_{i,j,k} 1-\beta}{4} 1+\beta} a^2 + (\Sigma_r)_{i,j,k} V_{ijk}$$

La discrétisation au complet du cas tridimensionnel est donnée par :

$$-(a_{i,j,k}^{1,2} \Phi_{i-1,j,k} + a_{i,j,k}^{1,3} \Phi_{i-1,j-1,k} + a_{i,j,k}^{1,4} \Phi_{i,j-1,k} + a_{i,j,k}^{1,5} \Phi_{i+1,j,k} + a_{i,j,k}^{1,6} \Phi_{i+1,j+1,k} +$$

$$a_{i,j,k}^{1,7} \Phi_{i,j+1,k} + a_{i,j,k}^{1,8} \Phi_{i,j,k-1} + a_{i,j,k}^{1,9} \Phi_{i,j,k+1}) + e_{i,j,k} \Phi_{i,j,k} = \frac{1}{K_{\text{eff}}} (\nu \Sigma_f)_{i,j,k} V_{ijk} \Phi_{i,j,k}$$

2.3.2 Cas triangulaire

Considérons la figure (2.10), et soit $h = a/\sqrt{3}$: la distance séparant les centres de deux triangles voisins, où a représente le côté de l'hexagone donc du triangle. Le raisonnement est le même que précédemment, nous traiterons d'abord le cas bidimensionnel et nous discuterons du cas tridimensionnel à la fin de la section. Ainsi, nous pouvons établir directement les relations suivantes :

$$a_{i,j}^{1,2} = 2\sqrt{3} \frac{D_{i+1,j} D_{i,j}}{D_{i+1,j} + D_{i,j}}$$

$$a_{i,j}^{1,3} = 2\sqrt{3} \frac{D_{i-1,j} D_{i,j}}{D_{i-1,j} + D_{i,j}}$$

$$a_{i,j}^{1,4} = 2\sqrt{3} \frac{D_{i-1,j-1} D_{i,j}}{D_{i-1,j-1} + D_{i,j}}$$

On a alors :

$$e_{i,j} = a_{i,j}^{1,2} + a_{i,j}^{1,3} + a_{i,j}^{1,4} + (\Sigma_r)_{i,j} V_{ij}$$

où :

$$V_{ij} = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2$$

Nous devons maintenant étudier le cas où la maille (i, j) fait partie de la frontière externe du domaine. On a :

$$a_{i,j}^{1,2} = 0$$

$$e_{i,j} = a_{i,j}^{1,3} + a_{i,j}^{1,4} + \frac{\frac{1}{2} \frac{1-\beta}{1+\beta} D_{i,j}}{D_{i,j} + \frac{h}{4} \frac{1-\beta}{1+\beta}} a + (\Sigma_r)_{i,j} V_{ij}$$

Le système discrétisé est donné par :

$$-(a_{i,j}^{1,2} \Phi_{i+1,j} + a_{i,j}^{1,3} \Phi_{i-1,j} + a_{i,j}^{1,4} \Phi_{i-1,j-1})$$

$$+ e_{i,j} \Phi_{i,j} = \frac{1}{K_{\text{eff}}} (\nu \Sigma_f)_{i,j} V_{ij} \Phi_{i,j}$$

Pour le cas tridimensionnel, chaque maille dite "normale" sera entourée de 5 voisins et chaque maille "externe" entourée d'un nombre de voisins strictement inférieur à 5.

Comme précédemment fixons quelques notations pour simplifier notre exposé :

- le voisin inférieur sera numéroté 5 et $\Delta Z_{i,j,k-1}$ représentera la hauteur de la maille 5.

- le voisin supérieur sera numéroté 6 et $\Delta Z_{i,j,k+1}$ représentera la hauteur de la maille 6.
- et enfin $\Delta Z_{i,j,k}$ représentera la hauteur de la maille 1.

Avec ces conventions les coefficients de l'équation de la diffusion discrétisée pour une maille "normale" seront donnés par :

$$a_{i,j,k}^{1,2} = 2\sqrt{3} \frac{D_{i-1,j,k} D_{i,j,k}}{D_{i-1,j,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k}$$

$$a_{i,j,k}^{1,3} = 2\sqrt{3} \frac{D_{i-1,j-1,k} D_{i,j,k}}{D_{i-1,j-1,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k}$$

$$a_{i,j,k}^{1,4} = 2\sqrt{3} \frac{D_{i,j-1,k} D_{i,j,k}}{D_{i,j-1,k} + D_{i,j,k}} \Delta Z_{i,j,k}$$

$$a_{i,j,k}^{1,5} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{D_{i,j,k} D_{i,j,k-1}}{\Delta Z_{i,j,k-1} D_{i,j,k} + \Delta Z_{i,j,k} D_{i,j,k-1}} a^2$$

$$a_{i,j,k}^{1,6} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{D_{i,j,k} D_{i,j,k+1}}{\Delta Z_{i,j,k+1} D_{i,j,k} + \Delta Z_{i,j,k} D_{i,j,k+1}} a^2$$

On peut aussi écrire :

$$e_{i,j,k} = a_{i,j,k}^{1,2} + a_{i,j,k}^{1,3} + a_{i,j,k}^{1,4} + a_{i,j,k}^{1,5} + a_{i,j,k}^{1,6} + (\Sigma_r)_{i,j,k} V_{ijk}$$

où :

$$V_{ijk} = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 \Delta Z_{i,j,k}$$

Traisons maintenant le cas où par exemple la maille (i, j, k) est une maille "externe" et que le voisin numéro 6 n'existe pas. Nous avons alors :

$$a_{i,j,k}^{1,6} = 0$$

$$e_{i,j,k} = a_{i,j,k}^{1,2} + a_{i,j,k}^{1,3} + a_{i,j,k}^{1,4} + a_{i,j,k}^{1,5} + \frac{\frac{\sqrt{3}}{8} \frac{1-\beta}{1+\beta} D_{i,j}}{D_{i,j} + \frac{\Delta Z_{i,j,k}}{4} \frac{1-\beta}{1+\beta}} a^2 + (\Sigma_r)_{i,j,k} V_{ijk}$$

La discrétisation au complet du cas tridimensionnel est donnée par :

$$\begin{aligned}
 & -(a_{i,j,k}^{1,2} \Phi_{i+1,j,k} + a_{i,j,k}^{1,3} \Phi_{i-1,j,k} + a_{i,j,k}^{1,4} \Phi_{i-1,j-1,k} + a_{i,j,k}^{1,5} \Phi_{i,j,k-1} + a_{i,j,k}^{1,6} \Phi_{i,j,k+1}) \\
 & + e_{i,j,k} \Phi_{i,j,k} = \frac{1}{K_{\text{eff}}} (\nu \Sigma_f)_{i,j,k} V_{ijk} \Phi_{i,j,k}
 \end{aligned}$$

Remarque : Notons que pour un nombre de points par hexagone de 24, 54 ou 96, le raisonnement est le même sauf que la distance séparant les centres de deux triangles voisins sera égale à $d = h/m$ et le côté du triangle égale à $c = a/m$ où m est égale respectivement à 2, 3 et 4.

2.4 NUMÉROTATION DES INCONNUES

Après l'étape de la discrétisation des équations, se pose le choix d'une bonne numérotation des inconnues. En effet, le choix de la numérotation influe beaucoup sur le profil des matrices intervenant dans le système linéaire résultant de la discrétisation. Une mauvaise numérotation peut conduire à stocker des matrices énormes et par conséquent contribuer à augmenter considérablement le temps de traitement du problème étudié. Quant à notre approche pour le choix de la numérotation, elle a été dictée par la méthode ADI qui ne permet pas beaucoup de flexibilité. Cela dit, notre principal souci était de trouver une numérotation judicieuse afin de réduire le nombre d'éléments stockés lors de la résolution des systèmes. L'algorithme ADI à quatre axes développé dans cette thèse nous a conduit à proposer les numérotations suivantes :

- La figure 2.11 présente un exemple de numérotation dans le cas des différences finies centrées pour l'hexagone au complet. Dans cette figure comme dans les suivantes nous n'avons présenté que la numérotation selon trois axes uniquement sachant que la numérotation selon l'axe vertical est obtenue aisément à partir de celle de la direction W ;
- La figure 2.12 présente un exemple de numérotation dans le cas des différences finies centrées pour l'hexagone mais cette fois divisé en six triangles équilatéraux (notons que la numérotation pour 24, 54 et 96 est similaire) ;
- La figure 2.13 présente un exemple de numérotation dans le cas des éléments finis où l'hexagone est divisé en six triangles équilatéraux ;
- Enfin la figure 2.14 présente un exemple de numérotation dans le cas des éléments finis avec comme élément de base l'hexagone au complet.

Remarque : Nous avons adopté comme convention dans le cas hexagonal que la direction W est la principale, alors que dans le cas cartésien X est la direction principale.

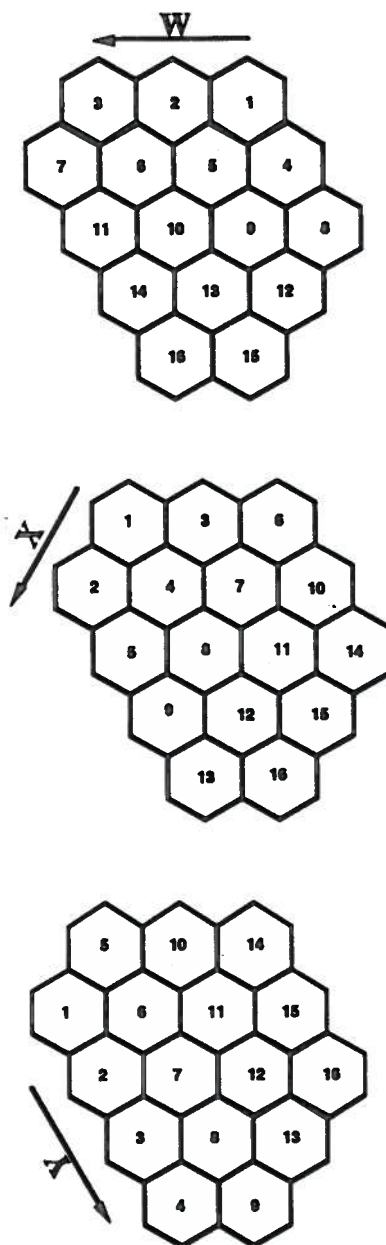


Figure 2.11: Numérotation des inconnues : cas des différences finies centrées au niveau d'un hexagone

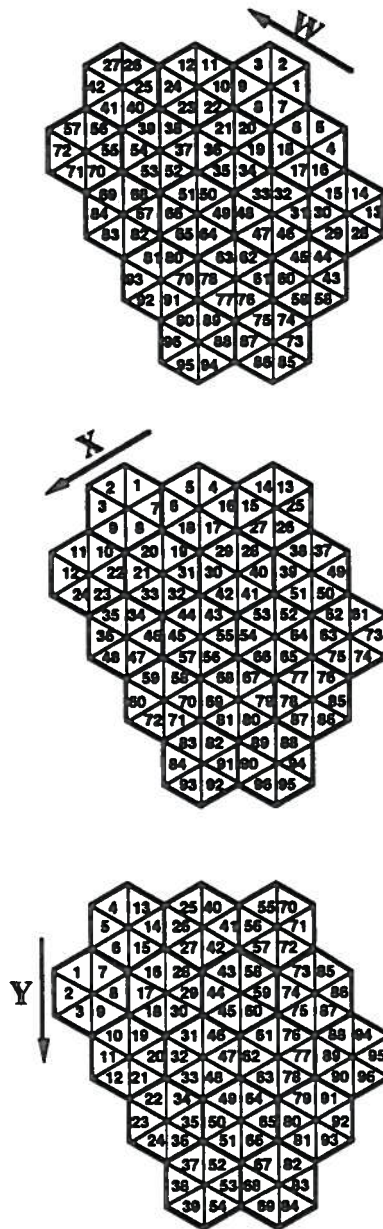


Figure 2.12: Numérotation des inconnues : cas des différences finies centrées au niveau d'un triangle

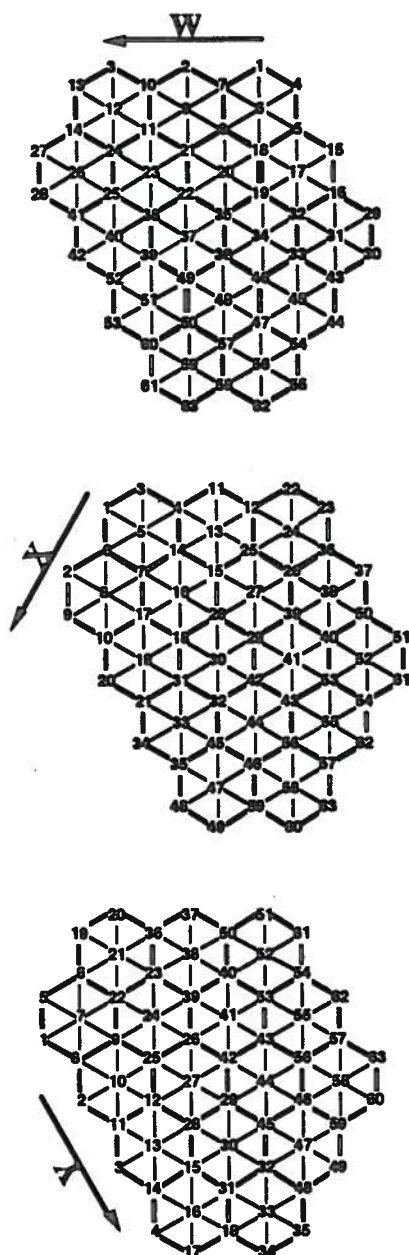


Figure 2.13: Numérotation des inconnues : cas d'un élément fini triangulaire

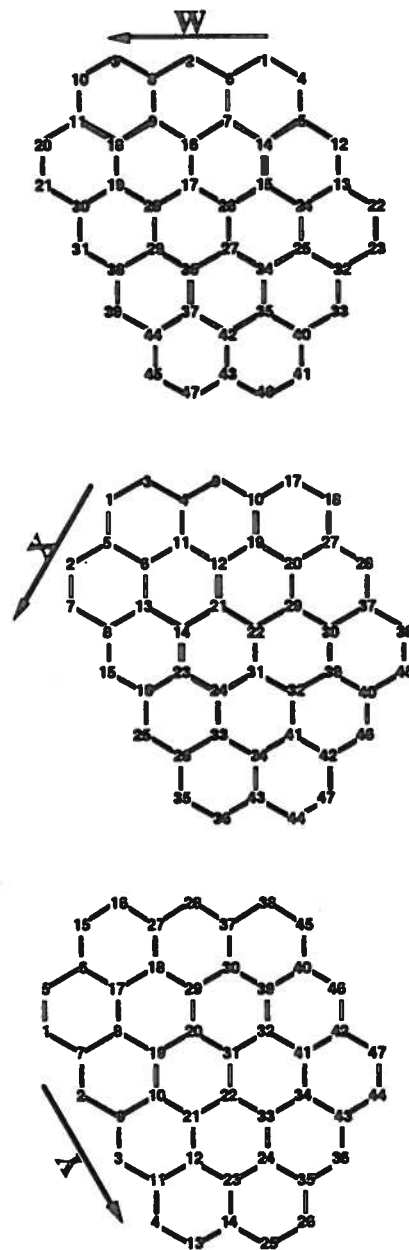


Figure 2.14: Numérotation des inconnues : cas d'un élément fini hexagonal

2.5 RÉSOLUTION DIRECTE DU PROBLÈME MONOCINÉTIQUE

2.5.1 Introduction

Pour la résolution des systèmes matriciels qui résultent de la discrétisation de l'équation de la diffusion aussi bien en éléments finis qu'en différences finies, certaines techniques d'analyse numérique existaient déjà dans l'ancienne version du code TRIVAC-3. Ces techniques ont été testées et qualifiées et ont aussi fait l'objet de plusieurs publications par Hébert^[9, 18, 19]. Dans ce qui suit nous allons exposer la méthode utilisée pour la résolution du problème direct.

2.5.2 Résolution du problème direct

Nous avons vu au cours de ce chapitre que la discrétisation par différences finies ou éléments finis de l'équation de la diffusion neutronique génère un système matriciel aux valeurs propres de la forme :

$$\left\{ A + \lambda B \right\} \vec{\Phi} = \vec{0} \quad (2.57)$$

où A et B sont des matrices carrées non symétriques avec A définie positive ou définie négative. La solution généralement recherchée est l'harmonique fondamentale, c'est-à-dire le vecteur propre $\vec{\Phi}$ correspondant à λ^{-1} représentant le facteur de multiplication effectif du réacteur. La recherche d'une telle solution est souvent à la base d'un calcul neutronique puisqu'elle permet l'obtention de la distribution de puissance dans un réacteur nucléaire.

Remarque : Dans le cas général les matrices A et B sont comme on l'a mentionné plus haut non symétriques, sauf pour le cas monocinétique. À ce stade il nous paraît utile de donner la forme globale des matrices A et B dans le cas multigroupe avec une hypothèse fondamentale dans le cas du code TRIVAC-3, où l'on néglige les diffusions de neutrons d'un groupe g vers un groupe h lorsque g > h, ce qui revient à négliger les accélérations de neutrons^[20]. Dans ces conditions nous avons :

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{G1} & A_{G2} & \cdots & A_{GG} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1G} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2G} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{G1} & B_{G2} & \cdots & B_{GG} \end{bmatrix}$$

où les matrices carrées A et B sont composées de GxG blocs d'ordre K. Les blocs A_{gg} et B_{gg} apparaissant sur la diagonale sont par contre symétriques. Cette propriété est nécessaire pour l'application de la méthode Cholesky pour la décomposition de ces matrices.

La résolution de l'équation (2.57) dans le cas du module Bivac est basée sur la méthode inversée des puissances qui permet une convergence linéaire vers la solution fondamentale par la formule de récurrence suivante :

$$\vec{\Phi}^{(1)} \text{ donnée}$$

$$\vec{\Phi}^{(k+1)} = -\lambda^{(k)} A^{-1} B \vec{\Phi}^{(k)} ; k > 1 \quad (2.58)$$

où le produit $A^{-1}B$ correspond à la matrice itérante de la méthode des puissances. L'estimé de la valeur propre fondamentale $\lambda^{(k+1)}$ peut être obtenu de différentes

façons en fonction du vecteur propre $\vec{\Phi}^{(k+1)}$. En général, la convergence de la valeur propre est plus rapide que la convergence du vecteur propre. Le critère d'arrêt devra donc vérifier la convergence de chaque composante du vecteur propre.

Signalons que la méthode inversée des puissances converge vers la solution fondamentale avec une constante asymptotique de convergence égale au rapport de dominance de la matrice itérante $A^{-1}B^{[18]}$. Il arrive fréquemment que la discrétisation d'un réacteur nucléaire de grande dimension, où le flux neutronique est aplati, produise un rapport de dominance supérieur à 0.95. Dans ces conditions, la convergence en itérations libres de la méthode des puissances est trop lente pour se prêter à une utilisation pratique. Nous allons exposer plus loin une technique d'accélération de convergence basée sur un principe variationnel pour palier à ce problème.

Pour le calcul de A^{-1} , la méthode utilisée est basée sur une décomposition triangulaire par la méthode $L - D - L^T$ de Cholesky qui décompose la matrice A en produit de trois matrices. La méthode de Cholesky procède en deux étapes :

1. Décomposition :

On détermine les matrices L et D telles que :

$$A = L D L^T \quad (2.59)$$

où $D = \text{diag} (d_1, d_2, \dots, d_K)$ est une matrice diagonale et où L est une

matrice triangulaire inférieure de la forme suivante :

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{K1} & l_{K2} & l_{K3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Les valeurs d_i et l_{ij} sont calculées par l'algorithme suivant :

$$d_1 = a_{11}$$

$$l_{i1} = a_{i1}/d_1 ; i = 2, K$$

$$d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k ; i = 2, K$$

$$l_{ij} = \frac{1}{d_j} \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right] ; i = 2, K \text{ et } j = 1, i-1$$

On notera que ce type de décomposition ne fait intervenir aucune extraction de racine carrée. De plus, la matrice L possède le même profil externe que la matrice A :

$$\text{si } \{ a_{ij} = 0 ; j = 1, k_i \} \quad \text{alors} \quad \{ l_{ij} = 0 ; j = 1, k_i \}$$

pour $k_i < i$, nombre d'éléments nuls à gauche du premier élément non nul de la ligne i .

Cette dernière propriété est mise à contribution afin de réduire l'espace mémoire nécessaire au stockage des éléments des matrices A et L . Plutôt que de travailler avec un tableau bidimensionnel a_{ij} , on utilise un tableau unidimensionnel a'_k qui ne contiendra que les éléments a_{ij} intérieurs au profil externe.

Pour cela, on utilise un vecteur d'index $\{MU(i) ; i = 1, K\}$ défini de la façon suivante :

$$MU(1) = 1$$

$$MU(i) = MU(i-1) + i - k_i ; i = 2, K$$

Les éléments du vecteur $\{a'_k ; k = 1, MU(K)\}$ seront alors donnés par :

$$a'_{MU(i)-i+j} = a_{ij} ; i = 1, K \text{ et } j = k_i + 1, i$$

2. Résolution du système linéaire :

Ayant accompli le travail de décomposition de la matrice A , le système matriciel (2.57) où on a posé $\vec{S} = -\lambda B \vec{\Phi}$ devient alors :

$$L D L^T \vec{\Phi} = \vec{S}$$

Posons :

$$\vec{h} = D L^T \vec{\Phi}$$

On commence par résoudre, par substitution avant, le système :

$$L \vec{h} = \vec{S}$$

c'est-à-dire :

$$h_1 = S_1$$

$$h_i = S_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} h_j ; i = 2, K$$

Le vecteur inconnu $\vec{\Phi}$ est ensuite calculé par substitution arrière du système matriciel initial par :

$$\begin{aligned}\Phi_K &= \frac{h_K}{d_K} \\ \Phi_i &= \frac{h_i}{d_i} - \sum_{j=i+1}^K l_{ji} \Phi_j ; \quad i = K-1, K-2, \dots, 1\end{aligned}$$

La résolution du système (2.58) requiert l'utilisation d'une stratégie itérative, ce que nous allons exposer dans le paragraphe suivant.

2.5.3 Résolution accélérée du problème direct

Nous allons exposer une technique d'accélération variationnelle par symétrisation pour laquelle la résolution du problème adjoint n'est pas requise. Afin d'améliorer la performance de cette méthode on introduit deux paramètres de surrelaxation $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ dans la méthode inversée des puissances^[19]. L'équation (2.58) devient alors :

$$\vec{\Phi}^{(k+1)} = \vec{\Phi}^{(k)} + \alpha^{(k)} \left\{ \vec{g}^{(k)} + \beta^{(k)} (\vec{\Phi}^{(k)} - \vec{\Phi}^{(k-1)}) \right\} \quad (2.60)$$

$$\vec{g}^{(k)} = -\vec{\Phi}^{(k)} - \lambda^{(k)} A^{-1} B \vec{\Phi}^{(k)} \quad (2.61)$$

Une convergence en itérations libres est obtenue simplement en posant $\alpha^{(k)} = 1$ et $\beta^{(k)} = 0$. Le vecteur $\vec{g}^{(k)}$ représente la direction d'avance à l'itération k . Les paramètres de surrelaxation $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ seront calculés de façon à minimiser une fonctionnelle appropriée.

Une difficulté est causée par l'asymétrie des matrices A et B de l'équation (2.57). Il est cependant possible de "symétriser" ce système en le multipliant par $\{A^T + \lambda B^T\}$. On obtient alors :

$$\left\{ A^T A + \lambda (A^T B + B^T A) + \lambda^2 B^T B \right\} \vec{\Phi} = \vec{0} \quad (2.62)$$

Considérons le produit interne de l'équation (2.62) avec la solution fondamentale $\vec{\Phi}$:

$$\langle A \vec{\Phi}, A \vec{\Phi} \rangle + 2 \lambda \langle A \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle + \lambda^2 \langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle = \vec{0}$$

Cette dernière équation suggère l'utilisation de la fonctionnelle suivante :

$$\lambda\{\vec{\Phi}\} = -\frac{\langle A \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle} \pm i \sqrt{\frac{\langle A \vec{\Phi}, A \vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle} - \left[\frac{\langle A \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle} \right]^2} \quad (2.63)$$

Nous allons premièrement montrer que toute solution de l'équation (2.62), fondamentale ou non, correspond à un point stationnaire de la fonctionnelle (2.63). La recherche d'un tel point s'effectue en annulant la variation de la fonctionnelle (2.63) par rapport à toutes les variations arbitraires $\delta\vec{\Phi}$ de $\vec{\Phi}$:

$$\delta_{\delta\Phi} \lambda\{\vec{\Phi}\} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{d}{d\epsilon} \lambda\{\vec{\Phi} + \epsilon \delta\vec{\Phi}\} \right] = 0 \quad (2.64)$$

Ce processus se simplifie un peu si on introduit les fonctionnelles $F\{\vec{\Phi}\}$ et $G\{\vec{\Phi}\}$ définies par :

$$F\{\vec{\Phi}\} = \langle A \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle \langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle^{-1}$$

et

$$G\{\vec{\Phi}\} = \langle A \vec{\Phi}, A \vec{\Phi} \rangle \langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle^{-1}$$

on obtient alors :

$$\delta_{\delta\Phi} \lambda\{\vec{\Phi}\} = -\delta_{\delta\Phi} F\{\vec{\Phi}\} - \frac{1}{2} [\delta_{\delta\Phi} G\{\vec{\Phi}\} - 2F\{\vec{\Phi}\} \delta_{\delta\Phi} F\{\vec{\Phi}\}] [\lambda\{\vec{\Phi}\} + F\{\vec{\Phi}\}]^{-1} = 0$$

Après quelques simplifications, on peut montrer que :

$$\lambda\{\vec{\Phi}\} \delta_{\delta\Phi} F\{\vec{\Phi}\} + \frac{1}{2} \delta_{\delta\Phi} G\{\vec{\Phi}\} = 0 \quad (2.65)$$

avec :

$$\delta_{\delta\Phi} F\{\vec{\Phi}\} = \frac{\langle A \delta\vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle + \langle A \vec{\Phi}, B \delta\vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle} - 2F\{\vec{\Phi}\} \frac{\langle B \vec{\Phi}, B \delta\vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle} \quad (2.66)$$

$$\delta_{\delta\Phi} G\{\vec{\Phi}\} = 2 \frac{\langle A \vec{\Phi}, A \delta\vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle} - 2G\{\vec{\Phi}\} \frac{\langle B \vec{\Phi}, B \delta\vec{\Phi} \rangle}{\langle B \vec{\Phi}, B \vec{\Phi} \rangle}$$

La substitution des équations (2.66) dans (2.65) donne :

$$\{\delta\vec{\Phi}\}^T \left\{ A^T A + \lambda\{\vec{\Phi}\} (A^T B + B^T A) + \lambda^2\{\vec{\Phi}\} B^T B \right\} \vec{\Phi} = 0 \quad (2.67)$$

Comme le vecteur $\delta\vec{\Phi}$ est arbitraire, l'équation (2.62) devra obligatoirement être satisfaite. Ceci confirme la validité du principe de stationnarité. Notons que la valeur de la fonctionnelle (2.63) sur le point stationnaire est réelle et égale à une valeur propre de l'équation (2.62).

La méthode d'accélération de convergence consiste à substituer l'équation (2.60) dans la fonctionnelle (2.63) et à calculer la valeur des paramètres de surrelaxation $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ correspondant à un point stationnaire. Une difficulté apparaît aussitôt à cause de la nature complexe de la fonctionnelle. Comme la partie imaginaire ne s'annule que sur le point stationnaire, la stratégie suivante a été adoptée :

1. On utilise la partie réelle de la fonctionnelle comme estimé de la valeur propre dans l'équation (2.61) :

$$\lambda^{(k)} = - \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{\Phi}^{(k)} \rangle \langle B \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{\Phi}^{(k)} \rangle^{-1} \quad (2.68)$$

2. On calcule la valeur des paramètres de surrelaxation qui minimise la partie imaginaire de la fonctionnelle à l'itération suivante. Un estimé amélioré de la solution devra alors satisfaire un système non linéaire de deux équations avec $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ comme inconnues :

$$\frac{d}{d\alpha^{(k)}} \left\{ \langle A \vec{\Phi}^{(k+1)}, A \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle \langle B \vec{\Phi}^{(k+1)}, B \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle - \langle A \vec{\Phi}^{(k+1)}, B \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle^2 \right\} = 0 \quad (2.69)$$

et

$$\frac{d}{d\beta^{(k)}} \left\{ \langle A \vec{\Phi}^{(k+1)}, A \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle \langle B \vec{\Phi}^{(k+1)}, B \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle - \langle A \vec{\Phi}^{(k+1)}, B \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle^2 \right\} = 0 \quad (2.70)$$

Il est impossible de prouver que la solution des équations (2.69) et (2.70) soit unique. Des tests numériques ont révélés l'existence d'un ensemble optimal de paramètres de surrelaxation avec $\alpha^{(k)} > 1$ à chaque itération.

Les valeurs optimales de $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ sont obtenues en résolvant les équations (2.69) et (2.70) par une technique itérative de type Newton-Raphson. Deux ou trois itérations sont généralement suffisantes pour converger sur la solution, en partant d'un estimé initial avec $\alpha^{(k)} = 1$ et $\beta^{(k)} = 0$.

Tout d'abord introduisons un changement de variable qui simplifiera l'application du principe de stationnarité :

$$\vec{h}^{(k)} = \vec{\Phi}^{(k)} - \vec{\Phi}^{(k-1)}$$

et

$$\gamma^{(k)} = \alpha^{(k)} \beta^{(k)}$$

Avec ces définitions, l'équation (2.60) devient :

$$\vec{\Phi}^{(k+1)} = \vec{\Phi}^{(k)} + \alpha^{(k)} \vec{g}^{(k)} + \gamma^{(k)} \vec{h}^{(k)} \quad (2.71)$$

En substituant l'équation (2.71) dans les équations (2.69) et (2.70) afin d'obtenir un système non linéaire en $\alpha^{(k)}$ et $\gamma^{(k)}$:

$$X^{(k+1)} \frac{\partial Y^{(k+1)}}{\partial \alpha^{(k)}} + \frac{\partial X^{(k+1)}}{\partial \alpha^{(k)}} Y^{(k+1)} = 2Z^{(k+1)} \frac{\partial Z^{(k+1)}}{\partial \alpha^{(k)}} \quad (2.72)$$

et

$$X^{(k+1)} \frac{\partial Y^{(k+1)}}{\partial \gamma^{(k)}} + \frac{\partial X^{(k+1)}}{\partial \gamma^{(k)}} Y^{(k+1)} = 2Z^{(k+1)} \frac{\partial Z^{(k+1)}}{\partial \gamma^{(k)}} \quad (2.73)$$

avec :

$$\begin{aligned} X^{(k+1)} &= \langle A \vec{\Phi}^{(k+1)}, A \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle \\ Y^{(k+1)} &= \langle B \vec{\Phi}^{(k+1)}, B \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle \\ Z^{(k+1)} &= \langle A \vec{\Phi}^{(k+1)}, B \vec{\Phi}^{(k+1)} \rangle \end{aligned}$$

L'évaluation de ces produits bilinéaires demande plus de temps en terme de CPU que la résolution des équations (2.72) et (2.73). Ceci est facilement compréhensible

si on fait le développement de ces produits, on a alors :

$$\begin{aligned}
 X^{(k+1)} &= \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, A \vec{\Phi}^{(k)} \rangle + 2\alpha^{(k)} \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, A \vec{g}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + 2\gamma^{(k)} \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, A \vec{h}^{(k)} \rangle + [\alpha^{(k)}]^2 \langle A \vec{g}^{(k)}, A \vec{g}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + 2\alpha^{(k)}\gamma^{(k)} \langle A \vec{g}^{(k)}, A \vec{h}^{(k)} \rangle + [\gamma^{(k)}]^2 \langle A \vec{h}^{(k)}, A \vec{h}^{(k)} \rangle \quad (2.74)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Y^{(k+1)} &= \langle B \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{\Phi}^{(k)} \rangle + 2\alpha^{(k)} \langle B \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{g}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + 2\gamma^{(k)} \langle B \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{h}^{(k)} \rangle + [\alpha^{(k)}]^2 \langle B \vec{g}^{(k)}, B \vec{g}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + 2\alpha^{(k)}\gamma^{(k)} \langle B \vec{g}^{(k)}, B \vec{h}^{(k)} \rangle + [\gamma^{(k)}]^2 \langle B \vec{h}^{(k)}, B \vec{h}^{(k)} \rangle \quad (2.75)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z^{(k+1)} &= \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{\Phi}^{(k)} \rangle + \alpha^{(k)} \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{g}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + \gamma^{(k)} \langle A \vec{\Phi}^{(k)}, B \vec{h}^{(k)} \rangle + \alpha^{(k)} \langle A \vec{g}^{(k)}, B \vec{\Phi}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + [\alpha^{(k)}]^2 \langle A \vec{g}^{(k)}, B \vec{g}^{(k)} \rangle + \alpha^{(k)}\gamma^{(k)} \langle A \vec{g}^{(k)}, B \vec{h}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + \gamma^{(k)} \langle A \vec{h}^{(k)}, B \vec{\Phi}^{(k)} \rangle + \alpha^{(k)}\gamma^{(k)} \langle A \vec{h}^{(k)}, B \vec{g}^{(k)} \rangle \\
 &\quad + [\gamma^{(k)}]^2 \langle A \vec{h}^{(k)}, B \vec{h}^{(k)} \rangle \quad (2.76)
 \end{aligned}$$

D'autre part, des tests numériques ont montré qu'il est préférable d'alterner des ensembles d'itérations libres (par la méthode inversée des puissances) et des ensembles d'itérations avec calcul de paramètres de surrelaxation. Les itérations accélérées excitent des modes non fondamentaux du problème aux valeurs propres. Les itérations libres permettent d'éliminer ces modes de la solution. Par défaut dans le code TRIVAC-3 on utilise des ensembles de trois itérations libres suivies de trois

itérations accélérées. Chaque itération accélérée comporte les étapes suivantes :

1. Calcul de la valeur propre $\lambda^{(k)}$ par l'équation (2.68) ;
2. Calcul du gradient $\vec{g}^{(k)}$ par l'équation (2.61) ;
3. Calcul des paramètres de surrelaxation $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ par les équations (2.74),(2.75) et (2.76) ;
4. Calcul d'un estimé amélioré de la solution par l'équation (2.60).

2.6 RÉSOLUTION ADI DU PROBLÈME MONOCINÉTIQUE

2.6.1 Introduction

L'expérience a montré^[22] que les matrices issues de la discrétisation d'équations différentielles contiennent une fraction d'éléments non nuls très petite devant le nombre total d'éléments surtout pour des calculs tridimensionnels. On obtient alors des matrices dites "creuses", ce qui conduit à stocker et à manipuler un très grand nombre de zéros au cours du calcul, ce qui aura pour conséquence d'augmenter le temps de résolution.

La méthode ADI développée à l'origine par Peaceman et Rachford en 1955^[23], vise à remédier à cette situation et ce en exploitant l'interchangeabilité des axes le long de chaque direction.

Nous verrons plus loin comment est appliquée cette méthode dans le code TRIVAC-3. Mais auparavant, il faut noter que la résolution du système matriciel

généralisé lors de l'étape de discrétisation s'effectue dans le cas du module Trivac par la méthode préconditionnée des puissances avec une accélération variationnelle des itérations. Le préconditionnement utilisé est de type ADI.

2.6.2 Méthode préconditionnée des puissances

C'est une nouvelle variante de la méthode des puissances exposée au paragraphe précédent qui permet une résolution approchée des systèmes linéaires sans pour autant compromettre la convergence du processus itératif global.

L'idée de base de la méthode préconditionnée des puissances consiste à modifier le système matriciel (2.57) en le multipliant par une matrice de préconditionnement M :

$$M A \vec{\Phi} + \lambda M B \vec{\Phi} = \vec{0} \quad (2.77)$$

Notons que le choix de la matrice M est important pour s'assurer de la convergence de la méthode. En général, on utilisera une matrice respectant la condition suivante :

$$I - M A = R \simeq 0 \quad (2.78)$$

où I et 0 sont respectivement la matrice identité et la matrice nulle d'ordre K . Le cas particulier où cette condition est respectée correspond à la méthode inversée des puissances.

Reprenons l'équation (2.57) où l'on a posé $\vec{x}^{(k)} = A^{-1} B \vec{\Phi}^{(k)}$ le système linéaire devient $A \vec{x}^{(k)} = \vec{b}^{(k)}$, où $\vec{b}^{(k)} = B \vec{\Phi}^{(k)}$.

Comme nous l'avons vu auparavant, la solution peut être obtenue par élimination de Gauss ou par une factorisation de Cholesky, mais ces approches conduisent généralement à manipuler des matrices contenant plusieurs zéros.

Une méthode itérative typique consiste à déterminer une suite $\{\bar{x}^{(k,j)}; j = 1, \infty\}$ telle que :

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \bar{x}^{(k,j)} = \bar{x}^{(k)}$$

Usuellement le calcul de $\bar{x}^{(k,j+1)}$ nécessite la définition de la matrice de préconditionnement M et est basé sur la formule de récurrence suivante :

$$\bar{x}^{(k,j+1)} = M \bar{b}^{(k)} + \{I - M A\} \bar{x}^{(k,j)} \quad (2.79)$$

La convergence de (2.79) vers la solution asymptotique $\bar{x}^{(k,\infty)}$, est obtenue par la donnée d'une valeur initiale $\bar{x}^{(k,1)}$, on obtient alors :

$$\bar{x}^{(k,j+1)} = \{I - R^j\} A^{-1} \bar{b}^{(k)} + R^j \bar{x}^{(k,1)} \quad (2.80)$$

Ce qui implique que la convergence sera garantie pour une matrice de préconditionnement définie de la façon suivante :

$$\lim_{j \rightarrow \infty} R^j = \lim_{j \rightarrow \infty} (I - M A)^j = 0 \quad (2.81)$$

La condition (2.81) sera satisfaite si la norme de la matrice résiduelle R est inférieure à l'unité.

Admettons maintenant que le vecteur initial $\bar{x}^{(k+1,1)}$ soit égale à la valeur du flux normalisé à l'itération externe k précédente :

$$\bar{x}^{(k+1,1)} = -\frac{1}{\lambda^{(k)}} \bar{\Phi}^{(k)} \quad (2.82)$$

Le flux de neutron à l'itération externe ($k+1$) sera obtenu à partir de $\vec{x}^{(k+1,j+1)}$ après J itérations internes on aura alors :

$$\begin{aligned}
 \vec{\Phi}^{(k+1)} &= -\lambda^{(k)} \vec{x}^{(k+1,J+1)} \\
 &= -\lambda^{(k)} \left\{ (I - R^J) A^{-1} B \vec{\Phi}^{(k)} - \frac{1}{\lambda^{(k)}} R^J \vec{\Phi}^{(k)} \right\} \\
 &= \vec{\Phi}^{(k)} - M^{(J)} \{ A \vec{\Phi}^{(k)} + \lambda^{(k)} B \vec{\Phi}^{(k)} \}
 \end{aligned} \tag{2.83}$$

où $M^{(J)}$ est la matrice de préconditionnement équivalente obtenue après J itérations.

On peut la calculer à partir de :

$$M^{(J)} = (I - R^J) A^{-1} \tag{2.84}$$

et les trois premières valeurs de cette matrice sont :

$$\begin{aligned}
 M^{(1)} &= M, \\
 M^{(2)} &= (2I - M A) M, \\
 M^{(3)} &= [3I - (3I - M A) M A] M.
 \end{aligned}$$

Les matrices résiduelles associées sont égales à R , R^2 et R^3 respectivement. Ceci implique que l'erreur diminuera avec chaque itération interne supplémentaire.

L'équation (2.83) représente la formule de récurrence de base gouvernant la méthode préconditionnée des puissances. À la limite on a $R^\infty = 0$, et on retrouve alors l'équation (2.58) de la méthode inversée des puissances. Il reste maintenant à montrer que la méthode préconditionnée des puissances converge vers la solution fondamentale de l'équation (2.57), quand la matrice résiduelle ne s'annule pas.

2.6.3 Convergence de la méthode préconditionnée des puissances

Dans le contexte de la méthode préconditionnée des puissances, l'algorithme (2.58) est remplacé par :

$$\begin{aligned} \vec{\Phi}^{(1)} & \text{ donnée} \\ \vec{\Phi}^{(k+1)} & = \vec{\Phi}^{(k)} - M^{(J)} \{ A \vec{\Phi}^{(k)} + \lambda^{(k)} B \vec{\Phi}^{(k)} \} ; k > 1 \end{aligned} \quad (2.85)$$

La solution requise est l'harmonique fondamentale ($l = 1$) du système aux valeurs propres suivant :

$$\mu_l \vec{v}_l + A^{-1} B \vec{v}_l = 0 ; l = 1, L \quad (2.86)$$

En vertu des propriétés de la matrice $A^{-1}B$ on peut montrer que :

1. Il existe une seule valeur propre réelle et positive, μ_1 , la plus grande en valeur absolue qui est égal au facteur de multiplication effectif du réacteur :

$$K_{\text{eff}} = \mu_1 > |\mu_2| \geq |\mu_3| \geq \dots \geq |\mu_L| \quad (2.87)$$

2. Le vecteur propre correspondant à la valeur propre μ_1 est unique, positif et représente le flux de neutrons dans le réacteur :

$$\vec{\Phi} = \vec{v}_1 \quad (2.88)$$

La méthode inversée des puissances converge linéairement vers la solution fondamentale, avec une constante de convergence asymptotique (ACC : Asymptotic Convergence Constant) égale au rapport de dominance de la matrice itérante $A^{-1}B$.

En général pour les cas nécessitant la méthode préconditionnée des puissances, ACC est estimée à partir de la formule suivante :

$$ACC = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\vec{\Phi}^{(k+2)} - \vec{\Phi}^{(k+1)}\|}{\|\vec{\Phi}^{(k+1)} - \vec{\Phi}^{(k)}\|} \quad (2.89)$$

où $\|\vec{\Phi}^{(k)}\|$ représente la norme du flux estimé à la $k^{\text{ième}}$ itération.

Considérons la $k^{\text{ième}}$ itération de la méthode des puissances, qui correspond à la valeur du flux quasi-convergé. Dans ce cas, la valeur propre a aussi convergé et le flux estimé à la $k^{\text{ième}}$ itération peut être calculé à l'aide des deux premiers vecteurs propres du spectre $\{\vec{v}_l; l = 1, L\}$:

$$\begin{aligned} K_{\text{eff}}^{(k)} &\cong \mu_1 \\ \vec{\Phi}^{(k)} &\cong \vec{v}_1 + c_2 \vec{v}_2 \quad \text{si } k \gg 1 \end{aligned} \quad (2.90)$$

Le flux estimé à la $(k+1)^{\text{ième}}$ itération est obtenu en substituant l'équation (2.90) dans la formule de récurrence (2.85) :

$$\vec{\Phi}^{(k+1)} \cong \vec{\Phi}^{(k)} - c_2 M^{(J)} \left\{ A + \frac{1}{\mu_1} B \right\} \vec{v}_2 \quad (2.91)$$

$$\cong \vec{v}_1 + c_2 \left\{ \frac{\mu_2}{\mu_1} I + \left(1 - \frac{\mu_2}{\mu_1} \right) R^J \right\} \vec{v}_2 \quad (2.92)$$

où on a utilisé l'équation (2.84).

Enfin, substituons l'équation (2.92) dans l'équation (2.85) afin d'obtenir la valeur du flux à l'itération $(k+2)$:

$$\begin{aligned} \vec{\Phi}^{(k+2)} &\cong \vec{\Phi}^{(k+1)} - c_2 M^{(J)} \left\{ A + \frac{1}{\mu_1} B \right\} \\ &* \left\{ \frac{\mu_2}{\mu_1} I + \left(1 - \frac{\mu_2}{\mu_1} \right) R^J \right\} \vec{v}_2 \end{aligned} \quad (2.93)$$

Maintenant évaluons les normes apparaissant dans la définition de ACC à l'aide des équations (2.91) et (2.93) :

$$\begin{aligned} \|\vec{\Phi}^{(k+1)} - \vec{\Phi}^{(k)}\| &\cong \left\| c_2 M^{(J)} \left\{ A + \frac{1}{\mu_1} B \right\} \vec{v}_2 \right\| \\ \|\vec{\Phi}^{(k+2)} - \vec{\Phi}^{(k+1)}\| &\leq \left\| c_2 M^{(J)} \left\{ A + \frac{1}{\mu_1} B \right\} \vec{v}_2 \right\| \\ &\quad * \left\| \frac{\mu_2}{\mu_1} I + \left(1 - \frac{\mu_2}{\mu_1} \right) R^J \right\| \end{aligned}$$

ce qui donne :

$$ACC \leq \frac{|\mu_2|}{\mu_1} + \left| 1 - \frac{\mu_2}{\mu_1} \right| \|R^J\| \quad (2.94)$$

Si on revient à la méthode inversée des puissances, l'équation (2.94) se simplifie et donne $ACC = |\mu_2| / \mu_1$, ce qui montre que ACC est bien égale au rapport de dominance de la matrice itérante.

La méthode préconditionnée des puissances convergera correctement si ACC est inférieure à l'unité, et l'équation (2.94) montre que cette condition sera satisfaite si la norme de la matrice résiduelle est petite devant 1. Dans tous les cas la méthode préconditionnée des puissances convergera plus lentement que la méthode inversée des puissances.

Dans les cas où la norme de la matrice résiduelle est petite devant 1, on peut remarquer que la méthode préconditionnée des puissances convergera correctement quelque soit le nombre d'itérations internes utilisé.

2.6.4 Accélération de la convergence

Comme pour le problème direct on utilise là aussi une technique d'accélération variationnelle par symétrisation avec deux paramètres de surrelaxation $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$.

L'équation (2.85) devient :

$$\vec{\Phi}^{(k+1)} = \vec{\Phi}^{(k)} + \alpha^{(k)} \left\{ \vec{g}^{(k)} + \beta^{(k)} (\vec{\Phi}^{(k)} - \vec{\Phi}^{(k-1)}) \right\} \quad (2.95)$$

Et le vecteur gradient défini comme suit :

$$\vec{g}^{(k)} = -M^{(J)} \{ A \vec{\Phi}^{(k)} + \lambda^{(k)} B \vec{\Phi}^{(k)} \} \quad (2.96)$$

Pour le calcul des paramètres $\alpha^{(k)}$ et $\beta^{(k)}$ la procédure est identique à celle exposée pour le problème direct.

2.6.5 La méthode ADI

Pour le cas hexagonal on a développé une méthode ADI avec quatre axes. Chaque matrice A_{gg} subit un "Splitting" de la forme suivante :

$$A_{gg} = P_w U_{gg} P_w^T + P_w W_{gg} P_w^T + P_x X_{gg} P_x^T + P_y Y_{gg} P_y^T + P_z Z_{gg} P_z^T \quad (2.97)$$

où :

U_{gg} : matrice contenant les éléments diagonaux de A_{gg} .

$W_{gg}, X_{gg}, Y_{gg}, Z_{gg}$: ce sont les matrices contenant les termes de couplage de la matrice A_{gg} le long de chaque axe.

P_w, P_x, P_y, P_z : ce sont les matrices de permutation qui nous permettent d'avoir une structure de matrice bande pour les matrices W_{gg}, X_{gg}, Y_{gg} et Z_{gg} .

Ce type de splitting nous permet de calculer les matrices W_{gg}, X_{gg}, Y_{gg} et Z_{gg} afin d'obtenir une structure de bande compatible avec la technique du stockage profilé. Ceci bien sûr n'est pas possible avec tous les algorithmes de discrétisation. Trois classes d'algorithmes de discrétisation sont compatibles avec la méthode ADI et permettent donc de réaliser le splitting : les différences finies classiques et centrées, quelques méthodes nodales et enfin la méthode de collocation variationnelle.

La factorisation incomplète ci-dessous est basée sur la définition de quatre matrices symétriques à bandes diagonales :

$$\begin{aligned}\widetilde{W}_{gg} &= W_{gg} + P_w^T U_{gg} P_w \\ \widetilde{X}_{gg} &= X_{gg} + P_x^T U_{gg} P_x \\ \widetilde{Y}_{gg} &= Y_{gg} + P_y^T U_{gg} P_y \\ \widetilde{Z}_{gg} &= Z_{gg} + P_z^T U_{gg} P_z\end{aligned}$$

Le splitting ADI conduit à l'approximation suivante :

$$A_{gg} \simeq [P_w \widetilde{W}_{gg} P_w^T][U_{gg}^{-1} P_x \widetilde{X}_{gg} P_x^T][U_{gg}^{-1} P_y \widetilde{Y}_{gg} P_y^T][U_{gg}^{-1} P_z \widetilde{Z}_{gg} P_z^T] \quad (2.98)$$

où on a utilisé les relations suivantes :

$$\begin{aligned}P_w P_w^T &= P_w^T P_w = I \\ P_x P_x^T &= P_x^T P_x = I \\ P_y P_y^T &= P_y^T P_y = I \\ P_z P_z^T &= P_z^T P_z = I\end{aligned}$$

La matrice de préconditionnement monocinétique est alors définie comme suit :

$$M_{gg} = [P_z \widetilde{Z}_{gg}^{-1} P_z^T U_{gg}][P_y \widetilde{Y}_{gg}^{-1} P_y^T U_{gg}][P_x \widetilde{X}_{gg}^{-1} P_x^T U_{gg}][P_w \widetilde{W}_{gg}^{-1} P_w^T] \quad (2.99)$$

Les quatre matrices \widetilde{W}_{gg} , \widetilde{X}_{gg} , \widetilde{Y}_{gg} et \widetilde{Z}_{gg} ne sont pas inversées afin d'éviter le phénomène de remplissage. Une approche intéressante consiste à les factoriser à la première itération externe. Ce processus ne conduit pas au phénomène de remplissage et les facteurs de Cholesky remplaceront les matrices originales. Les systèmes linéaires résultants sont de la forme $\vec{x} = \widetilde{X}_{gg}^{-1} \vec{b}$ qui peuvent être résolus par simple substitution arrière ou avant.

CHAPITRE 3

RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Dans ce chapitre on présentera une description du code TRIVAC-3, sa structuration informatique ainsi que les organigrammes des principales phases. Aussi nous allons étudier quelques tests numériques ainsi qu'une description et traitement du réacteur SLOWPOKE de l'École Polytechnique.

3.1 STRUCTURATION INFORMATIQUE DU CODE TRIVAC-3

3.1.1 Introduction

Le code TRIVAC-3 dont le dessein est de faire partie d'une chaîne de calcul de design des réacteurs, a été conçu dans le but de répondre aux exigences sans cesse croissantes de calculs neutroniques de cœurs à géométries variables.

Le code TRIVAC-3 est écrit en FORTRAN 77. La presque totalité des sous-programmes formant TRIVAC-3 sont en FORTRAN hormis celui de l'allocation dynamique de la mémoire, et d'autres d'algèbre matricielle qui sont en assembleur IBM (ceci ne permet qu'une économie de temps de l'ordre de 3%) [9]. Signalons au passage que la version actuelle de TRIVAC-3 est vectorisable.

La nouvelle version du code TRIVAC appelée TRIVAC-3 diffère de l'ancienne version TRIVAC-2 par la structuration informatique, par le module de lecture de

données et bien sûr par le type de géométrie puisque la nouvelle version permet de traiter les géométries hexagonales.

Le code TRIVAC-3 est constitué de deux modules : Bivac et Trivac. Le premier, résoud le système matriciel (2.57) issu de la discrétisation par la méthode inversée des puissances sans faire de "Splitting" de la matrice A . Le deuxième, utilise la méthode ADI qui fait un "Splitting" de la matrice A et utilise la méthode préconditionnée des puissances pour la résolution.

Signalons aussi que la version actuelle du code ne permet de traiter que les cas à un ou deux groupes d'énergie. De plus, l'accélération des neutrons du groupe thermique vers le groupe rapide n'est pas prise en compte.

Enfin, il permet aussi de partager le même format de données avec le code de transport DRAGON^[24] en cours de développement au département, facilitant ainsi aux usagers le passage de l'un vers l'autre.

3.1.2 Description

La figure (3.1) donne l'organigramme thématique de TRIVAC-3. Il se compose de cinq phases dont les fonctions sont les suivantes :

- la PHASE1 : consiste à lire ou à récupérer les données géométriques (préalablement stockées sur un fichier XSM). Puis on fait appel aux modules de calcul Bivac ou Trivac. C'est aussi lors de cette phase que l'on effectue le calcul de la géométrie et la numérotation des inconnues. La figure (3.2) donne l'organigramme thématique de cette phase.

- la PHASE2 : discrétise et assemble les matrices des systèmes. Puis elle résout les systèmes matriciels en calculant la valeur propre et les vecteurs propres. La figure (3.3) donne l'organigramme thématique de cette phase.
- la PHASE3 : est relative au calcul de perturbation (elle n'est pas encore opérationnelle dans la version actuelle de TRIVAC-3).
- la PHASE4 : effectue des calculs quasistatiques (elle non plus, n'est pas encore opérationnelle dans la version actuelle de TRIVAC-3).
- la PHASE5 : est consacrée aux sorties des résultats.

Au cours de ce travail, notre objectif était de modifier et reprogrammer les deux premières phases ainsi que la dernière afin de tenir compte des géométries hexagonales.

Mentionnons aussi que l'objectif du module Bivac est de faire de l'équivalence transport-diffusion^[25], par conséquent il sera intégré au code de transport DRAGON en cours de développement actuellement.

Notons enfin que le code TRIVAC-3 est muni d'utilitaires servant soit à l'allocation dynamique de la mémoire (SETARA et RLSARA), soit au stockage et à l'archivage d'informations en cours d'exécution (LCM et XSM).

3.2 TRAITEMENT DE QUELQUES BENCHMARKS

Pour la qualification de TRIVAC-3 nous avons étudié quelques benchmarks à deux groupes d'énergie pour des géométries hexagonales. Notre premier benchmark

est un calcul test fait par le code CRONOS^[26] à deux dimensions. Nous avons défini et calculé à partir de celui-ci un deuxième test à trois dimensions. Le troisième test est un petit réacteur HTGR (High Temperature Gas Reactor), étudié à la référence [8], là aussi le test est à deux dimensions. Nous avons à partir des données de ce dernier test étudié le comportement d'un cœur hétérogène et ce en simulant le mouvement de barres de contrôle.

Lorsque l'on désire effectuer la qualification d'une technique de discrétisation en neutronique, il n'est généralement pas suffisant de vérifier la convergence du facteur de multiplication effectif K_{eff} . Il faudra également établir des statistiques de précision de la carte de puissance du réacteur. Dans tous les cas étudiés, une solution de référence fut établie à l'aide d'un calcul en différence finies centrées (D.F.C.) avec 96 points par hexagone. Les puissances de référence P_i^* de chaque assemblage ou de chaque canal sont alors obtenues par la formule suivante :

$$P_i^* = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} d^3r \left\{ H_1(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) + H_2(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) \right\}$$

où V_i représente le volume de l'assemblage i , $H_j(\vec{r}) = \nu \Sigma_{fj}(\vec{r})$ et $\phi_j(\vec{r})$ le flux neutronique et où j désigne le groupe d'énergie.

Par la suite, ces puissances sont comparées à celles provenant d'un calcul moins précis et les erreurs maximales et moyennes sont calculées par :

$$\epsilon_{\text{max}} = \max_i \left\{ \frac{|P_i - P_i^*|}{P_i^*} \right\}$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{V_{\text{cœur}}} \sum_i V_i \frac{|P_i - P_i^*|}{P_i^*}$$

3.2.1 Premier benchmark

Le premier test représente un réacteur de petite taille composé de 37 hexagones, parmi lesquels 19 représentant le cœur. Le reste étant considéré comme réflecteur. Le côté de l'hexagone est de 13.044 cm. Le tableau (3.1) donne les sections efficaces à deux groupes d'énergie et la figure (3.4) donne le schéma de ce réacteur. La comparaison avec le code CRONOS est faite à deux dimensions uniquement, car les seuls résultats dont on dispose sont issus d'un calcul à deux dimensions utilisant la méthode des éléments finis (E.F.). Notons que les calculs CRONOS, ont été effectués sur CRAY (1 mot = 64 bits), alors que nos calculs ont été effectués sur un IBM ES-9000 (1 mot = 32 bits). En premier lieu, cette étude va nous permettre de tirer certaines conclusions quant aux options bidimensionnelles de TRIVAC-3. Plus tard nous allons adopter d'autres stratégies pour étudier des cas tridimensionnels. Notons aussi que la condition frontière imposée radialement est celle d'un flux nul.

L'analyse des résultats présentés au tableau (3.2) montre qu'il y a une bonne concordance entre les résultats de TRIVAC-3 et ceux de CRONOS. On peut noter aussi que les résultats par D.F.C. tendent asymptotiquement vers la solution exacte quand le nombre d'inconnues par hexagone augmente comme le montre la figure (3.6). Une comparaison des cartes des facteurs de puissance est donnée à la figure (3.5).

Nous avons aussi comparé les résultats des modules Bivac et Trivac. Sachant que ces modules diffèrent par la méthode de résolution, il est intéressant de voir les performances de chacun d'eux en termes de nombre d'itérations et de temps de

calcul. Le tableau (3.3) donne les résultats de cette étude, il apparaît clairement un net avantage au profit de Bivac où dans certains cas le temps de calcul est de 50% celui de Trivac.

Nous avons aussi effectué un calcul tridimensionnel avec un albédo égale à 1 axialement afin de vérifier la cohérence des calculs 3D, puis nous avons comparé les résultats avec ceux obtenus par un calcul bidimensionnel. Pour cela nous avons défini un réacteur de hauteur 1m et dont la configuration radiale est la même que précédemment. Nous avons volontairement choisi trois plans axiaux dont les hauteurs sont de 10, 30 et 60 cm afin d'éviter toute symétrie. Le tableau (3.4) montre les résultats de cette étude, où on peut noter la concordance des deux approches.

3.2.2 Deuxième benchmark

En se basant sur les données précédentes nous avons défini un réacteur ayant la même configuration radiale que celle du premier test et dont la description axiale est donnée à la figure (3.7). Cette étude nous permettra de statuer sur la convergence d'un calcul tridimensionnel. Nous avons pour cela étudié toutes les discrétisations du module Trivac. Le tableau (3.5) donne les résultats de ces calculs. Notons les écarts des calculs en E.F. ; ceci est dû à l'utilisation de la quadrature de Gauss-Lobatto qui est associée dans notre cas à des fonctions de représentation linéaires. Quant aux calculs en D.F.C., on peut dire que la convergence est bien établie et il suffit pour cela de se référer à la figure (3.8).

3.2.3 Troisième benchmark

Ce benchmark traite trois configurations de cœur hétérogènes. Il s'agit d'un petit réacteur HTGR dont le schéma est donné à la figure (3.9). Les deux premières configurations représentent le cas où toutes les barres de contrôle sont insérées. Celles-ci occupent alors les éléments contenant la composition 1. La troisième configuration représente le cas où toutes les barres sont extraites. Les tableaux (3.6), (3.7) et (3.8) donnent les propriétés nucléaires des trois configurations. Pour faciliter l'exposé nous les désignerons par SET1, SET2 et SET3 respectivement. Le côté de chaque hexagone est égale à 20 cm. Nous allons comparer nos résultats avec des calculs effectués à l'aide du code BUG-180 de General Atomic utilisant la méthode des différences finies classiques avec 19 points par hexagone (les détails de ces calculs sont donnés à la référence [8]).

Les tableaux (3.9), (3.10) et (3.11) présentent les résultats de cette étude. Là encore on peut remarquer la convergence des calculs en différences finies centrées ce qui est illustré par les figures (3.10), (3.11) et (3.12). Nous avons aussi pour les deux dernières configurations donné une comparaison de la carte des facteurs de puissance pour cela on peut consulter les figures (3.13), (3.14).

3.2.4 Quatrième benchmark

Ce benchmark est basé sur les données précédentes, nous avons conservé la même configuration radiale du réacteur HTGR, puis nous avons étudié un cas tridimensionnel. La hauteur du réacteur a été fixée à 5 m. Nous avons défini

10 plans, chacun ayant une hauteur constante de 50 cm. À l'aide des propriétés nucléaires du SET2 et du SET3, nous avons simulé un mouvement de barres de contrôle. Les conditions frontières sont celles d'un flux nul aussi bien radialement qu'axialement. Tout d'abord, on a étudié les deux configurations extrêmes à savoir le cas où toutes les barres sont extraites et celui où elles sont toutes insérées. Pour cela nous avons testé toutes les options en différences finies centrées. Les résultats de ce calcul sont donnés aux tableaux (3.12) et (3.13). La tendance déjà observée au niveau des calculs 2D reste la même que pour un calcul 3D.

Quant au mouvement des barres, nous avons simulé une insertion de barres avec des pas de 50 cm. Nous avons pour cette étude restreint le nombre de points par hexagone à 1, 6 et 24 sachant que le comportement sera identique même lorsque le nombre de points par hexagone augmente. La figure (3.17) donne l'évolution du facteur de multiplication effectif en fonction de la position des barres.

3.3 DESCRIPTION ET TRAITEMENT DU RÉACTEUR

SLOWPOKE

3.3.1 Introduction

Pour le traitement du réacteur SLOWPOKE on a utilisé sur les données et l'étude effectuée sur celui-ci à la référence [27]. Les diverses propriétés nucléaires ont été obtenues à l'aide d'un calcul de cellule avec le code de transport WIMS-CRNL^[28]. Tout d'abord nous allons donner une description générale du réacteur

SLOWPOKE, pour plus de détails il est conseillé de se reporter à la référence ci-dessus. Nous n'avons pas la prétention de fournir un calcul précis du réacteur avec des résultats qui se rapprocheraient des données expérimentales. Loin de là, et ce à cause des propriétés nucléaires dont nous disposons qui sont entachées d'erreurs^[29] puisque la version de Wims utilisée comportait des erreurs. Néanmoins, notre objectif est de comparer deux options de calcul du code TRIVAC-3. En effet, dans la référence ci-dessus on a utilisé un calcul en géométrie RZ, alors que dans notre cas il s'agira d'un calcul tridimensionnel en géométrie hexagonale. Nous analyserons les résultats dans cette optique. À cette fin nous avons défini une configuration géométrique identique pour les deux calculs.

3.3.2 Description du réacteur SLOWPOKE

Le nom du réacteur SLOWPOKE est un acronyme pour "*Safe LOW POver Critical Experiment*". Les caractéristiques principales de ce réacteur sont données à la référence [30].

La figure (3.18) montre une coupe radiale du cœur du réacteur SLOWPOKE. Il comprend deux composantes : les éléments de combustible et la structure qui en assure la charpente (cage du combustible). Le cœur comporte 342 sites d'éléments combustible dont 296 sont occupés. Le pas entre les centres de deux crayons voisins est pris égale à 1.104 cm. Au centre du cœur on trouve le guide de la barre de contrôle. À la périphérie du cœur on a un réflecteur en Béryllium et l'ensemble baigne dans une piscine d'eau.

3.3.3 Traitement du réacteur SLOWPOKE

Dans le calcul en géométrie RZ les dimensions du réacteur tant sur le plan radial qu'axial sont prises égales à 71.12 cm. Bien entendu du fait de la symétrie radiale du réacteur seule la moitié de celui-ci a été considérée. Étant donné que le pas du réseau est très petit, il est évident qu'une description fine du réacteur va générer un nombre d'hexagones très élevé. Se basant sur les résultats de la première étude, il nous est apparu que le flux devient nul au delà d'un rayon de 30 cm. Ce constat nous a permis de limiter notre description à cette distance. Et afin de valider cette hypothèse nous avons effectué une étude où l'on faisait varier l'épaisseur de la zone contenant l'eau. C'est ainsi que l'on est passé d'un rayon équivalent du réacteur de 25 cm à 30 cm et ce en augmentant progressivement le nombre de couronnes d'eau. La figure (3.19) montre le résultat de cette étude, où l'on remarque la convergence du facteur de multiplication effectif. Ceci dit on se retrouve quand même avec 2743 hexagones pour tout le réacteur par plan, sachant qu'axialement nous avons 9 plans on se retrouve avec 24687 mailles. La figure (3.20) donne le schéma du tiers du réacteur ainsi que sa description axiale. La région 1 représente le combustible, la 2 le réflecteur, la 3 l'eau et enfin la 4 les sites inoccupés. Le tableau (3.14) donne les propriétés nucléaires adoptées pour nos calculs. La condition frontière de flux nul était la seule appliquée dans nos calculs. Le maillage axial est donné au tableau (3.15).

Avant d'aborder les résultats, mentionnons que compte tenu de la taille du problème et aussi des dimensions très petites de l'hexagone, les calculs avec un

nombre de points par hexagone supérieur à 1 n'ont pas convergé. Le tableau (3.16) donne les résultats de cette étude. Il s'ensuit donc un gain substantiel allant jusqu'à 47 mk suite à l'utilisation d'une géométrie hexagonale.

CONCLUSION

L'objectif du présent travail était de proposer une technique de discrétisation à la fois compatible et cohérente avec un algorithme de résolution ADI pour une géométrie hexagonale. Nous avons orienté notre recherche selon deux approches, d'une part la méthode de collocation nodale et d'autre part la méthode de collocation variationnelle. Dès le début, il s'est avéré que l'augmentation de l'ordre dans l'une ou l'autre des deux méthodes était sujette à des contraintes liées au fait que dans un cas, l'utilisation des polynômes de Legendre n'était pas évidente, et dans l'autre, la numérotation des inconnues devenait très complexe. Pour cette raison nous avons limité notre étude à l'ordre 1. Ce qui se traduit dans la première approche par la méthode de différences finies centrées (D.F.C.) et dans la seconde par la méthode des éléments finis (E.F.) linéaires. Bien qu'en ayant limité dans le cas des D.F.C. l'ordre à 1, nous avons néanmoins réussi à faire un "Splitting" au niveau de l'hexagone, ainsi nous avons étudié respectivement 1, 6, 24, 54 et 96 points par hexagone. Ceci bien sûr a eu un bon impact sur l'augmentation de la précision. Quant à la deuxième approche, notre marge de manœuvre était beaucoup plus restreinte. On a donc proposé deux axes. Le premier considère l'hexagone en tant qu'élément de base et nous avons pour cela fait appel à une technique suggérée par Wachspress à savoir que les fonctions de base associées à ce type d'éléments sont rationnelles. Dans le second, l'hexagone est divisé en 6

triangles équilatéraux, l'élément de base est alors triangulaire. Ces techniques de discrétisation ont été appliquées aux deux modules Bivac et Trivac. Pour ce dernier nous avons généralisé l'algorithme de résolution ADI afin qu'il puisse traiter les géométries hexagonales. Par exemple dans le cas cartésien, il suffisait de deux axes pour traiter une géométrie bidimensionnel alors qu'il en faut trois dans le cas hexagonal. Pour une géométrie tridimensionnelle, il en faut trois pour le premier et quatre pour le second. Dans le cas des D.F.C., nous avons réussi à proposer un algorithme de numérotation, qui associé à la méthode ADI permet l'obtention de matrices de systèmes dont les largeurs de bandes ne dépassent pas 2, ce qui se traduit par une importante économie d'espace mémoire, car on évite ainsi de stocker des zéros lors de l'assemblage matriciel, et aussi une grande rapidité lors de la décomposition de ces matrices par la méthode de Cholesky.

Pour la qualification du travail, nous avons étudié quelques benchmarks. Tout d'abord, il faut se rappeler que la version actuelle du code ne permet de traiter qu'un ou deux groupes d'énergie. Et que pour ce dernier cas on ne tient pas compte de l'accélération d'un neutron du groupe thermique vers le groupe rapide. Rien qu'avec ces deux contraintes, le nombre de benchmarks traitant des géométries hexagonales et obéissant aux critères cités ci-dessus est presque nul. En effet, la littérature abonde de tests multigroupe car les réacteurs dont les géométries sont de type hexagonal, favorisent le durcissement de spectre et de ce fait imposent un découpage plus fin du domaine énergétique. Ceci n'est pas vrai dans le cas des réacteurs PWR (Pressurized Water Reactor) ou des CANDU (Canada Duterium

Uranium) où un découpage à deux groupes suffit amplement. TRIVAC, à l'origine destiné à ce type de réacteurs n'avait nullement besoin d'un formalisme multi-groupe. Mais ayant changé de vocation, force est de dire que les études à venir devraient remédier à cela. Pour nos tests, nous disposons de deux benchmarks bidimensionnels et à deux groupes d'énergie. On a adopté comme référence pour nos calculs, un calcul en D.F.C. à 96 points par hexagone. Pour les deux benchmarks, la référence était un calcul avec 19 points par hexagone, en E.F. pour le premier, et en différence finies classiques pour le second. La comparaison effectuée à deux dimensions, montre une bonne concordance de nos résultats avec ceux issus d'un autre code. On a aussi remarqué la convergence asymptotique de la solution des calculs en D.F.C.. Quant à nos résultats en E.F., il faut noter que l'utilisation de fonctions de représentation linéaires ainsi qu'une quadrature de Gauss-Lobatto à l'ordre 1, font que l'on obtient des écarts importants. Pour y remédier, il faut soit augmenter l'ordre des fonctions de représentation, soit penser à faire un "Splitting" au niveau de l'hexagone comme dans le cas des D.F.C.. Dans un cas comme dans l'autre le grand défi, est de trouver un algorithme de numérotation très performant et aussi réussir à définir un "Splitting" de la matrice du système qui lui soit compatible. Faute de benchmarks tridimensionnels, nous n'avons pas pu faire une comparaison avec d'autres codes. Néanmoins, nous avons adopté une approche qui permet de conclure quant à la convergence des tests tridimensionnels. En effet, nous avons effectué un calcul tridimensionnel en imposant un albédo égal à 1 axialement, en d'autres termes un calcul équivalent à un calcul bidimensionnel, les

résultats de ce test ont montré la cohérence de nos calculs tridimensionnels. Ceci dit il est clair que l'on ne peut pas à ce stade conclure. Nous avons donc défini à partir des deux benchmarks bidimensionnels deux tests tridimensionnels, seules les options en D.F.C. ont été utilisées et dans les deux cas la convergence a été obtenue. Enfin pour conclure nos tests nous avons effectué une étude sommaire du réacteur SLOWPOKE dans le but de comparer deux options du code TRIVAC-3. D'un côté on avait une modélisation en géométrie RZ et de l'autre en géométrie hexagonale. Les deux calculs ont utilisé la méthode des D.F.C.. Vu la taille du test, seul le calcul à 1 point par hexagone a convergé. Il découle de cette étude, que le calcul en géométrie hexagonale est nettement plus intéressant.

Tableau 3.1: Propriétés nucléaires du premier benchmark

Zones	D_1 (cm)	D_2 (cm)	$\Sigma_{r1}^{(a)}$ (cm ⁻¹)	$\Sigma_{r2}^{(b)}$ (cm ⁻¹)	$\Sigma_{1 \rightarrow 2}$ (cm ⁻¹)	$\nu \Sigma_{f1}$ (cm ⁻¹)	$\nu \Sigma_{f2}$ (cm ⁻¹)
Composition 1	1.5	0.4	0.03	0.130	0.02	0.0	0.135
Composition 2	1.5	0.4	0.03	0.085	0.02	0.0	0.135
Réflecteur	2.0	0.3	0.04	0.010	0.04	0.0	0.0

(^a) Avec : $\Sigma_{r1} = \Sigma_{a1} + \Sigma_{1 \rightarrow 2}$,
où Σ_{a1} est la section efficace macroscopique
d'absorption rapide.

(^b) Avec : $\Sigma_{r2} = \Sigma_{a2}$,
où Σ_{a2} est la section efficace macroscopique
d'absorption thermique.

Tableau 3.2: Comparaison de CRONOS et de TRIVAC-3

	$N_H^{(a)}$	$N_{tot}^{(b)}$	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
E.F.						
Intégration analytique :						
TRIVAC-3	6	54	0.96613	1823	39.8	13.3
	7	91	0.95565	775	18.6	7.3
CRONOS	7	91	0.95566	776	—	—
	19	403	0.94986	196	—	—
Quadrature de Gauss-Lobatto :						
TRIVAC-3	6	54	0.97232	2442	32.8	12.3
	7	91	0.97229	2439	29.6	11.3
CRONOS	7	91	0.97229	2439	—	—
D.F.C.						
TRIVAC-3	1	37	0.95718	928	25.5	4.6
	6	222	0.94518	-272	6.6	2.6
	24	888	0.94636	-154	2.4	1.0
	54	1998	0.94741	-49	0.8	0.3
	96	3552	0.94790	0	0	0

(a) Nombre de points par hexagone.

(b) Nombre total d'inconnues.

Tableau 3.3: Comparaison des modules Bivac et Trivac

	$N_H^{(a)}$	Bivac			Trivac			ΔK_{eff} (pcm)
		$N_{\text{iter}}^{(b)}$	K_{eff}	$T_{\text{CPU}}^{(c)}$ (s)	$N_{\text{iter}}^{(b)}$	K_{eff}	$T_{\text{CPU}}^{(c)}$ (s)	
E.F.	6	9	0.97232	0.052	15	0.97233	0.124	1
	7	15	0.97228	0.157	15	0.97229	0.189	1
D.F.C.	1	9	0.95718	0.022	9	0.95718	0.049	0
	6	15	0.94517	0.252	15	0.94518	0.320	1
	24	15	0.94635	1.716	21	0.94636	1.656	1
	54	9	0.94733	3.688	39	0.94741	6.859	8
	96	9	0.94780	8.721	45	0.94790	15.15	10

^(a) Nombre de points par hexagone.

^(b) Nombre total d'itérations.

^(c) Temps CPU comprenant : - l'assemblage,
- la décomposition $L D L^T$,
- la résolution,
- et le calcul de produits bilinéaires.

Tableau 3.4: Condition de $\beta = 1$ axialement

	$N_H^{(a)}$	K_{eff} 2D	K_{eff} 3D	ΔK_{eff} (pcm)
E.F.	6	0.97232	0.97234	2
	7	0.97229	0.97229	0
D.F.C.	1	0.95718	0.95719	1
	6	0.94518	0.94518	0
	24	0.94636	0.94639	3
	54	0.94741	0.94741	0
	96	0.94790	0.94795	5

^(a)Nombre de points par hexagone.

Tableau 3.5: Calcul tridimensionnel avec condition de flux nul axialement

	$N_H^{(a)}$	$N_{tot}^{(b)}$	$N_{iter}^{(c)}$	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)	$T_{CPU}^{(d)}$ (s)
E.F.	6	216	27	0.96574	4277	101.4	8.6	0.79
	7	364	27	0.97201	4904	69.0	9.6	1.30
D.F.C.	1	185	21	0.93210	913	26.4	3.2	0.47
	6	1110	27	0.92030	-267	22.0	2.4	3.34
	24	4440	45	0.92142	-155	2.8	0.6	24.31
	54	9990	63	0.92243	-54	1.0	0.2	87.41
	96	17760	75	0.92297	0	0	0	199.4

^(a) Nombre de points par hexagone.

^(b) Nombre total d'inconnues.

^(c) Nombre total d'itérations.

^(d) Temps CPU comprenant : - l'assemblage,
- la décomposition $L D L^T$,
- la résolution,
- et le calcul de produits bilinéaires.

Tableau 3.6: Propriétés nucléaires du troisième benchmark (SET1)

Zones	Composition 1	Composition 2	Réflecteur
D_1 (cm)	1.68350	1.47493	0.968992
D_2 (cm)	1.29702	1.14155	0.789889
Σ_{r1} (cm^{-1})	$6.07490 \cdot 10^{-3}$	$3.73399 \cdot 10^{-3}$	$4.98523 \cdot 10^{-3}$
Σ_{r2} (cm^{-1})	$1.01706 \cdot 10^{-2}$	$3.96169 \cdot 10^{-3}$	$2.96000 \cdot 10^{-4}$
$\Sigma_{1 \rightarrow 2}$ (cm^{-1})	$1.83000 \cdot 10^{-3}$	$2.25000 \cdot 10^{-3}$	$4.98000 \cdot 10^{-3}$
$\nu \Sigma_{f1}$ (cm^{-1})	$2.14326 \cdot 10^{-4}$	$3.86370 \cdot 10^{-4}$	0.0
$\nu \Sigma_{f2}$ (cm^{-1})	$3.54780 \cdot 10^{-3}$	$6.17220 \cdot 10^{-3}$	0.0

Tableau 3.7: Propriétés nucléaires du troisième benchmark (SET2)

Zones	Composition 1	Composition 2	Réflecteur
D_1 (cm)	1.68350	1.47493	0.968992
D_2 (cm)	1.29702	1.14155	0.789889
Σ_{r1} (cm^{-1})	$5.93650 \cdot 10^{-3}$	$3.58649 \cdot 10^{-3}$	$4.98523 \cdot 10^{-3}$
Σ_{r2} (cm^{-1})	$1.03000 \cdot 10^{-2}$	$4.07584 \cdot 10^{-3}$	$2.96000 \cdot 10^{-4}$
$\Sigma_{1 \rightarrow 2}$ (cm^{-1})	$1.83000 \cdot 10^{-3}$	$2.25000 \cdot 10^{-3}$	$4.98000 \cdot 10^{-3}$
$\nu \Sigma_{f1}$ (cm^{-1})	$2.14326 \cdot 10^{-4}$	$3.86370 \cdot 10^{-4}$	0.0
$\nu \Sigma_{f2}$ (cm^{-1})	$3.54780 \cdot 10^{-3}$	$6.17220 \cdot 10^{-3}$	0.0

Tableau 3.8: Propriétés nucléaires du troisième benchmark (SET3)

Zones	Composition 1	Composition 2	Réflecteur
D_1 (cm)	1.65837	1.47493	0.968992
D_2 (cm)	1.29702	1.14155	0.789889
Σ_{r1} (cm^{-1})	$2.92134 \cdot 10^{-3}$	$3.58649 \cdot 10^{-3}$	$4.98523 \cdot 10^{-3}$
Σ_{r2} (cm^{-1})	$2.36030 \cdot 10^{-3}$	$4.07584 \cdot 10^{-3}$	$2.96000 \cdot 10^{-4}$
Σ_{1-2} (cm^{-1})	$2.07000 \cdot 10^{-3}$	$2.25000 \cdot 10^{-3}$	$4.98000 \cdot 10^{-3}$
$\nu\Sigma_{f1}$ (cm^{-1})	$2.22345 \cdot 10^{-4}$	$3.86370 \cdot 10^{-4}$	0.0
$\nu\Sigma_{f2}$ (cm^{-1})	$3.62070 \cdot 10^{-3}$	$6.17220 \cdot 10^{-3}$	0.0

Tableau 3.9: Comparaison de BUG-180 et de TRIVAC-3 (SET1)

	$N_H^{(a)}$	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
BUG - 180 ^(b)	19	0.77088	-128	-	-
TRIVAC-3 E.F.	7	0.76381	-835	14.7	1.8
D.F.C.	1	0.80758	3542	30.2	5.0
	6	0.77779	563	6.2	1.1
	24	0.77326	110	1.4	0.3
	54	0.77255	39	0.6	0.03
	96	0.77216	0	0	0

^(a)Nombre de points par hexagone.

^(b)Utilise des différences finies classiques.

Tableau 3.10: Comparaison de BUG-180 et de TRIVAC-3 (SET2)

	$N_H^{(a)}$	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
BUG - 180 ^(b)	19	0.77891	-156	-	-
TRIVAC-3 E.F.	7	0.77184	-863	14.5	1.8
D.F.C.	1	0.81727	3680	29.9	4.8
	6	0.78644	597	6.1	1.1
	24	0.78165	118	1.4	0.3
	54	0.78088	41	0.6	0.04
	96	0.78047	0	0	0

^(a)Nombre de points par hexagone.

^(b)Utilise des différences finies classiques.

Tableau 3.11: Comparaison de BUG-180 et de TRIVAC-3 (SET3)

	$N_H^{(a)}$	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
BUG - 180 ^(b)	19	0.99869	184	-	-
TRIVAC-3 E.F.	7	0.99887	202	4.1	0.8
D.F.C.	1	0.98135	-1550	15.9	2.7
	6	0.99297	-388	3.6	0.6
	24	0.99554	-131	1.3	0.2
	54	0.99622	-63	0.6	0.1
	96	0.99685	0	0	0

^(a)Nombre de points par hexagone.

^(b)Utilise des différences finies classiques.

Tableau 3.12: Évolution du K_{eff} : toutes barres extraites

N_H	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
1	0.95436	1479	15.8	2.6
6	0.96563	352	3.8	0.6
24	0.96820	95	1.2	0.2
54	0.96888	27	1.4	0.3
96	0.96915	0	0	0

Tableau 3.13: Évolution du K_{eff} : toutes barres insérées

N_H	K_{eff}	ΔK_{eff} (pcm)	ϵ_{max} (%)	$\bar{\epsilon}$ (%)
1	0.79748	-3597	31.7	4.84
6	0.76739	-588	8.3	1.14
24	0.76270	-119	3.0	0.40
54	0.76185	-34	2.6	0.45
96	0.76151	0	0	0

Tableau 3.14: Propriétés nucléaires utilisées pour le calcul de SLOWPOKE

Zones	1	2	3	4
D_1 (cm)	1.196962	0.615004	0.861495	1.062168
D_2 (cm)	0.201924	0.441663	0.137803	0.177332
Σ_{r1} (cm ⁻¹)	$3.831346 \cdot 10^{-2}$	$4.896779 \cdot 10^{-3}$	$8.634758 \cdot 10^{-2}$	$4.459891 \cdot 10^{-2}$
Σ_{r2} (cm ⁻¹)	$1.038801 \cdot 10^{-1}$	$5.732398 \cdot 10^{-4}$	$1.867629 \cdot 10^{-2}$	$1.365481 \cdot 10^{-2}$
$\Sigma_{1 \rightarrow 2}$ (cm ⁻¹)	$3.476157 \cdot 10^{-2}$	$6.804988 \cdot 10^{-3}$	$8.600593 \cdot 10^{-2}$	$4.427355 \cdot 10^{-2}$
$\nu \Sigma_{f1}$ (cm ⁻¹)	$4.937038 \cdot 10^{-3}$	0.0	0.0	0.0
$\nu \Sigma_{f2}$ (cm ⁻¹)	$1.894040 \cdot 10^{-1}$	0.0	0.0	0.0

Tableau 3.15: Maillage axial du réacteur SLOWPOKE

Numéro du plan	Borne supérieure (cm)
1	16.5913
2	20.2343
3	21.1074
4	21.8592
5	36.8554
6	43.8556
7	44.3687
8	54.5287
9	71.1200

Tableau 3.16: Comparaison des facteurs de multiplication effectifs (SLOWPOKE)

	Calcul RZ	Calcul hexagonal	ΔK_{eff}
K_{eff}	1.19392	1.14625	47.67 mk

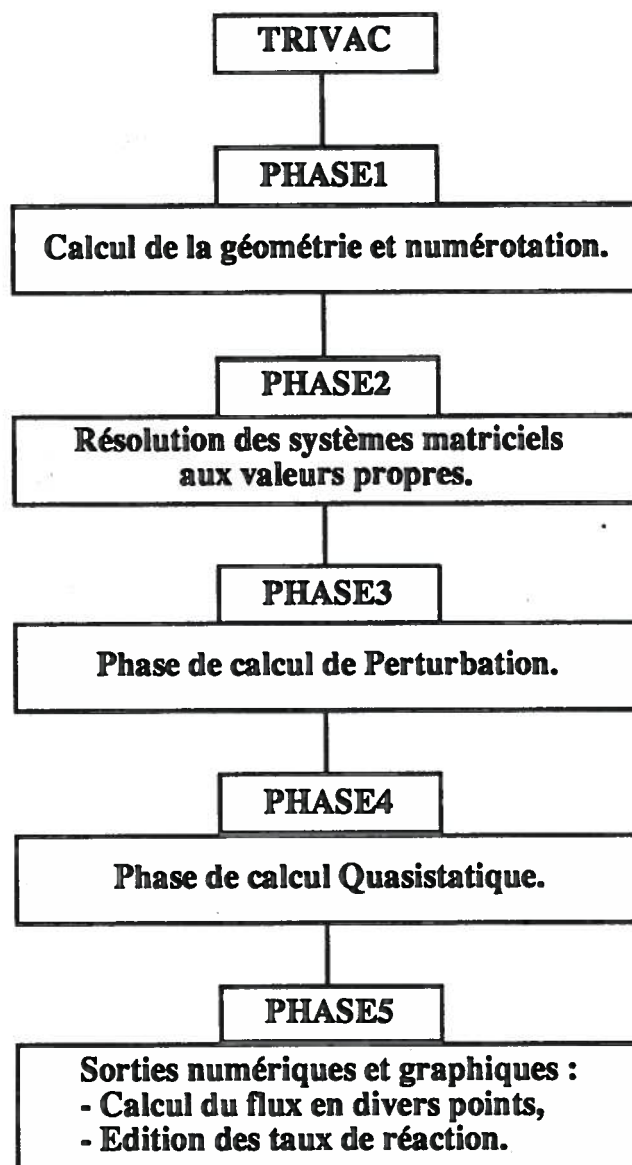


Figure 3.1: Organigramme thématique de TRIVAC-3

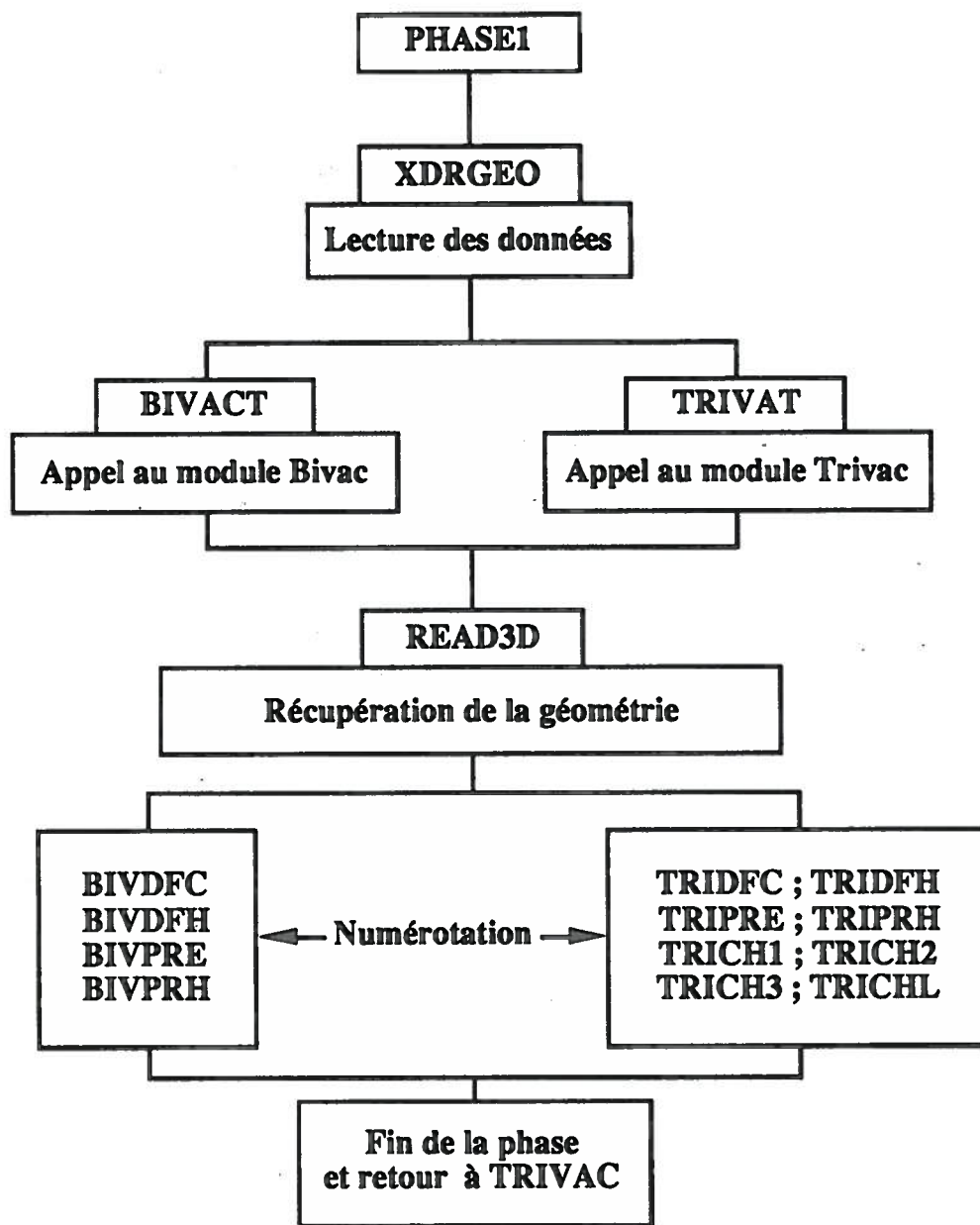


Figure 3.2: Organigramme thématique de PHASE1

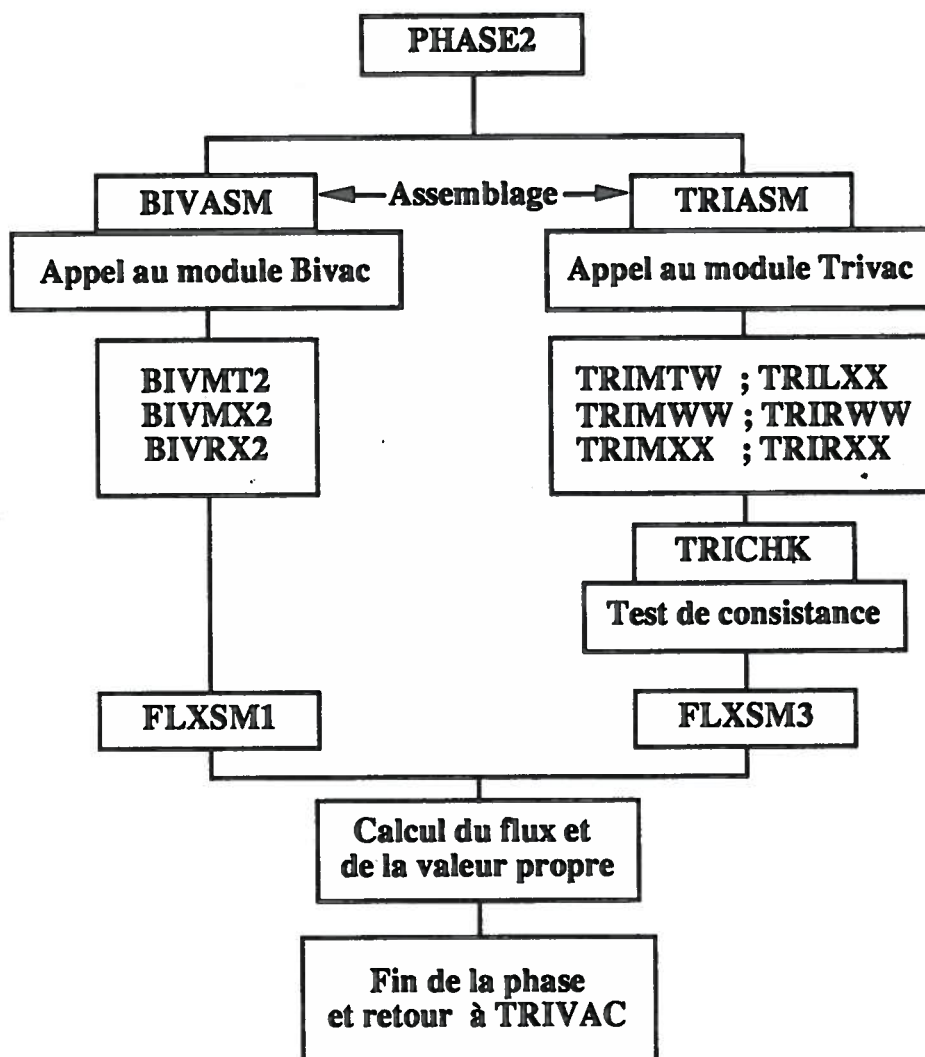


Figure 3.3: Organigramme thématique de PHASE2

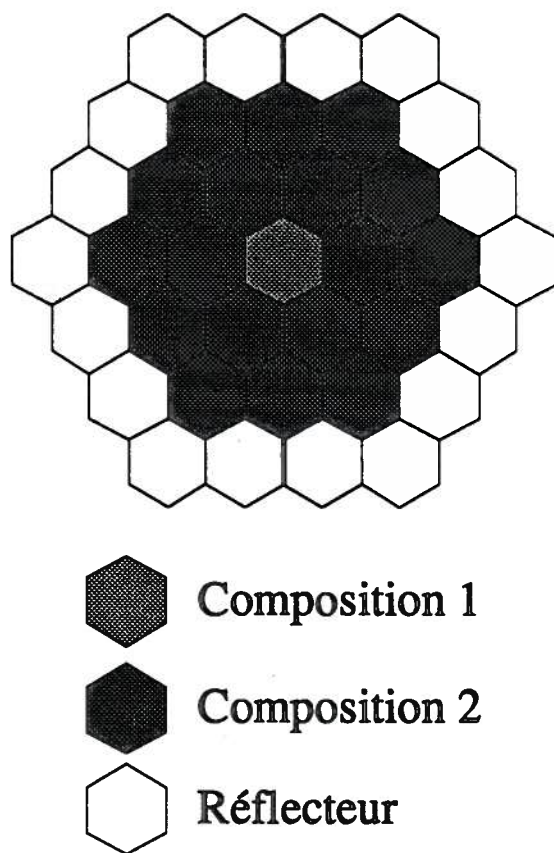


Figure 3.4: Schéma du réacteur : premier benchmark

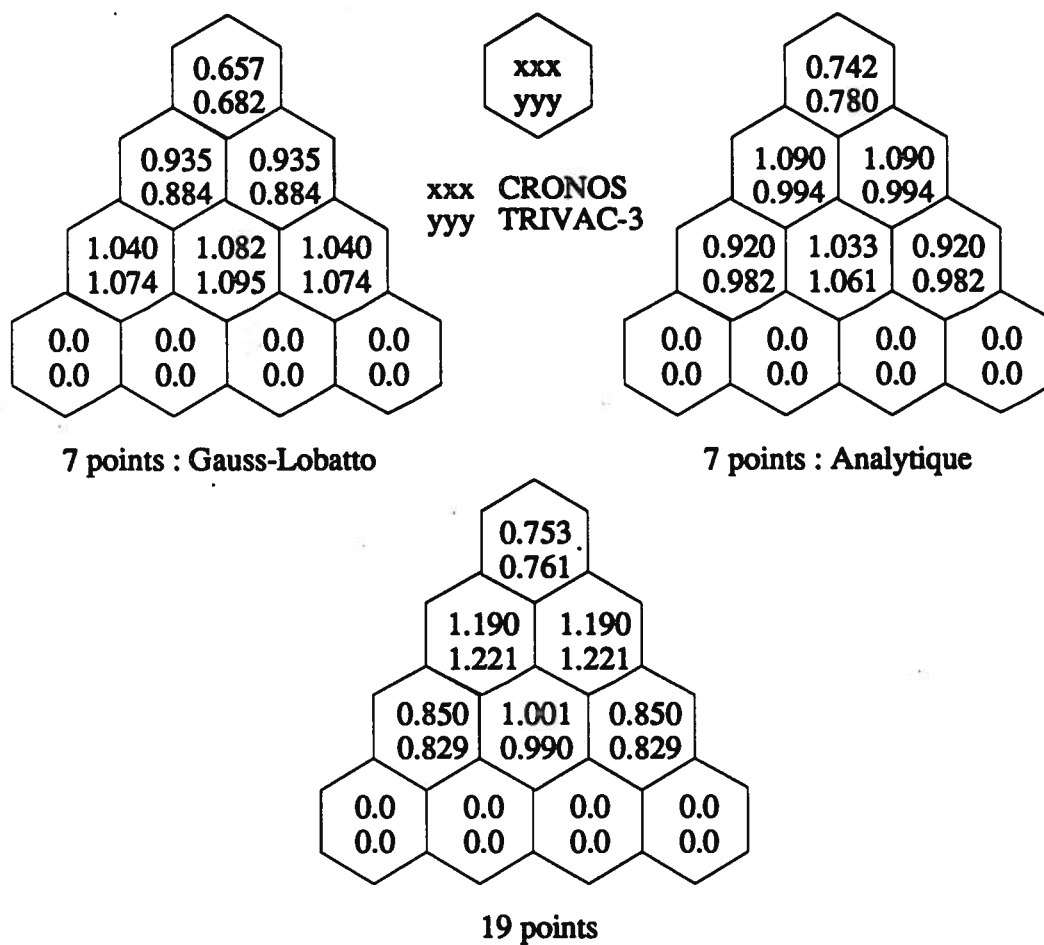


Figure 3.5: Comparaison des facteurs de puissance : CRONOS et TRIVAC-3

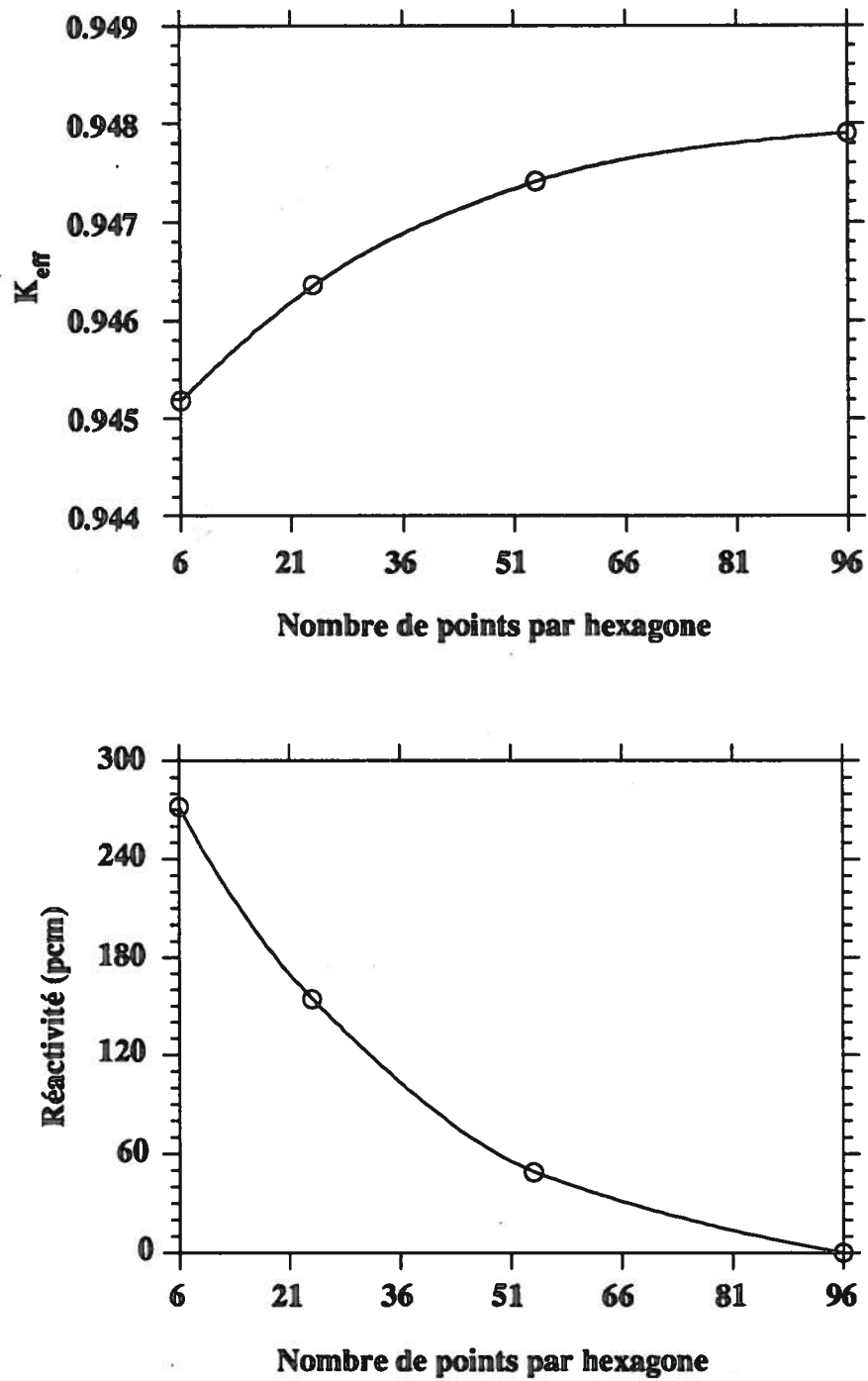


Figure 3.6: Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : premier benchmark

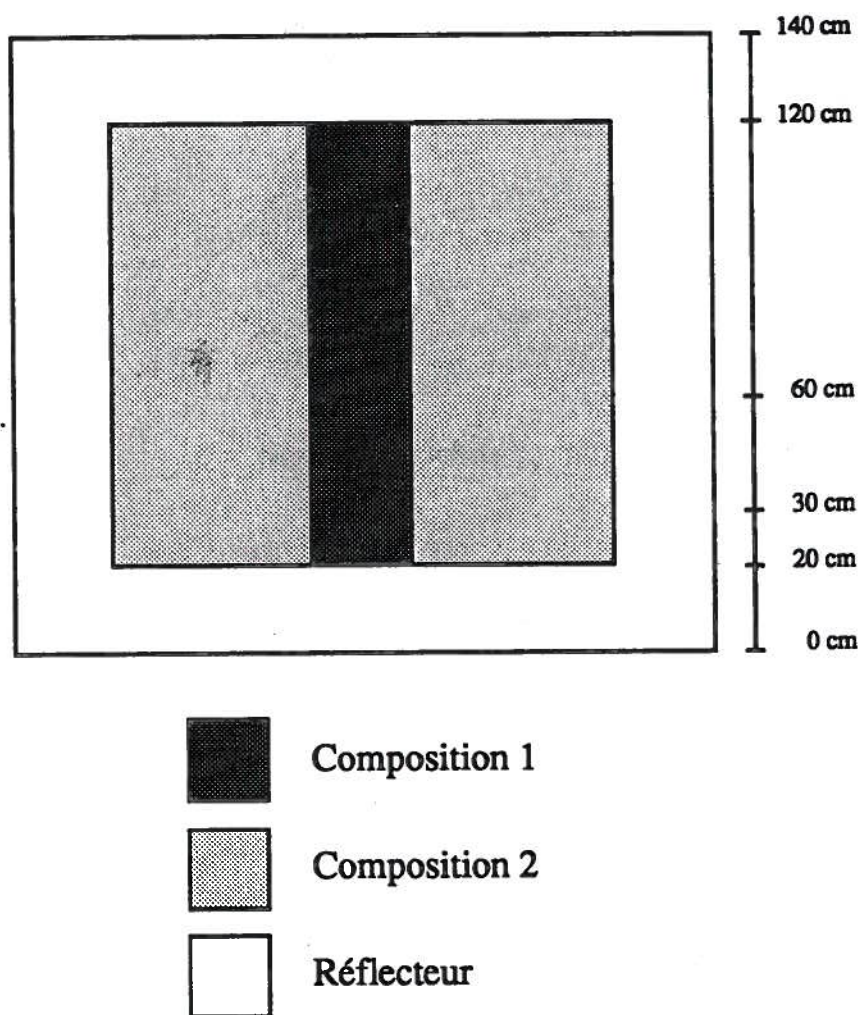


Figure 3.7: Coupe verticale du réacteur : deuxième benchmark

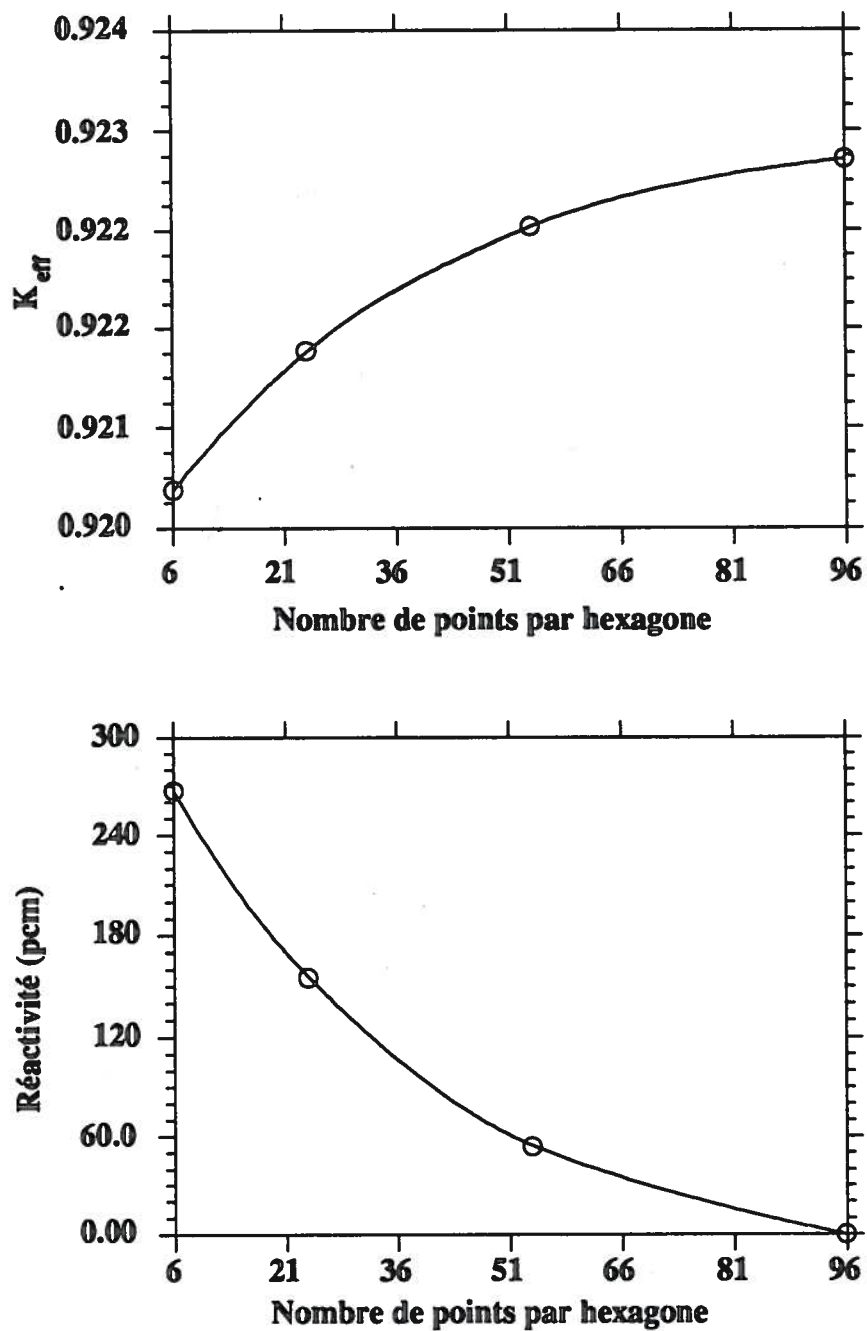


Figure 3.8: Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : deuxième benchmark

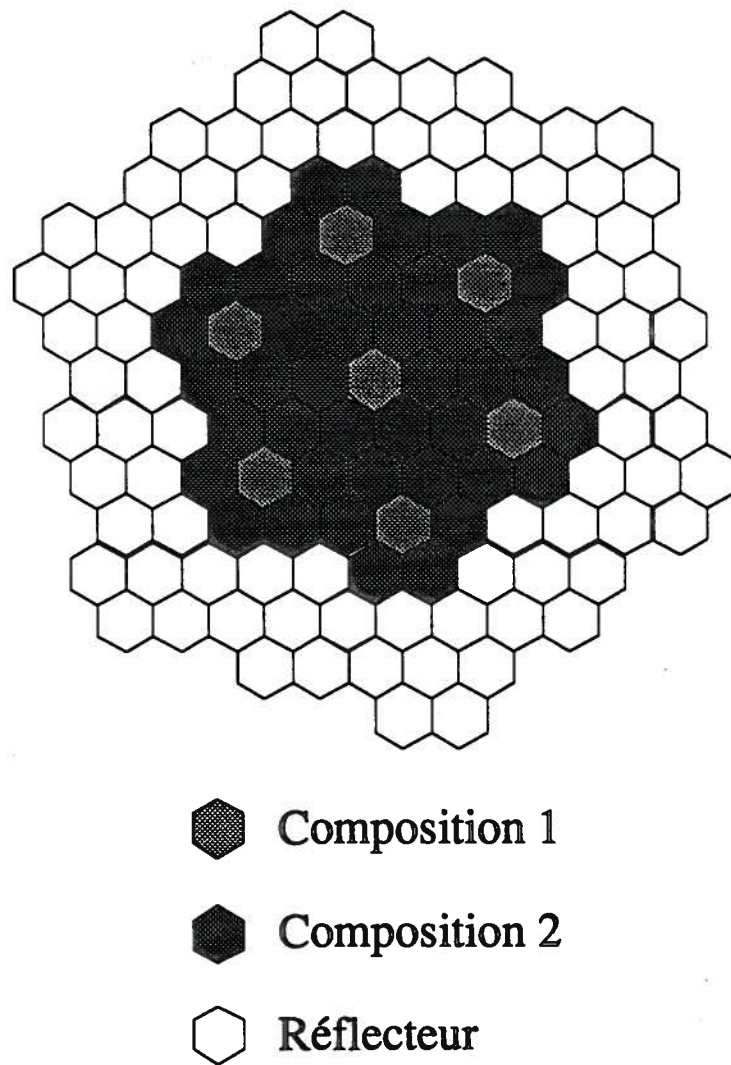


Figure 3.9: Schéma d'un réacteur HTGR de petite taille

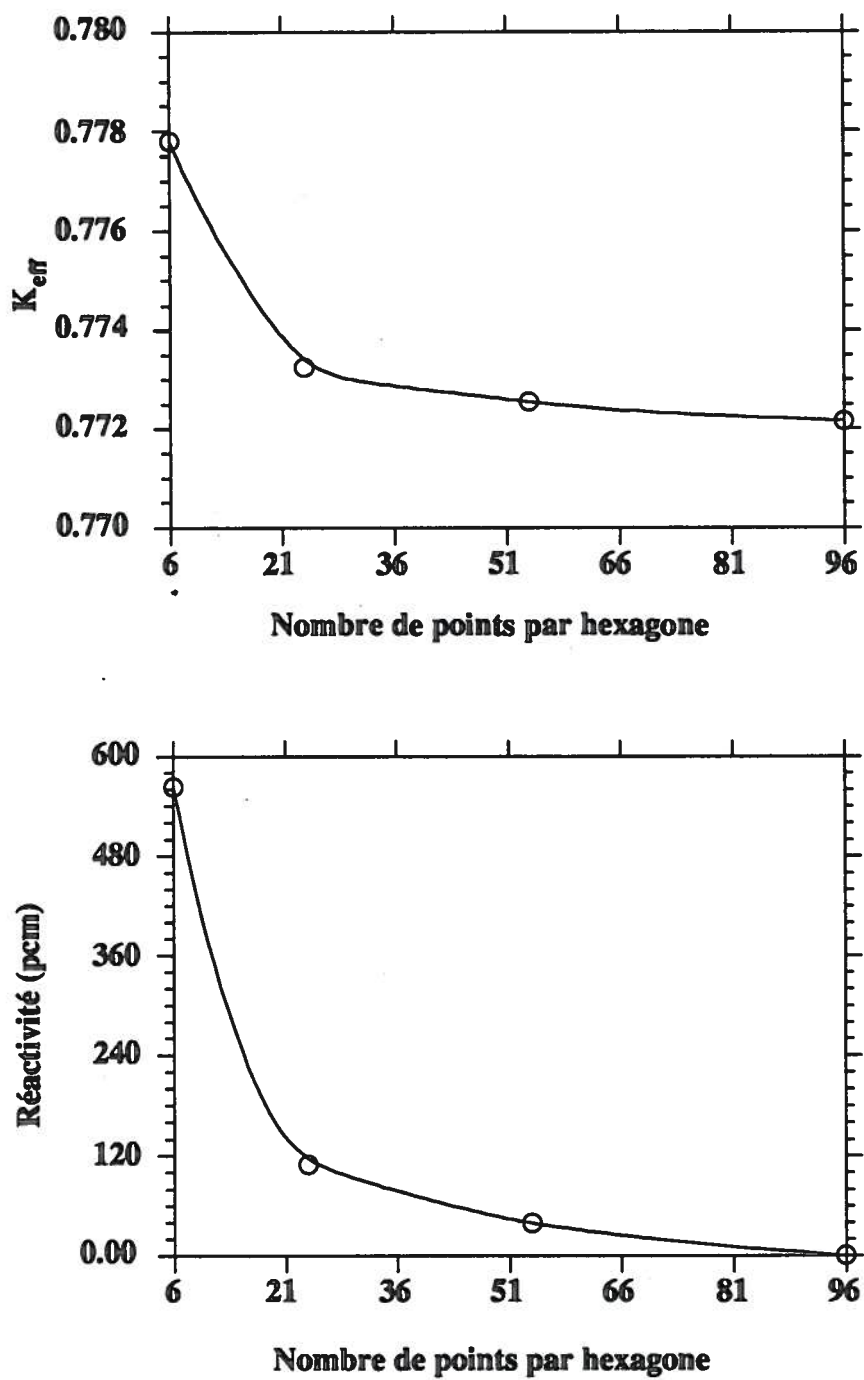


Figure 3.10: Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : troisième benchmark (SET1)

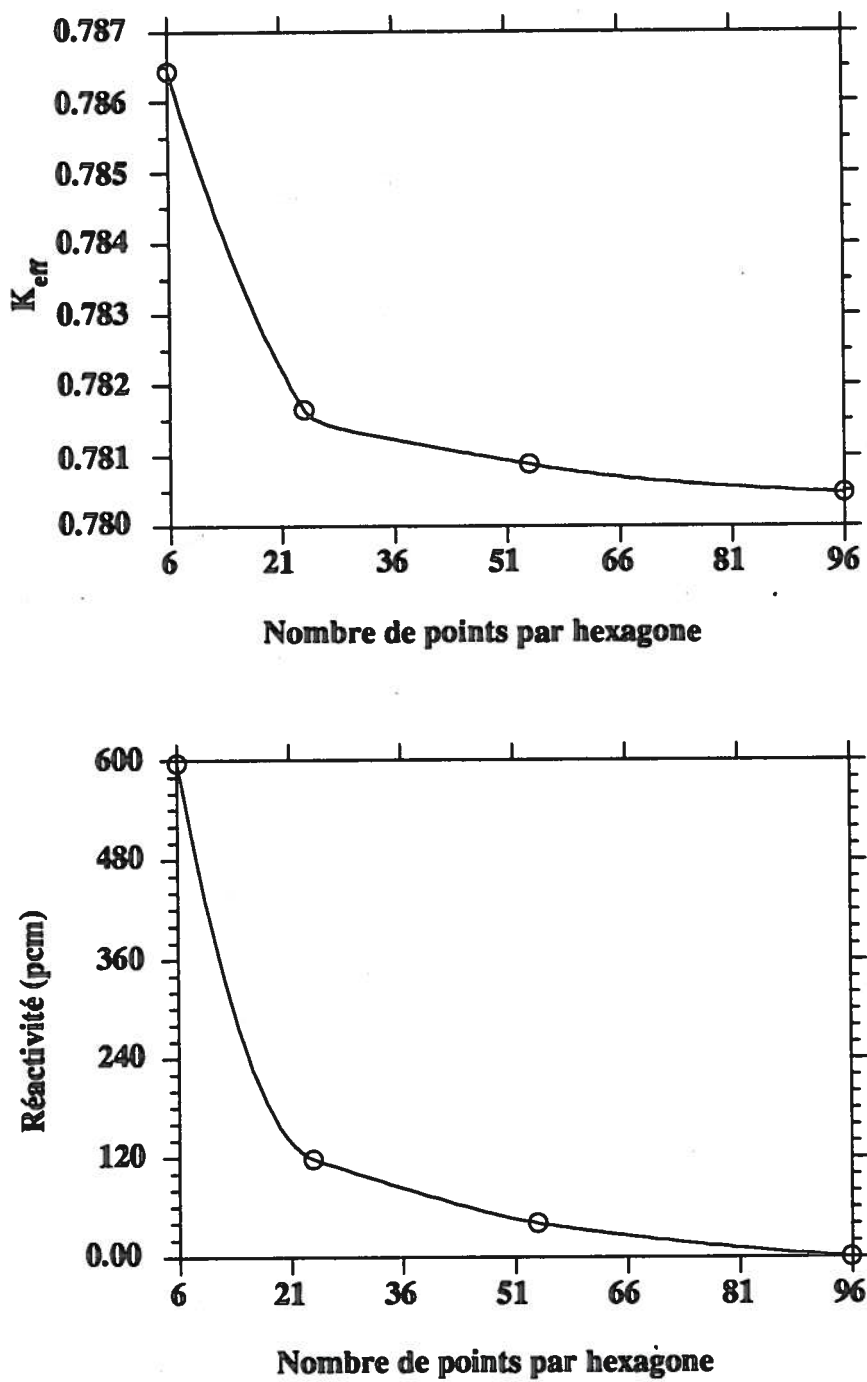


Figure 3.11: Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : troisième benchmark (SET2)

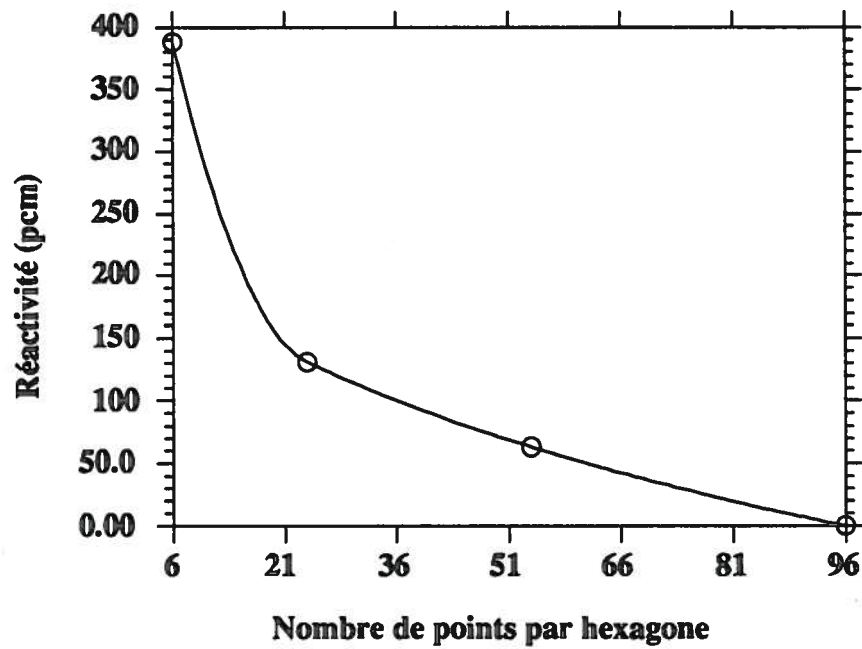
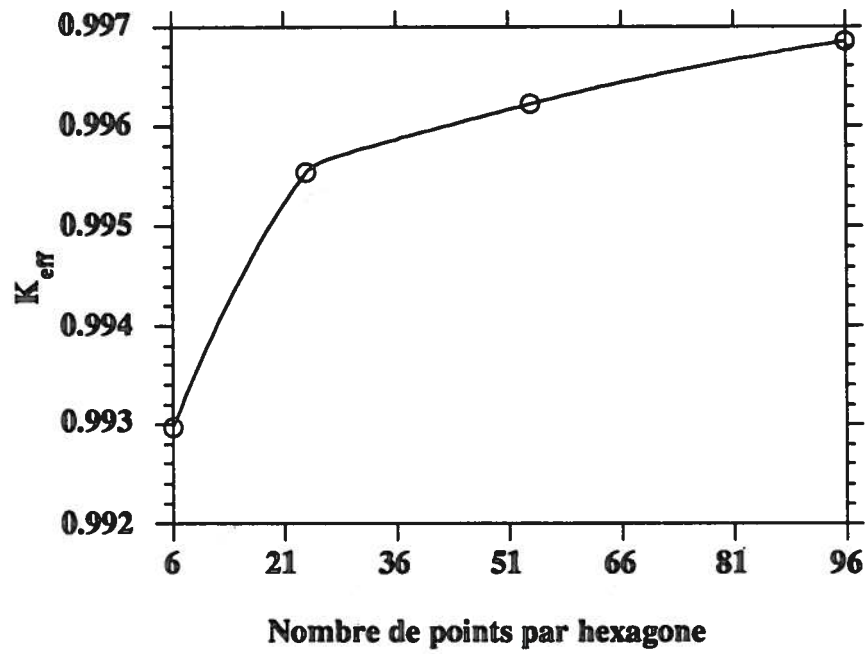


Figure 3.12: Évolution du facteur de multiplication effectif et de la réactivité : troisième benchmark (SET3)

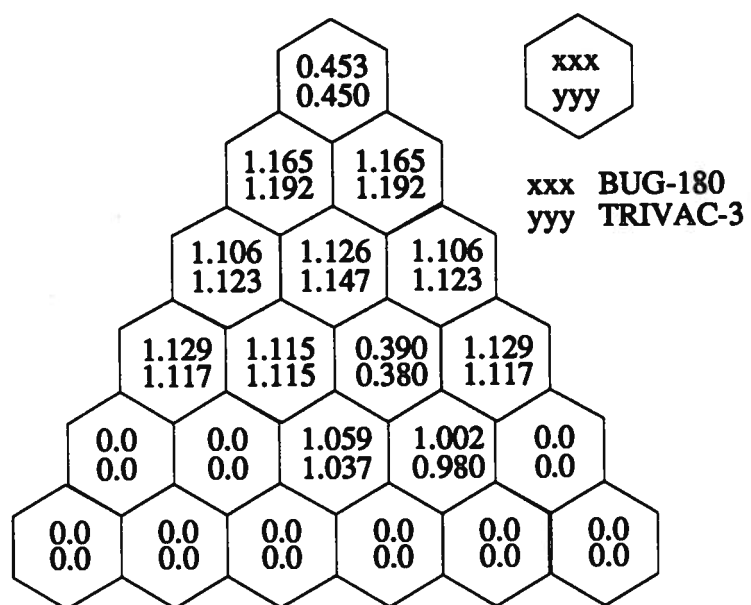


Figure 3.13: Comparaison des facteurs de puissance SET2

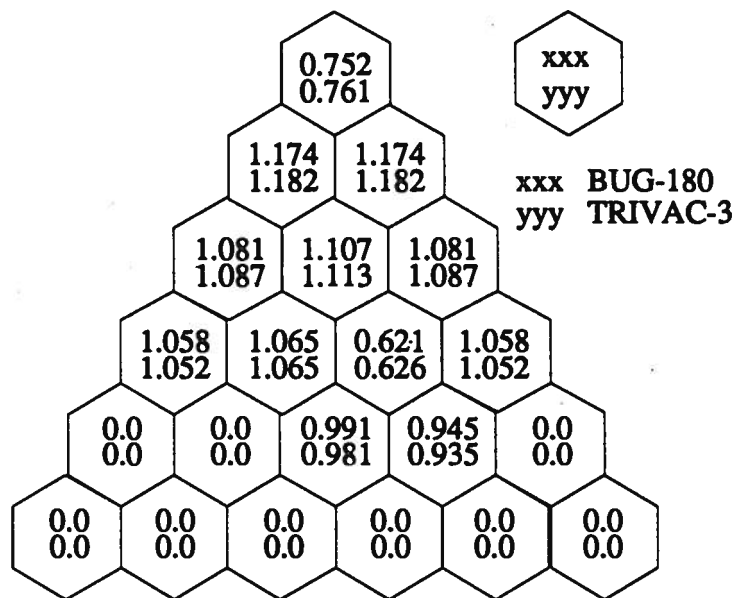


Figure 3.14: Comparaison des facteurs de puissance SET3

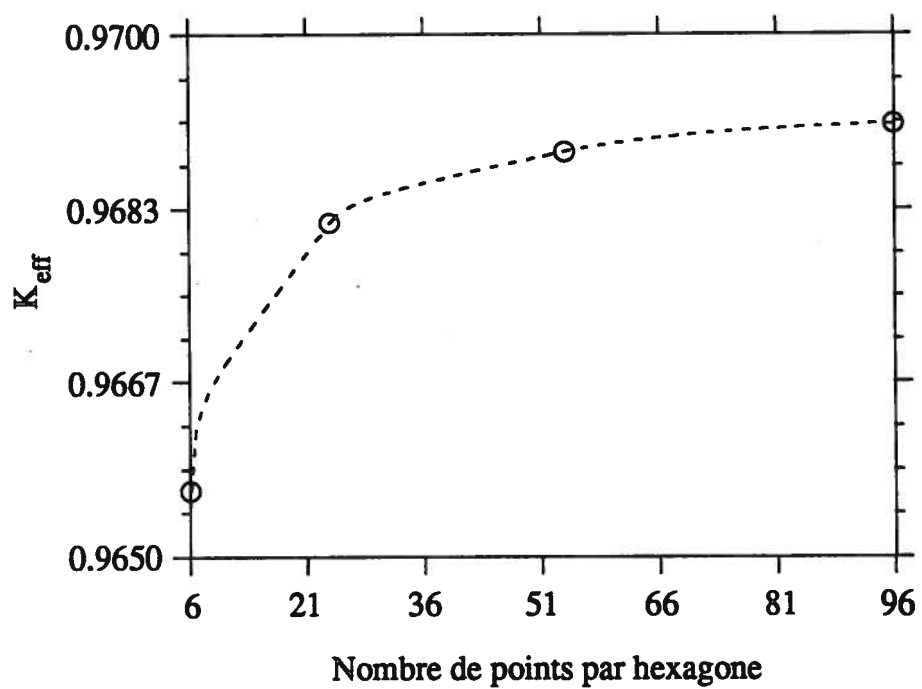


Figure 3.15: Évolution du facteur de multiplication effectif : toutes barres extraites

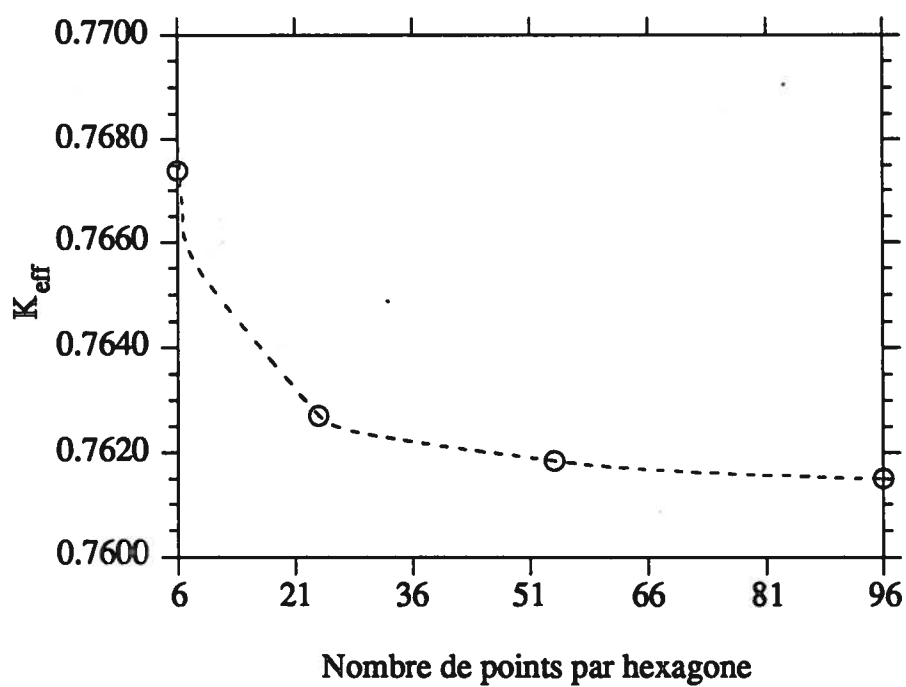


Figure 3.16: Évolution du facteur de multiplication effectif : toutes barres insérées

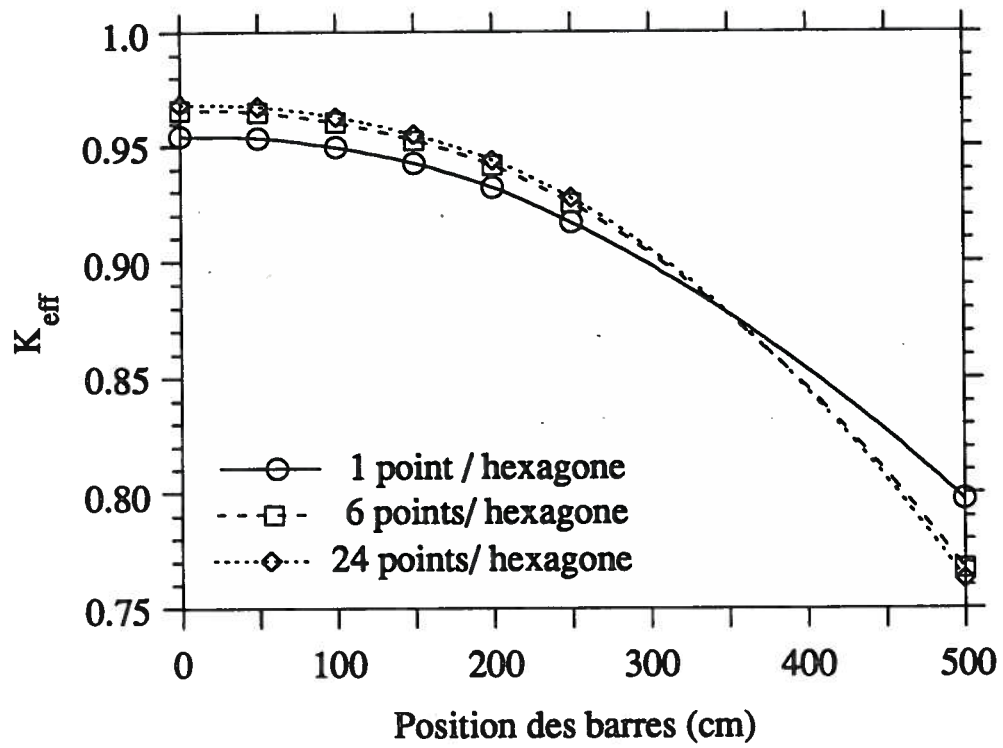
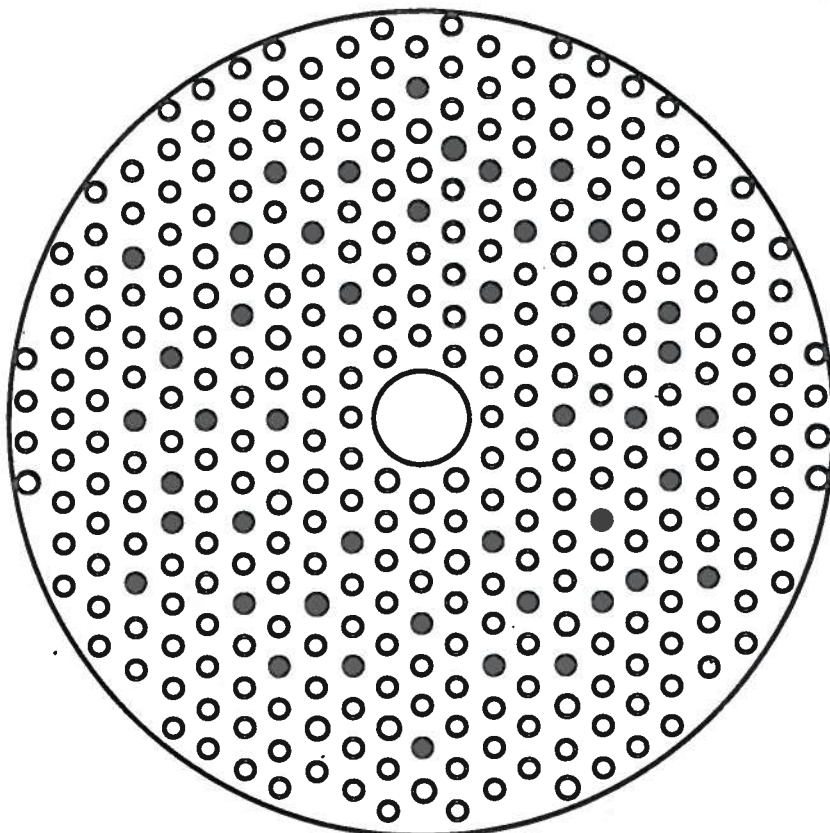


Figure 3.17: Évolution du facteur de multiplication effectif en fonction de la position des barres



○ Élément de combustible.

● Site inoccupé.

Figure 3.18: Coupe radiale du cœur du réacteur SLOWPOKE

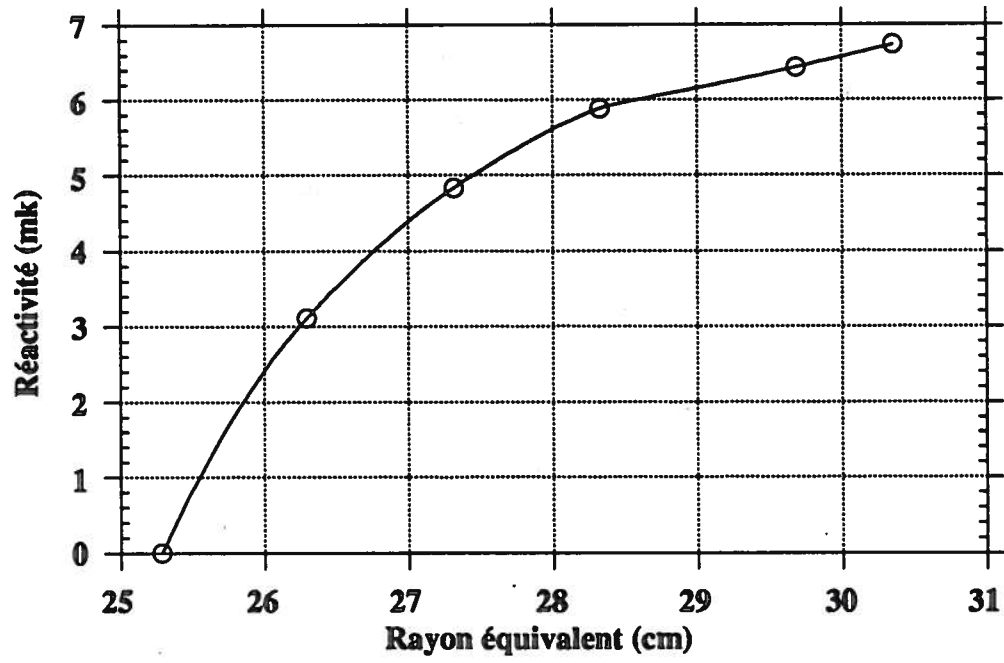


Figure 3.19: Évolution de la réactivité en fonction du rayon équivalent

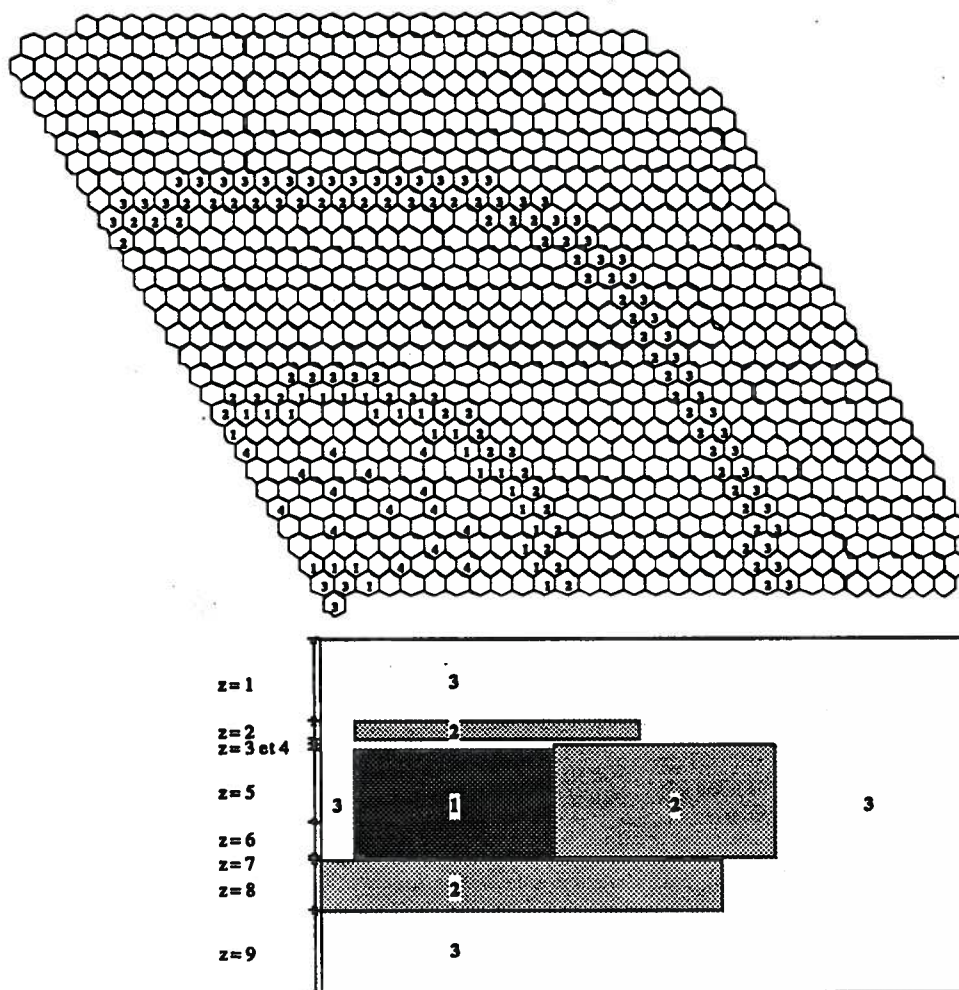


Figure 3.20: Schéma du réacteur SLOWPOKE

BIBLIOGRAPHIE

- [1] W. G. HABASHI et al., "*The Finite Element Method in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfert*", A Five-day Short Course, Concordia University, Montréal, Vol. 1, May 18-22, 1992.
- [2] L. A. SEMENZA, E. E. LEWIS and E. C. ROSSOW, "*The Application of the Finite Element Method to the Multigroup Neutron Diffusion Equation*", Nucl. Sci. Eng. **47**, 302, 1972.
- [3] H. G. KAPER, G. K. LEAF and A. J. LINDEMAN, "*A Timing Comparison Study for Some High Order Finite Element Approximation Procedures and a Low Order Finite Difference Approximation Procedure for the Numerical Solution of the Multigroup Neutron Diffusion Equation*", Nucl. Sci. Eng. **49**, 27, 1972.
- [4] C. M. KANG and K. F. HANSEN, "*Finite Element Methods for Reactor Analysis*", Nucl. Sci. Eng. **51**, 456, 1973.
- [5] A. HÉBERT, "*TRIVAC, A Modular Diffusion Code for Fuel Management and Design Applications*", Nucl. J. of Canada, **1**, 325, 1987.
- [6] P. REUSS, "*Éléments de neutronique*", INSTN, CEA, Collection enseignement, 1986.
- [7] A. HÉBERT, "*Solution de l'équation de la diffusion statique par une méthode aux éléments finis d'ordre élevé*", Thèse M.Ing, École Polytechnique de Montréal, 1977.
- [8] T. Y. C. WEI, "*The Finite Element Method for Neutron Diffusion Problems in Hexagonal Geometry*", Ph.D. thesis, M.I.T., June 1975.
- [9] A. HÉBERT, "*Application of the Hermite Method for Finite Element Reactor calculations*", Nucl. Sci. Eng. **91**, 34, 1985.

- [10] O. C. ZIENKIEWICZ, "*The Finite Element Method*", McGraw-Hill, London, 1977.
- [11] J. N. REDDY, "*An Introduction to the Finite Element Method*", McGraw-Hill, New York, 1984.
- [12] E. L. WACHSPRESS, "*A Rational Basis for Function Approximation*", Lecture Notes in Mathematics (Proceedings of the Conference in Application of Numerical Analysis), Vol. 228, Springer-Verlag, Berlin, pp. 223-252, 1971.
- [13] E. L. WACHSPRESS, "*A Rational Basis for Function Approximation, Part II: Curved Sides*" Journal of the Institute of Mathematics and its Application, Vol. 11, No. 1, pp. 83-104, 1973.
- [14] E. L. WACHSPRESS, "*A Rational Finite Element Basis*", Academic Press, New York, 1975.
- [15] J. T. ODEN and J. N. REDDY, "*An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements*", John Wiley & Sons, New York, 1976.
- [16] L. LAPIDUS and G. F. PINDER, "*Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*", John Wiley & Sons, New York, 1982.
- [17] T. A. DALY, G. K. LEAF and A. S. KENNEDY, "*The ARC System: Two-dimensional Diffusion Theory Capability, DARCC2D*", Argonne National Laboratory, 1972.
- [18] E. L. WACHSPRESS, "*Iterative Solution of Elliptic Systems*", Prentice-Hall Inc., Englewood-Cliffs, New Jersey, 1966.
- [19] A. HÉBERT, "*Variational Principles and Convergence Acceleration Strategies for the Neutron Diffusion Equation*", Nucl. Sci. Eng. **91**, 414, 1985.
- [20] A. HÉBERT, "*Preconditioning the Power Method for Reactor Calculations*", Nucl. Sci. Eng. **94**, 1, 1986.

- [21] A. HÉBERT, "Neutronique", Notes de cours, École Polytechnique de Montréal, 1983.
- [22] C. F. GERALD and P. O. WHEATLEY, "Applied Numerical Analysis", Addison-Wisley, 1989.
- [23] D. W. PEACEMAN and H. H. RACHFORD, "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations", Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, 3:28-41, 1955.
- [24] G. MARLEAU, A. HÉBERT et R. ROY, "Guide de l'utilisateur du code DRAGON version 2.0", Rapport IGE-71R2, École Polytechnique de Montréal, Institut de Génie Énergétique, Juin 1992.
- [25] A. HÉBERT, "Développement de la méthode SPH : Homogénéisation de cellules dans un réseau non uniforme et calcul des paramètres de réflecteur", Note CEA-N-2209, Commissariat à l'énergie Atomique, France, 1981.
- [26] J. J. LAUTARD, S. LOUBIÈRE and C. FEUDON-MAGNAUD, "CRONOS, a Computational Modular System for Neutronic Core Calculations", Proc. International Atomic Energy Agency Specialists meeting on Advanced Computational Methods for Power Reactors, Cadarache, France, September 1990.
- [27] C. GUERTIN, "Calcul du coefficient de température du réacteur SLOWPOKE-2", Thèse M. Ing, École Polytechnique de Montréal, 1991.
- [28] J. V. DONNELLY, "WIMS-CRNL: A User's Manual for the Chalk River Version of WIMS", Report AECL-8955, Chalk River, 1986.
- [29] R. ROY, "Communication personnelle", 1992.
- [30] R. E. KAY et al., "SLOWPOKE: A New Low-Cost Laboratory Reactor", International Journal of Applied Radiations and Isotopes, 24, 509-518, 1973.

ANNEXE A

FICHIERS DE DONNÉES TRIVAC-3 DES BENCHMARKS

A.1 Données du premier benchmark

1. Cas bidimensionnel :

```
'TEST HEXAGONAL : CRONOS.'  
$INI 2000 STOP  
$GEO 0 GEOM BENCH1 := HEX 37  
HBC COMPLETE ZERO  
SIDE 13.044  
MIX  
1  
2 2 2 2 2 2  
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2  
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3  
ENDG  
TRIVAC BENCH1 MCFD 5 (96 points par hexagone)  
(MCFD 4) (54 points par hexagone)  
(MCFD 3) (24 points par hexagone)  
(MCFD 2) ( 6 points par hexagone)  
(MCFD 1) ( 1 points par hexagone)  
(LAGR 1 1) (hexagone par Gauss-Lobatto)  
(LAGR 2 1) (triangle par Gauss-Lobatto)  
(BIVAC BENCH1) (LAGR 1 1 1) (hexagone analytique)  
(LAGR 2 1 1) (triangle analytique)  
STOP  
$FLU IMPR 1 SGD 2  
(Composition 1)  
1.500 3.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *  
0.400 1.300E-01 0.135E+00 0.135E+00 T 2.000E-02 *  
(Composition 2)  
1.500 3.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *  
0.400 8.500E-02 0.135E+00 0.135E+00 T 2.000E-02 *  
(Réflecteur )  
2.000 4.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *  
0.300 1.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 T 4.000E-02 *  
* STOP
```


\$EDI IMPR INTG #
STOP

\$END

2. Cas tridimensionnel :

'TEST HEXAGONAL : CRONOS.'
\$INI 2000 STOP
\$GEO 0 GEOM BENCH1 := HEX 37 3
HBC COMPLETE ZERO
Z- ALBE 1.0 Z+ ALBE 1.0
SIDE 13.044
MESHZ 0. 10. 40. 100.
MIX
(PLAN # 1)
1
2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
(PLAN # 2)
1
2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
(PLAN # 3)
1
2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
ENDG
TRIVAC BENCH1 MCFD 5 (96 points par hexagone)
STOP
\$FLU IMPR 1 SGD 2
(Composition 1)
1.500 3.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *
0.400 1.300E-01 0.135E+00 0.135E+00 T 2.000E-02 *
(Composition 2)
1.500 3.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *
0.400 8.500E-02 0.135E+00 0.135E+00 T 2.000E-02 *
(Réflecteur)
2.000 4.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *
0.300 1.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 T 4.000E-02 *
* STOP
\$EDI IMPR INTG #
STOP

\$END

A.2 Données du deuxième benchmark

'TEST HEXAGONAL : CRONOS.'

\$INI 2000 STOP

\$GEO 0 GEOM BENCH2 := HEX 37 5

HBC COMPLETE ZERO

Z- ZERO Z+ ZERO

SIDE 13.044

MESHZ 0. 20. 30. 60. 120. 140.

MIX

(PLAN # 1)

3

3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

(PLAN # 2)

1

2 2 2 2 2 2

2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

(PLAN # 3)

1

2 2 2 2 2 2

2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

(PLAN # 4)

1

2 2 2 2 2 2

2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

(PLAN # 5)

3

3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

ENDG

TRIVAC BENCH2 MCFD 5 (96 points par hexagone)

STOP

\$FLU IMPR 1 SGD 2

(Composition 1)

1.500 3.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *

0.400 1.300E-01 0.135E+00 0.135E+00 T 2.000E-02 *

```

(Composition 2)
1.500 3.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *
0.400 8.500E-02 0.135E+00 0.135E+00 T 2.000E-02 *
(Réfecteur )
2.000 4.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 *
0.300 1.000E-02 0.000E+00 0.000E+00 T 4.000E-02 *
* STOP
$EDI IMPR INTG #
STOP
$END

```

A.3 Données du troisième benchmark

1. Données du test SET1 :

```

'TEST HEXAGONAL 2D : REACTEUR HTGR DE PETITE TAILLE (SET1).'
$INI 2000 STOP
$GED 0 GEOM BENCH3 := HEX      57
      HBC   `R120   ZERO
      SIDE  20.
      MIX
      1
      2 2
      2 2 2 2
      2 1 2 2 1 2
      3 2 2 3 3 2 2 3
      3 3 3 3 3 3 3 3 3
      3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
      0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0
      ENDG
      TRIVAC BENCH3   MCFD 5      (96 points par hexagone)
      STOP
$FLU IMPR 1 SGD 2
      (Composition 1)
      1.683500 6.07490E-03 2.14326E-04 2.14326E-04 *
      1.297020 1.01706E-02 3.54780E-03 3.54780E-03 T 1.80E-03 *
      (Composition 2)
      1.474930 3.73399E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *
      1.141550 3.96169E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *
      (Réfecteur )
      0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *
      0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *
      * STOP
$EDI IMPR INTG #

```

STOP
\$END

2. Données du test SET2 :

```
'TEST HEXAGONAL 2D : REACTEUR HTGR DE PETITE TAILLE (SET2).'
```

\$INI 2000 STOP

\$GEO 0 GEOM BENCH3 := HEX 57

HBC R120 ZERO

SIDE 20.

MIX

1

2 2

2 2 2 2

2 1 2 2 1 2

3 2 2 3 3 2 2 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0

0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

ENDG

TRIVAC BENCH3 MCFD 5 (96 points par hexagone)

STOP

\$FLU IMPR 1 SGD 2

(Composition 1)

1.683500 5.93650E-03 2.14326E-04 2.14326E-04 *

1.297020 1.03000E-02 3.54780E-03 3.54780E-03 T 1.83E-03 *

(Composition 2)

1.474930 3.58649E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *

1.141550 4.07584E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *

(Réflecteur)

0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *

0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *

* STOP

\$EDI IMPR INTG #

STOP

\$END

3. Données du test SET3 :

```
'TEST HEXAGONAL 2D : REACTEUR HTGR DE PETITE TAILLE (SET3).'
```

\$INI 2000 STOP

\$GEO 0 GEOM BENCH3 := HEX 57

HBC R120 ZERO

SIDE 20.

```

MIX
1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0
ENDG
TRIVAC BENCH3   MCFD 5           (96 points par hexagone)
STOP
$FLU  IMPR 1 SGD 2
      (Composition 1)
      1.658370 2.92134E-03 2.22345E-04 2.22345E-04 *
      1.297020 2.36030E-03 3.62070E-03 3.62070E-03 T 2.07E-03 *
      (Composition 2)
      1.474930 3.58649E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *
      1.141550 4.07584E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *
      (Réflecteur )
      0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *
      0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *
      * ST0P
$EDI  IMPR INTG #
      STOP
$END

```

A.4 Données du quatrième benchmark

1. Toutes les barres extraites :

```

'TEST HEXAGONAL 3D : REACTEUR HTGR DE PETITE TAILLE (SET3)'
$INI 15000 STOP
$GEO 0 GEOM BENCH4 := HEXZ 57 10
      HBC R120 ZERO
      SIDE 20.000
      Z- ZERO Z+ ZERO
      MESHZ 0. 50. 100. 150. 200. 250.
           300. 350. 400. 450. 500.
MIX
(PLAN # 1)
1
2 2
2 2 2 2

```

```

2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 2)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 3)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 4)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 5)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 6)

```

1
2 2

```

```

2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 7)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 8)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 9)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN #10)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

```

ENDG

TRIVAC BENCH4 MCFD 5 (96 points par hexagone)

```

STOP
$FLU  IMPR 2 SGD 2
      (MIXTURE NB. 1)
      1.658370 2.92134E-03 2.22345E-04 2.22345E-04 *
      1.297020 2.36030E-03 3.62070E-03 3.62070E-03 T 2.07E-03 *
      (MIXTURE NB. 2)
      1.474930 3.58649E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *
      1.141550 4.07584E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *
      (MIXTURE NB. 3)
      0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *
      0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *
      * STOP
$EDI  IMPR INTG #
      STOP
$END

```

2. Toutes les barres insérées :

```

'TEST HEXAGONAL 3D : REACTEUR HTGR DE PETITE TAILLE (SET2).'
$INI 15000 STOP
$GEO 0 GEOM BENCH4 := HEXZ 57 10
      HBC R120 ZERO
      SIDE 20.000
      Z- ZERO Z+ ZERO
      MESHZ 0. 50. 100. 150. 200. 250.
           300. 350. 400. 450. 500.

MIX
(PLAN # 1)
1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 2)
1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```


(PLAN # 3)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 4)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 5)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 6)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 7)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0

```

0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 8)

1

2 2

2 2 2 2

2 1 2 2 1 2

3 2 2 3 3 2 2 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0

0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 9)

1

2 2

2 2 2 2

2 1 2 2 1 2

3 2 2 3 3 2 2 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0

0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN #10)

1

2 2

2 2 2 2

2 1 2 2 1 2

3 2 2 3 3 2 2 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0

0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

ENDG

TRIVAC BENCH4 MCFD 5 (96 points par hexagone)

STOP

\$FLU

IMPR 2 SGD 2

(MIXTURE NB. 1)

1.683500 5.93650E-03 2.14326E-04 2.14326E-04 *

1.297020 1.03000E-02 3.54780E-03 3.54780E-03 T 1.83E-03 *

(MIXTURE NB. 2)

1.474930 3.58649E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *

1.141550 4.07584E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *

(MIXTURE NB. 3)

0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *

0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *

* STOP

\$EDI

IMPR INTG #

STOP

\$END

3. Barres insérées à 100 cm :

'TEST HEXAGONAL 3D : REACTEUR HTGR DE PETITE TAILLE AVEC BARRES'

\$INI 15000 STOP

\$GEO 0 GEOM BENCH4 := HEXZ 57 10

HBC R120 ZERO

SIDE 20.000

Z- ZERO Z+ ZERO

MESHZ	0.	50.	100.	150.	200.	250.
		300.	350.	400.	450.	500.

MIX

(PLAN # 1)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 2)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 3)

```

1
2 2
2 2 2 2
2 1 2 2 1 2
3 2 2 3 3 2 2 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 3 0
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 3 3 0 0

```

(PLAN # 4)

```

1
2 2
2 2 2 2

```

2 1 2 2 1 2
 3 2 2 3 3 2 2 3
 3 3 3 3 3 3 3 3 3
 3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
 0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 5)

1
 2 2
 2 2 2 2
 2 1 2 2 1 2
 3 2 2 3 3 2 2 3
 3 3 3 3 3 3 3 3 3
 3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
 0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 6)

1
 2 2
 2 2 2 2
 2 1 2 2 1 2
 3 2 2 3 3 2 2 3
 3 3 3 3 3 3 3 3 3
 3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
 0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 7)

1
 2 2
 2 2 2 2
 2 1 2 2 1 2
 3 2 2 3 3 2 2 3
 3 3 3 3 3 3 3 3 3
 3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
 0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 8)

1
 2 2
 2 2 2 2
 2 1 2 2 1 2
 3 2 2 3 3 2 2 3
 3 3 3 3 3 3 3 3 3
 3 3 3 3 3 0 3 3 3 3 0
 0 0 0 3 3 0 0 0 0 3 3 0 0

(PLAN # 9)

4
 5 5

```

5 5 5 5
5 4 5 5 4 5
6 5 5 6 6 5 5 6
6 6 6 6 6 6 6 6 6
6 6 6 6 6 0 6 6 6 6 0
0 0 0 6 6 0 0 0 0 6 6 0 0

```

(PLAN #10)

4

```

5 5
5 5 5 5
5 4 5 5 4 5
6 5 5 6 6 5 5 6
6 6 6 6 6 6 6 6 6
6 6 6 6 6 0 6 6 6 6 0
0 0 0 6 6 0 0 0 0 6 6 0 0

```

ENDG

TRIVAC BENCH4 MCFD 3 (24 points par hexagone)

STOP

\$FLU

IMPR 2 SGD 2

(MIXTURE NB. 1)

1.658370 2.92134E-03 2.22345E-04 2.22345E-04 *

1.297020 2.36030E-03 3.62070E-03 3.62070E-03 T 2.07E-03 *

(MIXTURE NB. 2)

1.474930 3.58649E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *

1.141550 4.07584E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *

(MIXTURE NB. 3)

0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *

0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *

(MIXTURE NB. 4)

1.683500 5.93650E-03 2.14326E-04 2.14326E-04 *

1.297020 1.03000E-02 3.54780E-03 3.54780E-03 T 1.83E-03 *

(MIXTURE NB. 5)

1.474930 3.58649E-03 3.86370E-04 3.86370E-04 *

1.141550 4.07584E-03 6.17220E-03 6.17220E-03 T 2.25E-03 *

(MIXTURE NB. 6)

0.968992 4.98523E-03 0.00000E+00 0.00000E+00 *

0.789889 2.96000E-04 0.00000E+00 0.00000E+00 T 4.98E-03 *

* STOP

\$EDI

IMPR INTG #

STOP

\$END

A.5 Données du test SLOWPOKE

'SLOWPOKE HEXZ GEOMETRY, T = 20C.'

\$INI 50000 STOP

\$GEO 0 GEOM GEOMETRY1 := HEXZ 931 9

HBC R120 VOID

Z- VOID Z+ VOID

SIDE 0.637395

MESHZ 0.0 6.59128 20.234275 21.1074 21.85924

36.8554 43.85564 44.36872 54.52872 71.12

MIX

(PLAN # 1)

3

3 3

3 3 3 3

3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3

3 3

3 3

3 3

3 3

3 3

3 3

3 3 3 3

3 3

3 3 3 3 3 3

3 3

3 3 3 3 3 3 3 3

3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

3 3

1 1 1 4 1 1 1 4 1 1 1 4 1 1 1 4
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 2
2 2 2 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2 1 1 1 2 2 2 2
2
2
2
2 2
2
2 2 2 2
2
2 2 2 2 2 2
2
2 2 2 2 2 2 2
2
2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 3 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 3
3 3 3 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 3 3 3 3
3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3
3
3
3
3
3
0 3
3 0
0 0 0 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 0 0
0 0 0 0 0 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
0 0 0 0
(PLAN # 6)
3
3 3


```

3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
0 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
3 0
0 0 0 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 0 0
0 0 0 0 0 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
0 0 0 0

```

ENDG

TRIVAC GEOMETRY1 MCFD 1 (1 point par hexagone)

STOP

```

$FLU  IMPR 1 SGD 2
      (MIX 1 : COMBUSTIBLE)
      1.196962 3.831346E-2 4.937038E-3 4.937038E-3 *
      0.201924 1.038801E-1 1.894040E-1 1.894040E-1 T 3.476157E-2 *
      (MIX 2 : REFLECTEUR)
      0.615004 4.896779E-3 0.0 0.0 *
      0.441663 5.732398E-4 0.0 0.0 T 6.804988E-3 *
      (MIX 3 : EAU)
      0.861460 8.638000E-2 0.0 0.0 *
      0.137800 1.867629E-2 0.0 0.0 T 8.604100E-2 *
      (MIX 4 : SITE INOCCUPÉ)
      1.062168 4.459891E-2 0.0 0.0 *
      0.177332 1.365481E-2 0.0 0.0 T 4.427355E-2 *
      * STOP
$EDI  IMPR INTG #
      STOP
$END

```


ANNEXE B

MODIFICATIONS AU GUIDE DE L'USAGER TRIVAC-3

La seule modification apportée à la dernière version du guide de l'utilisateur du code TRIVAC-3 concerne la description de la structure (**discrétisation**) :

Structure (discrétisation)

{ <u>MCFD</u> [{ ielem ispl }] <u>LUMP</u> [ielem] <u>LAGR</u> [iopt ielem icol] }
--

MCFD le macro calcul de diffusion utilise des différences finies centrées ou une méthode de collocation nodale si ielem est spécifié (cas TRIVAC),

ispl : Cette valeur est nécessaire pour la version hexagonale, elle permet de calculer le nombre de triangles par hexagone donné par $(6[ispl - 1]^2)$.
N.B. : pour l'hexagone au complet ispl = 1 et le maximum permis est de 5 ce qui représente 96 inconnues par hexagone.

LUMP le macro calcul de diffusion utilise une méthode de collocation nodale avec option serendipity (cas TRIVAC).

N.B. : cette option n'est pas utilisée dans la version hexagonale.

LAGR le macro calcul de diffusion utilise des différences finies classiques ou des éléments finis de Lagrange. Par défaut, on aura ielem = 1 et icol = 2, ce qui correspond à une approximation de différences finies classique. Il est aussi possible de spécifier ces valeurs :

- ielem :** ordre des polynômes de Legendre ou de Lagrange. Les valeurs permises pour les polynômes de Lagrange sont 1 (polynômes linéaires), 2 (polynômes paraboliques), 3 (polynômes cubiques) ou 4 (polynômes quartiques). Dans le cas hexagonal seule $ielem = 1$ est permise.
- icol :** type de quadrature utilisée pour intégrer les matrices de masse et de rigidité. Les valeurs permises sont 1 (intégration analytique), 2 (quadrature de Gauss-Lobatto) ou 3 (quadrature de Gauss-Legendre). L'intégration analytique correspond à une approximation aux éléments finis classique ; la quadrature de Gauss-Lobatto correspond à la méthode de collocation variationnelle (de type TRIVAC) et la quadrature de Gauss-Lobatto correspond à une approximation aux éléments finis superconvergente. Dans le cas hexagonal seules les deux premières sont disponibles.
- iopt :** type d'éléments de base utilisé pour le cas hexagonal, $iopt = 1$ (hexagone au complet valeur par défaut) ou $iopt = 2$ (hexagone divisé en 6 triangles équilatéraux). Cette valeur ne doit pas figurer pour les autres géométries.