DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Solveur de transport NYMO Méthode PN-DG

Lahbib BOURHRARA

CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA

Séminaire : Mathématiques pour la neutronique

UPMC, 07/12/2018



- Généralités du solveur NYMO
- Formulation variationnelle
- Discrétisation et approximations
- Stratégie de résolution du système matriciel résultant
- Calcul exact des coefficients des matrices élémentaires
- Résultats numériques



- NYMO traite du problème de transport neutronique multigroupe.
- Il est basé sur la méthode P_N pour la variable angulaire.
- Il utilise la méthode des éléments finis pour la variable spatiale.
- Seule le problème à valeur propre est considéré : direct et adjoint.
- Condition aux limites : vide et réflexion spéculaire.



NYMO intègre deux solveurs NYMO-CG et NYMO-DG. Les deux utilisent la méthode P_N pour la variable angulaire mais ils se distinguent sur l'approximation spatiale :

NYMO-CG utilise la méthode des éléments finis continue de Lagrange. NYMO-DG utilise la méthode des éléments finis discontinue.

- NYMO-CG traite des géométries 1D (Segment), 2D (Triangle, Quadrangle) et 3D (Pentaèdre, Hexaèdre) mais il est limité à des maillages structurés et conformes.
- NYMO-DG traite des géométries 2D non structurées et non conformes. La généralisation aux géométries 2D extrudées est triviale.



Seul la version NYMO-DG sera présentée, cette version est plus intéressante pour trois raisons :

Primo : il traite des géométries plus complexes, *Secundo :* il utilise un maillage non conforme, *Tertio :* moins gourmand en espace mémoire.



Exemple de maillage 2D



Figure : Exemple de maillage (NYMO-DG).



Formulation variationnelle

$$\begin{cases} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla u + \sigma u = \mathbf{q} & \text{dans } X = D \times S^2, \\ u = \mathbf{f} & \text{sur } \Gamma_- = \partial D \times S^2 (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0). \end{cases}$$
(1)

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{f}$$
 sur $\Gamma_{-} = \partial D \times S^{2}(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0),$ (2)

Espace de solutions :

 $W = \{ u(x, \boldsymbol{\omega}) \in L^2(X); \ \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla u \in L^2(X); \ u_{|\Gamma_+} \in L^2\left(\Gamma_+, (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) \ \mathrm{d}\omega \ \mathrm{d}s \right) \}$ Formulation variationnelle :

trouver
$$u \in W$$
 tel que $a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in W$ (3)

avec

$$\begin{aligned} a(u,v) &= \int_X \frac{1}{\sigma} (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla u) (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla v) + \int_X \sigma uv + \int_{\Gamma_+} uv (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) \\ L(v) &= \int_X \mathbf{q} \left(\frac{1}{\sigma} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla v + v \right) - \int_{\Gamma_-} \mathbf{f} v (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) \\ (1) \text{ et } (2) \iff (3) \end{aligned}$$

Propriétés de la formulation variationnelle

- $a(u, v = 1) = L(v = 1) \Longrightarrow$ équation du bilan.
- La forme bilinéaire a est continue sur $W \times W$. Elle est symétrique et coercive. La forme linéaire L est continue sur W.
- Si on considère le terme de collision : q = H u + s, on perd la symétrie et la coercivité. Mais la condition inf-sup est satisfaite et la formulation rentre dans le cadre du théorème de Nečas.
- $H^1 \subset W$ avec injection continue. L'approximation de Galerkin avec comme espace d'approximation H^1 :

trouver
$$u \in H^1$$
 tel que $a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in H^1$

n'est autre que la formulation variationnelle de l'équation de diffusion avec les bonnes conditions aux limites.

• Par conséquent, le lemme de Céa donne une majoration de l'erreur du flux scalaire $\phi(x)$ solution de l'équation de diffusion par rapport au flux angulaire $u(x, \omega)$ solution de l'équation de transport :

$$||u - \phi||_W \le C \inf_{v \in H^1} ||u - v||_W.$$

La dérivation de la formulation variationnelle se fait en trois étapes :

1 on multiplie l'eq $(\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla u + \sigma u = q)$ par $\left(\frac{1}{\sigma}\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla v + v\right)$

 ${\bf 2}$ on intègre l'eq résultante sur l'espace de phase X

3 on utilise la formule de Green

$$\begin{split} \int_{X} (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla u) v + u(\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla v) &= \int_{\Gamma} uv(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) \\ &= \int_{\Gamma_{-}} uv(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) + \int_{\Gamma_{+}} uv(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) \\ &= \int_{\Gamma_{-}} \mathbf{f} v(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) + \int_{\Gamma_{+}} uv(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) \end{split}$$



$$u(x, \omega) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{k=-\ell}^{\ell} u_{\ell}^{k}(x) y_{\ell}^{k}(\omega)$$

- $y_{\ell}^k(\omega)$ sont les harmoniques sphériques réelles, elles forment une base complète de $L^2(S^2)$.
- $u_{\ell}^{k}(x)$ sont les moments du flux angulaire.

Approximation P_N d'ordre N :

$$u(x, \boldsymbol{\omega}) = \sum_{\ell=0}^{N} \sum_{k=-\ell}^{\ell} u_{\ell}^{k}(x) y_{\ell}^{k}(\boldsymbol{\omega})$$



Discrétisation du flux angulaire

$$D = \bigcup_{r} D_{r}, \qquad x \in D_{r} \quad u_{\ell}^{k}(x) = \sum_{j=1}^{J} u_{\ell,j}^{k} \varphi_{j}(x)$$

$$u(x, \boldsymbol{\omega}) = \sum_{\ell=0}^{N} \sum_{k=-\ell}^{\ell} \sum_{j=1}^{J} u_{\ell,j}^{k} \varphi_{j}(x) y_{\ell}^{k}(\boldsymbol{\omega})$$
$$q(x, \boldsymbol{\omega}) = \sum_{\ell=0}^{N} \sum_{k=-\ell}^{\ell} \sum_{j=1}^{J} q_{\ell,j}^{k} \varphi_{j}(x) y_{\ell}^{k}(\boldsymbol{\omega})$$
$$f(x, \boldsymbol{\omega}) = \sum_{k=0}^{N} \sum_{k=-\ell}^{\ell} \sum_{j=1}^{J} e_{\ell,j}^{k} \varphi_{j}(x) y_{\ell}^{k}(\boldsymbol{\omega})$$

$$f(x,\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\ell=0}^{N} \sum_{k=-\ell}^{\infty} \sum_{j=1}^{s} f_{\ell,j}^{k} \varphi_{j}(x) y_{\ell}^{k}(\boldsymbol{\omega})$$

On applique Galerkin, dans chaque région D_r , pour les deux variables x et ω avec comme espace des approximations $W_h^N = Vect\left(\varphi_j(x)y_\ell^k(\omega)\right)$:

trouver
$$u \in W_h^N$$
 tel que $a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in W_h^N$ (4)

Autrement dit, on remplaçe d'une part u, q, f (upwind) par leurs approximations et d'autre part v par $\varphi_i(x)y_n^m(\omega)$, on obtient un système matriciel dont les inconnus sont $u_{\ell,j}^k$.



Ecriture matricielle

$$A_r \ u = Q_r$$

avec

$$A_r u = \left(A_r^0 \Delta_r^0 + A_r^1 \Delta_r^1 + A_r^+\right) u + \sum_{f \in \partial D_r} A_f^- \widetilde{u}_f,$$

où

$$\Delta_r^0(i, n, m; j, \ell, k) = \delta_{n,\ell} \delta_{m,k} \delta_{i,j} \left(\frac{1}{\sigma}\right),$$

$$\Delta_r^1(i, n, m; j, \ell, k) = \delta_{n,\ell} \delta_{m,k} \delta_{i,j} (\sigma),$$

Après assemblage des matrices élémentaires :

$$A \ u = Q$$



$A \ u = Q, \qquad Au = \left(A^0 \Delta^0 + A^1 \Delta^1 + A^+ + A^-\right)u$

- Les matrices A^0 , A^1 , A^+ et A^- sont creuses et ne dépendent pas du groupe d'énergie. On ne stocke que les coefficients non nuls (format CSR).
- Solveurs : GMRES et BiCGStab.
- Pre-conditionneurs : diag et ilu0.
- L'opération matrice-vecteur est parallélisé à l'aide de OpenMP.
- La parallélisation à l'aide de MPI envisageable par une technique qui ressemble à la méthode de décomposition de domaine.

$$\begin{aligned} A_r^0(i,n,m;j,\ell,k) &= \sum_{p=1}^3 \sum_{q=1}^3 \left(\int_{D_r} \partial_p \varphi_i \partial_q \varphi_j \, \mathrm{d}x \right) \left(\int_{S^2} \omega_p \omega_q y_n^m y_\ell^k \, \mathrm{d}\omega \right) \\ A_r^1(i,n,m;j,\ell,k) &= \delta_{n,\ell} \delta_{m,k} \int_{D_r} \varphi_i \varphi_j \, \mathrm{d}x \\ A_r^2(i,n,m;j,\ell,k) &= \sum_{p=1}^3 \left(\int_{D_r} (\partial_p \varphi_i) \varphi_j \, \mathrm{d}x \right) \left(\int_{S^2} \omega_p y_n^m y_\ell^k \, \mathrm{d}\omega \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_r^+(i,n,m;j,\ell,k) &= \sum_{f\in\partial D_r} \int_f \varphi_i \varphi_j \int_{(\boldsymbol{\omega}\cdot \mathbf{n})>0} y_n^m y_\ell^k(\boldsymbol{\omega}\cdot \mathbf{n}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{\omega} \, \mathrm{d}s \\ A_f^-(i,n,m;j,\ell,k) &= \int_f \varphi_i \varphi_j \int_{(\boldsymbol{\omega}\cdot \mathbf{n})<0} y_n^m y_\ell^k(\boldsymbol{\omega}\cdot \mathbf{n}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{\omega} \, \mathrm{d}s \end{aligned}$$

$$X^{i}Y^{j} = div \ \vec{F}, \quad \text{avec} \quad \vec{F}(X,Y) = \frac{1}{i+1} \left(\begin{array}{c} X^{i+1}Y^{j} \\ 0 \end{array} \right)$$

$$\int_{D_r} X^i Y^j \, \mathrm{d}x = \int_{D_r} div \, \vec{F} \, \mathrm{d}x$$
$$= \int_{\partial D_r} \vec{F} \cdot n \, \mathrm{d}s$$
$$= \sum_{f \in \partial D_r} \int_f \vec{F} \cdot n \, \mathrm{d}s$$

Soit

202

$$\int_{D_r} X^i Y^j \ \mathrm{d}x = \frac{1}{i+1} \sum_{f \in \partial D_r} \int_f \ X^{i+1} Y^j \ n_x \ \mathrm{d}s$$



$$I = \int_f X^{i+1} Y^j \ n_x \ \mathrm{d}s$$

• Si la face f est un segment de droite de sommets $A(x_A, y_A)$ et $B(x_B, y_B)$:

$$I = \Delta_y \sum_{i'=0}^{i+1} \binom{i+1}{i'} (x_A)^{i+1-i'} (\Delta_x)^{i'} \sum_{j'=0}^{j} \binom{j}{j'} (y_A)^{j-j'} (\Delta_y)^{j'} \frac{1}{i'+j'+1}$$

où $\Delta_x = x_B - x_A$ et $\Delta_y = y_B - y_A$.

• Si la face f est un arc de rayon ρ , de centre $C(x_C, y_C)$ et d'angles (α, β) :

$$I = \rho \sum_{i'=0}^{i+1} \binom{i+1}{i'} (x_C)^{i+1-i'} \rho^{i'} \sum_{j'=0}^{j} \binom{j}{j'} (y_C)^{j-j'} \rho^{j'} \int_{\alpha}^{\beta} (\cos^{i'+1} s) (\sin^{j'} s) \, \mathrm{d}s$$

Le maillage 2D dans NYMO-DG est d'abord décrit par un nuage de points numérotés et donnés par leurs coordonnées (x,y): sommets des arêtes et centres des arcs et des cercles. Le maillage est ensuite décrit par les arêtes séparant deux régions de calcul. Chaque arête est décrite selon sa nature, segment de droite, arc de cercle ou un cercle :

- Un segment : (n_A, n_B) , (r_G, r_D)
- Un arc de cercle : ho, n_C , (n_A, n_B) , (r_G, r_D)
- Un cercle : ho, n_C , (r_G, r_D)

Le calcul des coefficients des matrices élémentaires se fait en parcourant toutes les arêtes du maillage et pour chaque arête on calcule sa contribution aux coefficients des matrices pour ses deux régions voisines r_G et r_D .

- 1 on se donne une famille de monômes translatés $((X x_0)^n (Y y_0)^m)$ où le point (x_0, y_0) est un origine local de la région D_r .
- 2 la famille $(\varphi_j)_{1\leq j\leq J}$ est construite par orthonormalisation dans chaque région D_r



Le benchmark C5G7 dans sa version 2D a été conçu pour fournir un point de comparaison permettant d'évaluer les capacités des codes de transport à traiter les problèmes de cœur de réacteur sans homogénéisation spatiale. La géométrie se présente comme un motif de 4x4 assemblages entourés de modérateur

- les assemblages internes (MOX/UOX) sont des motifs de 17x17 cellules.
- 7 groupes d'énergie avec choc isotrope.



Géométrie C5G7





Maillage C5G7





Figure : Cell geometry

Figure : Cell mesh





Figure : Maillage c5g7



Le calcul NYMO-DG est fait en 1/8 de cœur, 7599 régions de calcul, linéaire en espace.

$Ordre\ P_{N}$	keff	erreur en pcm	temps cpu en s
P_2	1.18672	14	71
P_4	1.18684	24	226
P_6	1.18704	41	575
P_1	1.18500	-131	37
P_3	1.18517	-116	130
P_5	1.18527	-108	385
MCNP	1.18655	± 8	

	puissance		puissance		
ordre	crayon Max	erreur (%)	crayon Min	erreur (%)	erreur max (%)
P_2	2.477	-0.80	0.233	0.69	1.32
P_4	2.487	-0.41	0.232	0.32	1.08
P_6	2.498	-0.41	0.232	0.27	1.15
P_1	2.515	0.71	0.233	0.68	2.98
P_3	2.511	0.54	0.232	0.26	1.75
P_5	2.502	0.18	0.232	0.38	1.25
MCNP	2.498	\pm 0.16	0.232	± 0.58	

Table : Erreur relative en pour cent de la puissance pour des crayons spécifiques

constant en espace.

$Ordre\ P_{N}$	keff	erreur en pcm	temps cpu en s
P_2	1.17887	651	13
P_4	1.17852	680	35
P_6	1.17838	692	85
P_1	1.17611	884	9
P_3	1.17788	734	22
P_5	1.17808	718	58
MCNP	1.18655	± 2	



MERCI



- Andrew Scott Bielen. Spherical harmonics solutions to second order forms of the Boltzmann transport equation using particle transport code SCEPTRE. Thesis Master of Science, Pennsylvania State University. Department of Mechanical and Nuclear Engineering, (2008).
- L. Bourhrara. New variational formulations for the neutron transport equation. Trans. Theory Statist. Phys., 33:93-124, (2004).
- L. Bourhrara. H1 Approximations of the neutron transport equation and associated diffusion equations. Trans. Theory Statist. Phys., 35:89-108, (2006).
- L. Bourhrara. WN Approximations of neutron transport equation. Trans. Theory Statist. Phys., 38:195-227, (2009).
- L. Bourhrara. An advanced numerical scheme to solve Boltzmann transport equation using PN method and discontinuous finite element method.



Flux scalaire



Figure : Flux scalaire : groupe 7



- Accélération par la même méthode mais avec un ordre P_{N} moins élevé et/ou un degré de polynômes en espace moindre.
- Parallélisation à l'aide de MPI par la technique de pseudo décomposition de domaine.
- Généralisation aux géométries 3D (2D extrudée).