

Singularités et estimation d'erreurs en approximation non-conforme pour le problème de la diffusion 2D

V. Louvet¹

¹Institut Camille Jordan
Université Lyon 1

Novembre 2005

Equations du problème

Discrétisation spatiale dans le cas régulier

- Méthodes nodales

- Méthodes nodales et Eléments finis non conformes

- Formulations variationnelles mixte hybride

- Méthodes de discrétisation mises en oeuvre

- Convergence dans le cas régulier

Problématique de la présence de singularités

- Positionnement du problème

- Problème de transmission

- Solution analytique au voisinage d'une singularité

- Majoration d'erreurs dans le cas singulier

- Mise en oeuvre numérique sur un domaine singulier

- Conclusions sur le problème des singularités

Conclusions et perspectives

Equations du problème

Discrétisation spatiale dans le cas régulier

Problématique de la présence de singularités

Conclusions et perspectives

Equations du problème

Equation de diffusion neutronique monogroupe 2D :

relation du bilan stationnaire en tout point $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ d'un réacteur de la population de neutrons d'un groupe d'énergie donné :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D\vec{\operatorname{grad}}\phi) + \Sigma\phi = S \text{ sur } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ \phi = 0 \text{ sur } \Gamma = \partial\Omega \end{cases}$$

D : coefficient de diffusion (en cm)

Σ : section efficace d'absorption

ϕ : flux neutronique (produit de la densité de neutrons par leur vitesse moyenne pour le groupe d'énergie considéré)

S : sources de neutrons.

Hypothèses sur les coefficients

- ▶ **Coefficients physiques** :

$$D, \Sigma \in L^\infty(\Omega),$$

$$\left. \begin{array}{l} D \geq \nu > 0 \\ \Sigma \geq 0 \end{array} \right\} \text{ presque partout sur } \Omega,$$

$$S \in L^2(\Omega).$$

- ▶ **Loi de Fick** : exprime l'idée que les neutrons diffusent des zones neutroniquement denses vers celles qui le sont moins.

$$\vec{J} = -D \text{grad} \phi \text{ sur } \Omega.$$

- ▶ \vec{J} : courant de neutrons.

Equations du problème

Discrétisation spatiale dans le cas régulier

Méthodes nodales

Méthodes nodales et Eléments finis non conformes

Formulations variationnelles mixte hybride

Méthodes de discrétisation mises en oeuvre

Convergence dans le cas régulier

Problématique de la présence de singularités

Conclusions et perspectives

Formalisme des méthodes nodales

Principes des méthodes nodales

- ▶ Décomposer le coeur du réacteur en **cellules de taille relativement importante, les noeuds**, où les flux sont traités en terme de **moyenne**.
- ▶ **Respect des principes physiques** à la base du problème par l'obtention d'équations de bilan neutronique moyennes.
- ▶ **Conservation** de certains moments du flux et de la composante normale du courant au passage des interfaces.

Equations issues des méthodes nodales

- ▶ Equations discrètes obtenues par **intégration sur les mailles** des équations de bilan physique.
- ▶ Equations de bilan complétées par des équations obtenues par **intégrations transverses** (intégration partielle suivant une direction transverse) reliant les moments du flux et ceux du courant.

Différents types de méthodes nodales

Méthodes nodales **polynomiales** : le flux est approché, dans chaque maille, par un **polynôme** (méthodes Σ , méthodes de type Hennart ...)

Méthodes nodales **analytiques** : les équations sont obtenues par intégrations transverses. Les flux transverses sont alors approchés par des solutions **analytiques**.

Méthodes nodales et Éléments finis non conforme

- ▶ **Egalité en moyenne** des flux et des courants sur les différents interfaces des noeuds \rightarrow certaines méthodes nodales s'apparentent à des éléments finis non conformes.
- ▶ **Décomposition du domaine**

$$\Omega = \bigcup_{K \in \Omega} K$$

où les mailles K ont leurs côtés parallèles aux axes.

- ▶ **Cas de la méthode nodale polynomiale Σ de degré 4** : développement du flux suivant un polynôme $p \in Q_{4,0} \cup Q_{0,4}$ où

$$Q_{kl} = \{x^\alpha y^\beta; \alpha \leq k, \beta \leq l\}$$

Cas de la méthode nodale Σ_4

- ▶ **Fonctions de base** $(f_i)_{i=1,4}$ combinaisons linéaires des éléments de $Q_{4,0} \cup Q_{0,4}$, d'intégrales nulles sur K , f_3, f_4 s'annulant sur ∂K .
- ▶ **Développement du flux** selon

$$\phi(x, y) = a_0 + \sum_{i=1}^4 a_i f_i(x) + \sum_{j=1}^4 b_j f_j(y)$$

- ▶ **Equations de la méthode** :
 - ▶ équation de bilan,
 - ▶ équations de bilans pondérés,
 - ▶ équations de continuité des courants

Formulation non conforme équivalente(1)

- ▶ Notation :

$$\bar{f} = \frac{1}{\text{Aire}(K)} \int_K f dx dy.$$

- ▶ Problème variationnel

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in V \text{ tel que } a_h(u, v) = L(v) \quad \forall v \in V \\ \text{avec } \left\{ \begin{array}{l} a_h(u, v) = \sum_{K \in \Omega} \int_K (D \nabla u \nabla v + \bar{\Sigma} \bar{u} \bar{v} dx dy \\ L(v) = \sum_{K \in \Omega} \int_K \bar{S} \bar{v} dx dy \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Formulation non conforme équivalente (2)

- ▶ Espace d'approximation non conforme

$$V_h = \{v_h, v_{h|_K} \in Q_{4,0} \cup Q_{0,4}, \quad v_h \text{ continue en moyenne sur } \partial K, \\ v_h = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$$

$$V_h \not\subset V$$

- ▶ Problème discret non conforme

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \phi_h \in V_h \text{ tel que} \\ a_h(\phi_h, \psi_h) = \int_{\Omega} \overline{S\psi_h} dx dy \forall \psi_h \in V_h \end{array} \right.$$

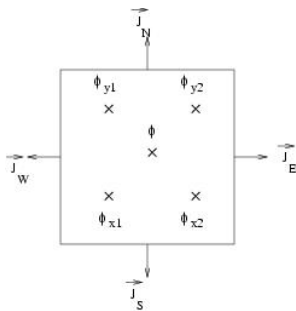
Formulations variationnelles mixte hybride

- ▶ **Intérêt des méthodes mixtes** : fournissent simultanément une approximation de ϕ et de J , contrairement à la formulation primale.
- ▶ **Intérêt des méthodes mixtes hybrides** : la matrice issue du système mixte n'est pas définie positive.
Relaxation de la contrainte de continuité sur $\vec{J} \cdot \vec{n}$ par l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange sur les interfaces internes.
- ▶ **Système mixte hybride**

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\vec{J}, \phi, \phi_F) \in H(\text{div}, \Omega) \times L^2(\Omega) \times L^2_0(\partial T_h) \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} \frac{\vec{J}}{D} \cdot \vec{q} d\Omega + \sum_{K \in T_h} \left(\int_K \phi \text{div} \vec{q} - \int_{\partial K} \phi_F \vec{q} \cdot \vec{n} \right) = 0 \quad \forall \vec{q} \in H(\text{div}, \Omega), \\ \sum_{K \in T_h} \int_K v \text{div} \vec{J} d\Omega + \int_{\Omega} \Sigma v \phi d\Omega = \int_{\Omega} S v d\Omega \quad \forall v \in L^2(\Omega) \\ \sum_{K \in T_h} \int_{\partial K} \mu \vec{J} \cdot \vec{n} = 0 \quad \forall \mu \in L^2_0(\partial T_h) \end{array} \right.$$

Méthode nodale Σ_4

- Degrés de liberté

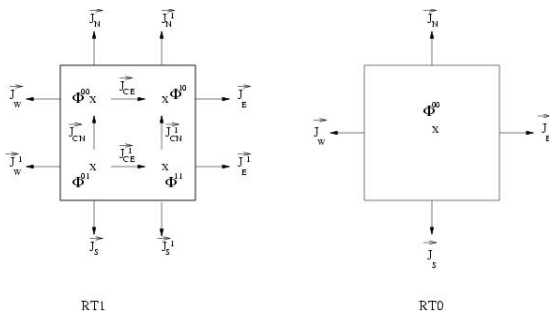


- Espaces d'approximation polynômiale

$$Q_{4,0} \cup Q_{0,4}$$

Éléments finis mixtes hybrides RT_k , $k = 0, 1$

► Degrés de liberté



► Espaces d'approximation polynômiale

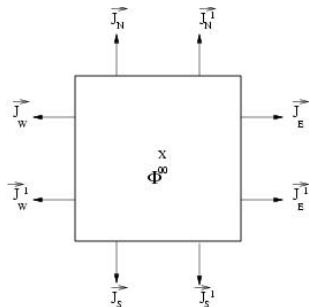
- Variable scalaire : $Q_{k,k}$
- Variable vectorielle : $Q_{k+1,k} \cup Q_{k,k+1}$

► Fonctions de base combinaisons linéaires de polynômes de Legendre.

Remarque : la méthode RT_0 est équivalente à la méthode nodale Σ_2 .

Éléments finis mixtes hybrides $BDM1$

- ▶ Degrés de liberté



- ▶ Espaces d'approximation polynômiale

- ▶ Variable scalaire : \mathcal{P}_0
- ▶ Variable vectorielle :

$$\mathcal{S}_k = \{ \mathcal{P}_k \times \mathcal{P}_k \} \oplus \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} P_{k+1,0} \\ -(2k+1)P_{k,1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -(2k+1)P_{1,k} \\ P_{0,k+1} \end{pmatrix} \right\}.$$

avec $\mathcal{P}_k = \{x^\alpha y^\beta; \alpha + \beta \leq k\}$ et $P_{kl} = P_k(x)P_l(y)$ où les P_i sont les polynômes de Legendre.

Convergence dans le cas régulier

- ▶ Les **ordres de convergences** des méthodes nodales et des éléments finis mixtes hybrides sont obtenus grâce à leur **équivalence** avec des éléments finis non conformes.
- ▶ Estimation d'erreur pour les **méthodes nodales Σ_2 et Σ_4** :

$$\| \phi - \phi_h \|_h \sim O(h).$$

- ▶ Estimation d'erreur pour l' **élément fini mixte hybride $RT1$** :

$$\| \phi - \phi_h \|_h \sim O(h^2).$$

- ▶ Estimation d'erreur pour l' **élément fini mixte hybride $BDM1$** :

$$\| \phi - \phi_h \|_h \sim O(h).$$

Equations du problème

Discretisation spatiale dans le cas régulier

Problématique de la présence de singularités

- Positionnement du problème

- Problème de transmission

- Solution analytique au voisinage d'une singularité

- Majoration d'erreurs dans le cas singulier

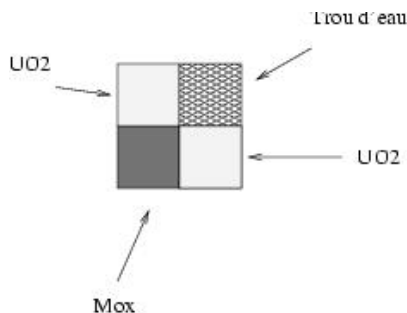
- Mise en oeuvre numérique sur un domaine singulier

- Conclusions sur le problème des singularités

Conclusions et perspectives

Positionnement du problème

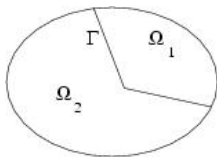
- ▶ Hétérogénéité forte des domaines de calcul :



- ▶ Coefficients neutroniques D et Σ constants par morceaux
- ▶ Cas physique pénalisant : damier uranium (UO_2) et bore (B_4C), absorbant neutronique :

$$\frac{D_{UO_2}}{D_{B_4C}} \sim 165.$$

Problème de transmission



- **Problème de diffusion 2D :**

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D \vec{\operatorname{grad}} \phi) + \Sigma \phi = S \text{ sur } \Omega = \Omega_1 \cap \Omega_2, \\ + \text{conditions aux limites,} \end{cases}$$

- équivalent au **problème de transmission** ($i = 1, 2$) :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D_i \vec{\operatorname{grad}} \phi_i) + \Sigma_i \phi_i = S_i & \text{on } \Omega_i, \\ \phi_i = 0 & \text{on } \partial \Omega_i \cap \partial \Omega, \\ \phi_i = \phi_j & \text{on } (\partial \Omega_i \cap \partial \Omega_j) \setminus \partial \Omega, \\ D_i \frac{\partial \phi_i}{\partial n_i} + D_j \frac{\partial \phi_j}{\partial n_j} = 0 & \text{on } (\partial \Omega_i \cap \partial \Omega_j) \setminus \partial \Omega, \end{cases}$$

Régularité de la solution du problème de transmission

- ▶ **Cas homogène** ($n = 1$)

$$\phi \in H^2(\Omega).$$

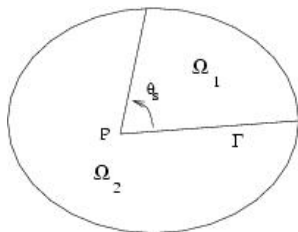
- ▶ **Cas hétérogène** ($n > 1$), les conditions de transmission dégradent le degré de régularité et donc la précision de la méthode de discrétisation utilisée.

Si les coefficients D_i sont discontinus à travers $\Gamma = (\Omega_1 \cap \Omega_2) \setminus \partial\Omega$, la dérivée normale de ϕ fera intervenir une mesure sur Γ donc $\phi \notin H_2(\Omega)$.

$$\phi \in W^{2,q}(\Omega) = \{v \in L^p(\Omega), \partial^\alpha v \in L^p(\Omega), |\alpha| \leq 2\}$$

avec $1 < q < 2$.

Solution analytique au voisinage d'une singularité (1)



- Soit le problème de **Sturm-Liouville** suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{d\theta} \left(D \frac{d\varphi}{d\theta} \right) + \alpha^2 D \varphi = 0 \text{ dans } \Omega_0, \\ \left. \begin{array}{l} \varphi \\ D\varphi' \end{array} \right\} \text{ continues en } \theta_s \text{ et } 0. \end{array} \right.$$

Solution analytique au voisinage d'une singularité (2)

- ▶ Ce problème admet une **suite dénombrable de valeurs propres α_k** et les fonctions propres associées φ_k sont périodiques et forment un **système orthogonal complet** de $L^2([0, 2\pi])$ vérifiant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^{2\pi} D\varphi_i \varphi_l d\theta = \delta_{jl}, \\ \int_0^{2\pi} D\varphi'_i \varphi'_l d\theta = \delta_{jl} \alpha_j^2. \end{array} \right.$$

- ▶ On développe la solution du problème de diffusion ϕ sous forme de **série des fonctions propres φ_n** et on introduit cette expression dans la **formulation variationnelle** du problème de diffusion.

Solution analytique au voisinage d'une singularité (3)

- Le choix approprié d'une **fonction test** et le **passage en polaire**, ainsi que l'utilisation des **conditions d'orthogonalité** des φ conduit à la résolution du système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r)\varphi_n(\theta), \\ \text{avec} \left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du_n}{dr} \right) + \frac{\alpha_n^2}{r^2} u_n(r) = f_n(r), \\ -\frac{d}{d\theta} \left(D \frac{d\varphi_n}{d\theta} \right) = \alpha_n^2 D \varphi_n. \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Résolution de l'équation en $u(r)$

- ▶ Equation différentielle linéaire du deuxième ordre :

$$u'' = -\frac{u'}{r} + \frac{\alpha^2}{r^2}u - f(r).$$

- ▶ La solution générale de cette équation contient un terme en r^α responsable du comportement singulier lorsque $0 < \alpha < 1$.

Résolution de l'équation en $\varphi(\theta)$ (1)

- ▶ Cas le plus usuel en calcul de coeur : géométrie rectangulaire donc $\theta_s = \frac{\pi}{2}$.

- ▶ Solutions générales du problème de **Sturm-Liouville** :

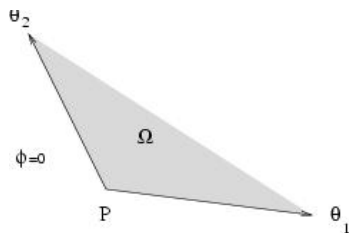
$$\varphi_i = \varphi|_{\Omega_i} = A_i \cos(\alpha\theta) + B_i \sin(\alpha\theta).$$

- ▶ L'expression des conditions de transmissions conduisent à un **système d'équations algébriques homogène** qui aura une solution non triviale si son **déterminant est nul**.
- ▶ On obtient pour le cas d'un **point intérieur** :

$$\alpha = \frac{1}{\pi} \arccos \frac{-(\Delta^2 + 6\Delta + 1)}{2\Delta^2 + 4\Delta + 2}.$$

avec $\Delta = \frac{D_2}{D_1}$.

Résolution de l'équation en $\varphi(\theta)$ (2)



- Pour le cas d'un **point à la frontière**, on aura la solution

$$\alpha = \frac{\theta_2}{\pi}$$

Reconstruction du flux

- ▶ On peut reconstruire la forme particulière du flux au **voisinage de la singularité** :

$$\phi(r, \theta) = r^\alpha \varphi(\theta) + \phi_r(r, \theta)$$

avec $\phi_r \in H^2(\Omega)$ et $\alpha \leq 1$.

- ▶ **Valeur de α** :
 - ▶ Pour un **point intérieur** :

$$\frac{2}{3} \leq \alpha \leq 1.$$

- ▶ Pour un **point frontière**, $\alpha < 1 \rightarrow \theta_2 > \pi$, c'est à dire que les singularités se localiseront aux coins rentrants.

Majoration d'erreurs dans le cas singulier

- ▶ On utilise ici le fait que les méthodes de discrétisation utilisées sont équivalentes à des **éléments finis non conformes**.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u_h \in V_h \text{ tel que } a_h(u_h, v_h) = f(v_h) \quad \forall v_h \in V_h \\ \text{avec } \left\{ \begin{array}{l} a_h(u_h, v_h) = \sum_K \int_K (D \nabla u_h \nabla v_h + \sigma u_h v_h) dx dy, \\ f(v_h) = \int_{\Omega} S v_h dx dy. \end{array} \right. \end{array} \right.$$

- ▶ On utilise également l'expression analytique du flux :

$$u = u_r + u_s \quad \text{avec } \left\{ \begin{array}{l} u_r \in H_0^2(\Omega), \\ u_s = r^\alpha \varphi(\theta), \quad 0 < \alpha < 1. \end{array} \right.$$

Théorèmes de convergence dans le cas singulier

- ▶ Soit u la solution exacte du problème continu, et u_h la solution approchée de la méthode non conforme. Alors, quelque soit l'approximation choisie (au moins \mathcal{P}_1), il existe une constante C indépendante de h telle que :

$$\|u - u_h\|_h \sim O(h^\alpha) + O(h)$$

où $0 < \alpha < 1$ représente la valeur de la singularité.

- ▶ Soit u la solution exacte du problème continu, et u_h la solution approchée par la méthode non conforme équivalente à l'élément nodal $\Sigma 4$. Alors, on a l'estimation d'erreur suivante :

$$|u - u_h|_0 \sim O(h^2 + h^{2\alpha} + h^{\alpha+1}),$$

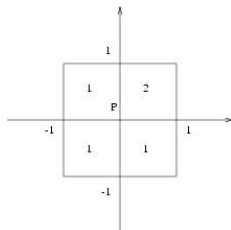
où $0 < \alpha < 1$ représente la valeur de la singularité.

Mise en oeuvre numérique sur un domaine singulier

- ▶ Les études théoriques montrent une **dégradation de l'approximation** dépendant du rapport des coefficients de diffusion des mailles voisines.
- ▶ Vérification numérique de ces résultats sur les différentes méthodes de discrétisation présentées.
- ▶ On considère une source $S \in L^2(\Omega)$ et on évalue l'erreur en fonction de la différence entre les solutions calculées. Si β est l'ordre de convergence recherché, on peut l'estimer par :

$$\ln \left(\frac{\| \phi_h - \phi_{\frac{h}{2}} \|_2}{\| \phi_{\frac{h}{2}} - \phi_{\frac{h}{4}} \|_2} \right) \leq \beta \ln 2.$$

Résultats sur un domaine singulier



- ▶ Test sur un damier $UO_2 - B_4C$, la région Ω_2 comportant le bore.
- ▶ Dans ce cas très pénalisant, on a :

$$\frac{D1}{D2} \sim 165 \longrightarrow \alpha = 0.67$$

c'est-à-dire α très proche de la valeur limite $\frac{2}{3}$.

Comparaisons des résultats sur des domaines régulier et singulier

Domaine régulier

h	RT0	BDM1	$\Sigma 4$	RT1
1	1.49	1.02	1.97	2.90
1/2	1.88	1.80	2.01	3.77
1/3	1.95	1.91	1.99	3.89
1/4	1.97	1.95	1.98	3.94
1/5	1.98	1.97	1.98	3.96
1/6	1.98	1.97	1.98	3.97

Domaine singulier

h	RT0	BDM1	$\Sigma 4$	RT1
1	0.01	2.54	-0.23	2.70
1/2	1.66	1.58	1.74	3.22
1/3	1.86	1.99	1.83	3.26
1/4	1.91	2.03	1.87	3.22
1/5	1.94	2.03	1.90	3.15
1/6	1.95	2.03	1.92	3.15

Conclusions sur le problème des singularités

- ▶ L'ordre de convergence de l'élément BDM1 est très proche de celui du cas homogène.
- ▶ Les éléments RT0 et $\Sigma 4$ ont un ordre à peine dégradé par rapport à ceux indiqués dans le tableau (1,9 contre 2,0 environ).
- ▶ L'approximation RT1 est affectée de façon plus importante par la présence de cette singularité puisque son ordre de convergence descend à environ 3,2.

Plusieurs explications peuvent être proposées pour comprendre ces comportements :

- ▶ Les éléments d'ordre supérieur tel que RT1 nécessitent, pour que l'évaluation théorique soit valable en pratique, une très grande régularité de la solution (pour RT1, la théorie donne une estimation en $O(h^3)$ si la solution est dans $H^3(\Omega)$).
- ▶ Le fait que l'élément BDM1 contienne beaucoup de degrés de liberté surfaciques permet de penser que le passage des interfaces est mieux calculé et que les discontinuités des coefficients de diffusion neutroniques sont prises en compte de façon plus précise que pour les éléments de même ordre ne comprenant qu'un seul degré de liberté par face.

Remarque sur le problème des singularités

- ▶ La **section efficace d'absorption** Σ semble influencer le calcul en pratique, alors que théoriquement elle n'intervient pas dans les majorations d'erreur. Les ordres de convergence sont moins dégradés dans le cas UO_2/B_4C où Σ n'est pas constante que dans un cas similaire où on considère Σ constante.
- ▶ Le rapport $\frac{\Sigma}{D}$ est lié à la **longueur de migration des neutrons**. Si cette grandeur varie peu d'un matériau à l'autre, le flux sera peu perturbé et la singularité aura un impact limité.

Equations du problème

Discrétisation spatiale dans le cas régulier

Problématique de la présence de singularités

Conclusions et perspectives

Conclusions et perspectives

- ▶ **Méthodes nodales et éléments finis mixtes hybrides** utilisés régulièrement dans les calculs de réacteurs.
- ▶ Comparaisons des méthodes nodales **polynomiales** et des méthodes nodales **analytiques**, notamment sur ces problèmes de singularités.
- ▶ Utilisation des codes développés dans d'autres domaines en particulier dans les problèmes d'**écoulements des eaux souterraines** où la loi de Darcy peut impliquer des solutions irrégulières.
- ▶ **Optimisation et parallélisation** des codes pour traiter des cas de plus en plus complexe (géométrie 3D fine notamment).