

Analyse et développement de méthodes de raffinement hp en espace pour l'équation de transport des neutrons

Damien Fournier

▶ **To cite this version:**

Damien Fournier. Analyse et développement de méthodes de raffinement hp en espace pour l'équation de transport des neutrons. Analyse numérique [math.NA]. Aix-Marseille Université, 2011. Français. NNT : 2011AIX10085 . tel-00769546

HAL Id: tel-00769546

https://theses.hal.science/tel-00769546

Submitted on 2 Jan 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Provence
Marseille

THÈSE

présentée et soutenue publiquement
par

Damien Fournier

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Provence
Spécialité : Mathématiques appliquées

Analyse et Développement de Méthodes de Raffinement hp en Espace pour l'Equation de Transport des Neutrons

Soutenue le 10 octobre 2011,
devant le jury composé de :

J. L. Guermond	Rapporteur
R. Sanchez	Rapporteur
R. Herbin	Directrice de thèse
P. Angot	Examinateur
T. Goudon	Examinateur
H. Guillard	Examinateur
R. Le Tellier	Encadrant CEA

Résumé

Pour la conception des cœurs de réacteurs de 4$^{\text{ème}}$ génération, une précision accrue est requise pour les calculs des différents paramètres neutroniques. Les ressources mémoire et le temps de calcul étant limités, une solution consiste à utiliser des méthodes de raffinement de maillage afin de résoudre l'équation de transport des neutrons. Le flux neutronique, solution de cette équation, dépend de l'énergie, l'angle et l'espace. Les différentes variables sont discrétisées de manière successive. L'énergie avec une approche multi-groupe, considérant les différentes grandeurs constantes sur chaque groupe, l'angle par une méthode de collocation, dite approximation S_N. Après discrétisation énergétique et angulaire, un système d'équations hyperboliques couplées ne dépendant plus que de la variable d'espace doit être résolu. Des éléments finis discontinus sont alors utilisés afin de permettre la mise en place de méthodes de raffinement dite *hp*. La précision de la solution peut alors être améliorée via un raffinement en espace ($h-$raffinement), consistant à subdiviser une cellule en sous-cellules, ou en ordre ($p-$raffinement) en augmentant l'ordre de la base de polynômes utilisée.

Dans cette thèse, les propriétés de ces méthodes sont analysées et montrent l'importance de la régularité de la solution dans le choix du type de raffinement. Ainsi deux estimateurs d'erreurs permettant de mener le raffinement ont été utilisés. Le premier, suppose des hypothèses de régularité très fortes (solution analytique) alors que le second utilise seulement le fait que la solution est à variations bornées. La comparaison de ces deux estimateurs est faite sur des benchmarks dont on connaît la solution exacte grâce à des méthodes de solutions manufacturées. On peut ainsi analyser le comportement des estimateurs au regard de la régularité de la solution. Grâce à cette étude, une stratégie de raffinement *hp* utilisant ces deux estimateurs est proposée et comparée à d'autres méthodes rencontrées dans la littérature. L'ensemble des comparaisons est réalisé tant sur des cas simplifiés où l'on connaît la solution exacte que sur des cas réalistes issus de la physique des

réacteurs.

Ces méthodes adaptatives permettent de réduire considérablement l'empreinte mémoire et le temps de calcul. Afin d'essayer d'améliorer encore ces deux aspects, on propose d'utiliser des maillages différents par groupe d'énergie. En effet, l'allure spatiale du flux étant très dépendante du domaine énergétique, il n'y a *a priori* aucune raison d'utiliser la même décomposition spatiale. Une telle approche nous oblige à modifier les estimateurs initiaux afin de prendre en compte le couplage entre les différentes énergies. L'étude de ce couplage est réalisé de manière théorique et des solutions numériques sont proposées puis testées.

The different neutronic parameters have to be calculated with a higher accuracy in order to design the 4^{th} generation reactor cores. As memory storage and computation time are limited, adaptive methods are a solution to solve the neutron transport equation. The neutronic flux, solution of this equation, depends on the energy, angle and space. The different variables are successively discretized. The energy with a multigroup approach, considering the different quantities to be constant on each group, the angle by a collocation method called S_N approximation. Once the energy and angle variable are discretized, a system of spatially-dependent hyperbolic equations has to be solved. Discontinuous finite elements are used to make possible the development of $hp-$refinement methods. Thus, the accuracy of the solution can be improved by spatial refinement ($h-$refinement), consisting into subdividing a cell into subcells, or by order refinement ($p-$refinement), by increasing the order of the polynomial basis.

In this thesis, the properties of this methods are analyzed showing the importance of the regularity of the solution to choose the type of refinement. Thus, two error estimators are used to lead the refinement process. Whereas the first one requires high regularity hypothesis (analytical solution), the second one supposes only the minimal hypothesis required for the solution to exist. The comparison of both estimators is done on benchmarks where the analytic solution is known by the method of manufactured solutions. Thus, the behaviour of the solution as a regard of the regularity can

be studied. It leads to a $hp-$refinement method using the two estimators. Then, a comparison is done with other existing methods on simplified but also realistic benchmarks coming from nuclear cores.

These adaptive methods considerably reduces the computational cost and memory footprint. To further improve these two points, an approach with energy-dependent meshes is proposed. Actually, as the flux behaviour is very different depending on the energy, there is no reason to use the same spatial discretization. Such an approach implies to modify the initial estimators in order to take into account the coupling between groups. This study is done from a theoretical as well as from a numerical point of view.

Remerciements

Je voudrais commencer par remercier Romain Le Tellier pour son encadrement au quotidien et avoir su orienter ce travail et me guider tout au long de ces trois années. Ses conseils ont toujours été précieux et nos discussions importantes pour faire évoluer ce projet. Ses remarques sur le manuscrit ont été fondamentales pour le rendre plus clair et compréhensible. Merci également pour tous les moments passés en dehors du travail et qui furent toujours un plaisir.

Merci à Raphaèle Herbin pour avoir accepté d'encadrer cette thèse ; sa connaissance sur les équations hyperboliques m'a été précieuse pour faire évoluer les aspects plus théoriques de mon travail.

Je remercie Jean-Luc Guermond et Richard Sanchez d'avoir accepté la lourde tâche de relire ce manuscrit. Leurs commentaires auront permis d'améliorer ce manuscrit. Merci également à Philippe Angot, Thierry Goudon et Hervé Guillard pour l'intérêt porté à mes travaux et pour avoir accepté de faire partie du jury de cette thèse.

Mes pensées vont également à Jean-Michel Ruggieri pour m'avoir tout d'abord accueilli en stage dans son laboratoire au LEPh puis pour m'avoir proposé ce sujet de thèse. Merci pour l'esprit qu'il a inculqué à ce laboratoire où il fut toujours agréable de travailler. Merci à notre nouveau chef, Cyrille de Saint Jean, avec qui il est toujours plaisant de discuter.

Je remercie Christophe Suteau qui constitua avec Romain l'équipe de développement du solveur SNATCH me fournissant ainsi un outil idéal pour tester mes méthodes. Il a beaucoup œuvré pour la réussite et la cohésion de ce projet qu'il en soit remercié.
Merci à Pascal Archier pour son enthousiasme à tester mes méthodes sur les cas réalistes et pour tous nos échanges sur les différents outils utiles au

chercheur. Bonne continuation au sein du LEPh !

Un grand merci à tous les membres du laboratoire pour leur sympathie et leur bonne humeur qui ont égayé les différentes pauses et m'ont permis de travailler dans d'excellentes conditions. Merci à tous les stagiaires, thésards et apprentis qui ont fait un passage plus ou moins long dans ce laboratoire et ont apporté leur dynamisme et énergie : Philippe qui a partagé mon bureau pendant si longtemps, Benoît qui fut le père de tous les thésards et a fini par devenir vraiment père, Adrien avec qui j'ai pu partager ces trois années de thèse, Eulogia et Laura les deux presques inséparables comparses, Cristian pour m'avoir supporté pendant nos quelques mois de collocation (et me supporter encore), Ansar, Simon, David et Nicolas. Un immense merci à Claudia pour tous ces bons moments partagés et pour son soutien en particulier dans les derniers moments de cette thèse.

Enfin, j'exprime toute ma gratitude à ma famille pour m'avoir supporté tout au long de ma scolarité et pendant ces trois années de thèse. Leur soutien fut toujours fondamental.

Table des matières

Table des figures vii

1 Contexte d'étude 3

1.1 Présentation du problème . . . 3

1.2 Discrétisation de l'équation de Boltzmann . . . 7

1.2.1 Discrétisation énergétique . . . 7

1.2.2 Discrétisation angulaire et présentation des modèles d'études . . . 8

1.2.2.1 Cas tests utilisés pour le modèle 1 . . . 10

1.2.2.2 Cas tests utilisés pour le modèle 2 . . . 11

1.2.2.3 Moyens de comparaison des stratégies . . . 12

1.2.3 Discrétisation spatiale . . . 13

1.3 AMR en neutronique et objectifs de la thèse . . . 17

1.3.1 Méthodes de raffinement sur l'angle . . . 19

1.3.2 Méthodes de raffinement en espace . . . 20

1.3.2.1 Estimateur d'erreur . . . 20

1.3.2.2 Raffinement suivant une quantité d'intérêt . . . 22

1.3.3 Méthodes de raffinement *hp* . . . 23

1.3.3.1 Utilisation d'informations *a priori* . . . 23

1.3.3.2 Pseudo-méthode *hp* : "Texas 3-step" . . . 24

1.3.3.3 Méthodes utilisant deux maillages . . . 24

1.3.3.4 Estimation locale de la régularité . . . 25

1.4 Aspects informatiques . . . 26

1.4.1 Composition du solveur . . . 26

1.4.2 Éléments nécessaires à l'adaptation de maillage . . . 26

2 Modèle 1 : Equation de transport spatiale 29

2.1 Estimateurs d'erreur *a priori* . . . 29

2.1.1 Convergence du $h-$raffinement . . . 29

2.1.2 Convergence du $p-$raffinement . . . 30
2.2 Estimateur d'erreur *a posteriori* . . . 33
2.2.1 Estimateur d'erreur avec des hypothèses de régularité fortes . . . 33
2.2.2 Estimateur d'erreur avec des hypothèses de régularité faibles . . . 37
2.3 Stratégies *hp* . . . 41
2.3.1 Stratégie à 2 estimateurs . . . 42
2.3.2 Utilisation des vitesses de convergence théoriques . . . 43
2.3.3 Comparaison des différentes méthodes de raffinement *hp* . . . 45
2.4 Article 1 : Analyse de l'estimateur de Radau . . . 46
2.4.1 Introduction . . . 47
2.4.2 The upwind discontinuous Galerkin method . . . 49
2.4.3 Error estimator for a conforming mesh . . . 51
2.4.3.1 Estimator theory . . . 51
2.4.3.2 Estimator computation . . . 57
2.4.3.3 Estimator efficiency . . . 57
2.4.4 Estimator limitations for non-conforming meshes or different orders 59
2.4.4.1 Different polynomial basis orders . . . 60
2.4.4.2 Non-conforming meshes . . . 62
2.4.5 Use for Adaptive Mesh Refinement . . . 63
2.4.6 Conclusions . . . 66

3 Modèle 2 : Système hyberbolique couplé 67
3.1 Utilisation d'un seul maillage . . . 69
3.2 Intérêt de maillages spatiaux dépendant de l'énergie . . . 71
3.3 Estimateur de Radau sur le système hyperbolique . . . 72
3.4 Adaptation de maillage dépendante de l'énergie . . . 78
3.5 Article 2 : Adaptation de maillage sur un cas réaliste . . . 81
3.5.1 Introduction . . . 82
3.5.2 The CIRANO ZONA2B Core : Conforming and Non Conforming Description . . . 84
3.5.3 Error Calculation . . . 85
3.5.4 Comparison of the Different Strategies on the 2D Case . . . 86
3.5.4.1 Comparison of $h-$ and $p-$ Refinement Methods . . . 86
3.5.4.2 The Energy-dependent AMR . . . 88
3.5.5 Improvements in the 3D Case . . . 91
3.5.6 Conclusions . . . 94

4 Conclusions et perspectives **95**
4.1 Conclusions . . . 95
4.2 Perspectives . . . 97

5 Annexe 1 : Estimateur d'erreur en discrétisation volumes finis **99**

6 Annexe 2 : Estimateur d'erreur en discrétisation Galerkin discontinu **111**

7 Annexe 3 : Proceeding M&C, méthodes de raffinement hp **121**
7.1 Introduction . . . 122
7.2 Analysis of Refinement Strategies . . . 123
7.3 Radau Estimator . . . 127
7.4 Finite Volume Inspired Estimator . . . 128
7.5 Comparison of the Two Estimators . . . 128
7.5.1 Comparison on the MMS0 Benchmark . . . 129
7.5.2 Comparison on the MMS1 Benchmark . . . 130
7.6 HP-Refinement Strategy . . . 132
7.7 Conclusions . . . 135
Bibliographie . . . 136

Table des figures

1 Principe du raffinement 2

1.1 Description de la géométrie et erreur en nome L^2 associée 3
1.2 Notations utilisées pour décrire le domaine spatial 5
1.3 Cas tests utilisés pour le modèle 1 (cas MMS et benchmark de protection) 11
1.4 Cas d'étude réaliste : le cœur ZONA2B 12
1.5 Méthodes de discrétisation des différentes variables 15
1.6 Notations utilisées pour décrire le domaine spatial 16
1.7 Illustration du $h-$raffinement 19
1.8 Bases de fonctions à l'ordre deux (gauche) et trois (droite) 19
1.9 Organisation de la partie Solveur dans SNATCH 26

2.1 Erreur en norme L^2 pour le benchmark MMS0 (gauche) et MMS1 (droite) en raffinement uniforme en h 31
2.2 Erreur en norme L^2 pour un raffinement uniforme en p pour les benchmarks MMS0 (gauche) et MMS1 (droite) 33
2.3 Indice d'efficacité sur un maillage conforme pour les benchmarks MMS0 (gauche) et MMS1 (droite) 35
2.4 Indice d'efficacité pour le benchmark MMS1 dans le cas du raffinement (gauche) ou déraffinement (droite) d'une cellule 36
2.5 Estimateur de Radau sur le maillage initial (gauche) et maillage obtenu après raffinement (droite) sur le cas MMS0 36
2.6 Estimateur de Radau sur le maillage initial (gauche) et maillage obtenu après raffinement (droite) sur le cas MMS1 37
2.7 Comparaison de η_1^1 et η_1^2 en fonction de dof et de p pour les cas MMS0 (gauche) et MMS1 (droite) 39
2.8 Erreur L^2 sur le cas MMS0 suivant les termes conservés dans l'estimateur E^{DG} 40
2.9 Représentation de $\eta_{1,K}^2$ (gauche) et de $\eta_{1,K}^2+\eta_{2,K}^2$ (droite) sur le cas MMS0 40

2.10 Maillage obtenu en raffinant avec $\tilde{E}^{DG}$ (gauche) et comparaison de la convergence avec un raffinement suivant E^R (droite) sur le cas MMS0 . 41
2.11 Maillage obtenu en raffinant avec $\tilde{E}^{DG}$ (gauche) et comparaison de la convergence avec un raffinement suivant E^R (droite) sur le cas MMS1 . 42
2.12 Comparaison de $\tilde{E}^{DG}$ (gauche), E^R (milieu) et ϵ_{L^1} (droite) sur le cas MMS0 avec 64 (haut) et 832 (bas) cellules 43
2.13 Comparaison de différentes stratégies de raffinement hp sur les cas MMS0 (gauche) et MMS1 (droite) 46
2.14 Notations utilisées pour la trace dans l'article (gauche) et la thèse (droite) 46
2.15 Cell and domain notations 49
2.16 Configuration with a conforming mesh and a uniform basis order 52
2.17 Simplified test configuration 58
2.18 Effectivity index in the conforming case for the MMS0 (left) and MMS1 (right) 59
2.19 Configuration with a local increase of the basis order $C_{p\to p+1}$ (left) and decrease $C_{p+1\to p}$ (right) 60
2.20 Effectivity index in $C_{p\to p+1}$ configuration ($p+1$ in the cross-marked cell) (left) and $C_{p+1\to p}$ (right) applying Theorem 9 61
2.21 Local $L^2(\kappa)$-Error (left) in $C_{p+1\to p}$ configuration (p in the cross-marked cell) and effectivity index in $C_{p\to p+1}$ configuration (right) applying Theorem 2 62
2.22 Configuration with a local mesh coarsening $C_{\frac{h}{2}\to h}$ (left) and refinement $C_{h\to\frac{h}{2}}$ (right) 62
2.23 Effectivity index in $C_{\frac{h}{2}\to h}$ (left) and $C_{h\to\frac{h}{2}}$ configurations (right) 63
2.24 Shielding benchmark geometry (left) and Reference angular flux $\phi(\vec{\Omega}_1)$ (right) 64
2.25 Refined mesh obtained for the shielding benchmark (degrees of freedom = 45801) 64
2.26 Comparison of different refinement strategies 65
2.27 Comparison of $h-$refinement with the estimated and real error ($p=2$) . 65
2.28 Estimated (left) and real (error) error (degrees of freedom = 2871) . . . 66

3.1 Erreur sur le flux en norme L^2 en fonction de dof pour les stratégies adaptatives et uniformes sur le cas ZONA2B 69
3.2 Erreur sur le flux en norme L^2 en fonction de dof (gauche) et du temps (droite) pour les stratégies hp sur le cas ZONA2B 70

3.3 Erreur sur le flux en norme L^2 en fonction de dof (gauche) et du temps (droite) pour les stratégies hp sur le cas ZONA2B en 3D 71
3.4 Flux dans une zone thermique (gauche) et rapide (droite) pour le cas ZONA2B 72
3.5 Erreur sur le flux en norme L^2 (gauche) et en réactivité (en pcm à droite) en fonction de dof sur le cas ZONA2B avec des maillages différents selon l'énergie 72
3.6 Indice d'efficacité avec l'erreur estimé par Eq. 3.32 et par Eq. 3.30 . . . 76
3.7 Représentation spatiale de l'efficacité avec estimation d'erreur faite par Eq. 3.30 dans le groupe 2 77
3.8 estimateur sans couplage (haut) dans le groupe 1 (gauche) et 2 (droite), erreur L^2 (en bas à gauche), et erreur estimée par Eq. 3.30 (en bas à droite) pour le groupe 2 dans le cas de protection 77
3.9 Convergence sur le cas de protection à 2 groupes avec un seul matériau (gauche) et deux matériaux différents (droite) avec et sans couplage . . 78
3.10 Erreur L^2 (gauche) et sur le k_{eff} en pcm (droite) avec ou sans prise en compte du couplage sur le cas ZONA2B 80
3.11 2D conforming (left) and non conforming (right) mesh 84
3.12 Reactivity error as a function of dof for adaptive refinement strategies and comparison with ERANOS mesh 86
3.13 Flux error as a function of dof (left) and time (right) for adaptive and uniform refinement strategies 88
3.14 Current error as a function of dof for adaptive and uniform refinement strategies 89
3.15 Final meshes obtained for macro-groups 1 to 6 90
3.16 Convergence with energy-dependent or independent meshes 91
3.17 3D initial non conforming mesh (left) and refined mesh (right) 92
3.18 Reactivity as a function of dof for adaptive and uniform refinement strategies 92
3.19 Flux error as a function of dof (left) and time (right) for adaptive and uniform refinement strategies 93

7.1 L^2-error for the MMS0 (left) and MMS1 (right) benchmark with uniform refinement 125
7.2 C_{p+1} and $C_p\gamma_{p,s}$ coefficients as a function of p for the MMS0 (left) and MMS1 (right) benchmarks 126

7.3 C_p versus p curvefitting in the MMS0 benchmark 127
7.4 Notations in the FV context 128
7.5 Comparaison de $\tilde{E}^{DG}$ (gauche), E^R (milieu) et ϵ_{L^1} (droite) sur le cas MMS0 avec 64 (haut) et 832 (bas) cellules 130
7.6 Mesh obtained when refining with E^{FV} (left) and E^r (right) (724 cells) 131
7.7 $\tilde{E}^r$, $\tilde{E}^r$ and $\tilde{\epsilon}_{L^1}$ with 256 cells and 460 cells 131
7.8 L^2-error versus dof (left) and time (right) for the MMS0 benchmark with different refinement strategies 133
7.9 L^2-error versus dof (left) and time (right) for the MMS1 benchmark with different refinement strategies 134

Introduction

Pour les simulations numériques, les méthodes de raffinement de maillage (AMR, adaptive mesh refinement) sont de plus en plus utilisées dans des champs d'application variés (67). Elles permettent d'améliorer le temps de calcul et l'empreinte mémoire sans dégrader la précision du résultat final. Malgré les progrès constants des ressources informatiques, ces méthodes sont en vogue pour la résolution des équations aux dérivées partielles (PDE) car elles amènent à des vitesses de convergence extrêmement rapides. Les performances des algorithmes adaptatifs sont directement liées à la qualité de l'estimateur d'erreur. C'est cette quantité qui va guider le processus de raffinement. Dans les zones où l'erreur est supposée importante, les cellules seront raffinées afin d'amener à davantage de précision. Le principe est présenté Figure 1.

Dans cette thèse, nous allons mettre en place un tel mécanisme pour l'équation de transport des neutrons en physique des réacteurs. En effet, dans la cadre de la conception des cœurs de $4^{\text{ème}}$ génération, des calculs plus précis sont demandés afin d'aboutir à des concepts de réacteurs plus performants vis-à-vis de divers critères (économie de combustible, sûreté, production de déchets). Trois des six prototypes de réacteurs de $4^{\text{ème}}$ génération sont des réacteurs à neutrons rapides (RNR). Dans ce cadre, le code principalement utilisé au CEA est le code ERANOS (79). Dans l'optique de calculs plus précis, on cherche à ajouter des fonctionnalités de raffinement de maillage à ce code. Nous verrons que le problème spatial sera discrétisé par des éléments finis, le raffinement pourra donc être effectué de manière spatiale ($h-$raffinement) ou en augmentant l'ordre de la base de polynômes ($p-$raffinement).

Ce travail consiste à construire des estimateurs d'erreurs qui soient rapides et efficaces et à trouver un critère pour choisir entre le $h-$ et le $p-$raffinement afin de faire décroître l'erreur le plus efficacement possible.

Ce document est découpé en trois grandes parties. On commence par introduire

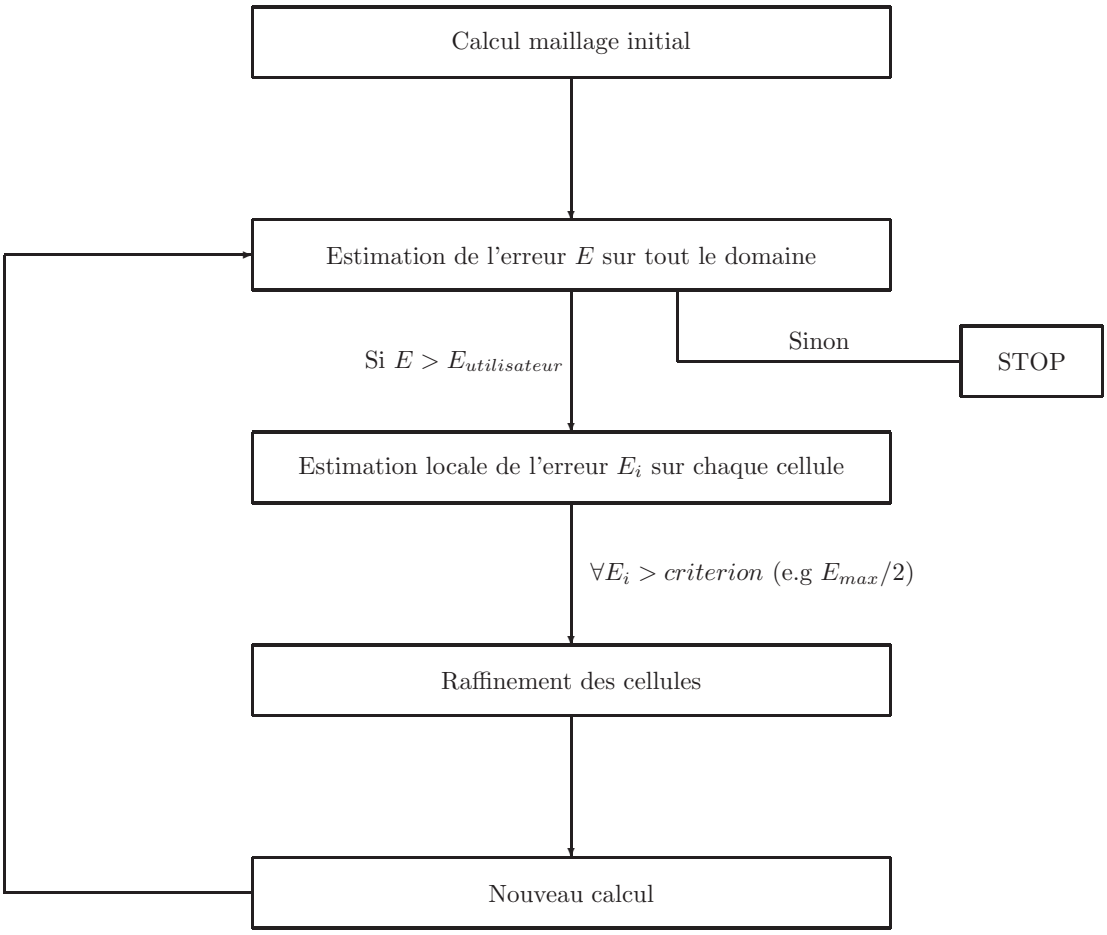


Figure 1: Principe du raffinement

le problème en expliquant les choix de discrétisation effectués pour les différentes variables de l'équation de transport des neutrons et le contexte général de l'adaptation de maillage en neutronique. On en déduit deux modèles qui seront étudiés dans les parties suivantes. En premier lieu, on travaille sur une équation de transport-réaction avec les hypothèses de régularité traditionnellement rencontrées dans les cas réalistes. Des estimateurs d'erreurs sont dérivés dans ce cadre et une méthodologie pour déterminer le type de raffinement est mise en place. Ensuite, on prend en compte le couplage dû à la variable énergétique en étudiant un système d'équations hyperboliques couplées. Les estimateurs d'erreurs présentés précédemment sont modifiés pour tenir compte du couplage et testés. Pour les deux modèles, une partie rappelle les principaux résultats et est suivie des articles complets correspondants, soumis ou acceptés pour publication.

1

Contexte d'étude

1.1 Présentation du problème

Avant de présenter complètement le problème, on montre l'intérêt que peut avoir l'utilisation de méthodes de raffinement de maillage à l'aide d'une géométrie très simple présentée Figure 1.1. Elle représente une zone combustible (en rouge) et du réflecteur (en bleu). Une présentation plus complète de ce cas est faite Section 1.2.2.1. Même si cette géométrie est simple, elle est représentative des interfaces entre les matériaux que l'on retrouvera sur un calcul de cœur complet. On remarque que toute l'erreur est localisée à l'interface entre ces deux matériaux. Avoir un maillage si fin dans les zones éloignées de l'interface présente peu d'intérêt. Ainsi, on pourrait obtenir la même précision avec un maillage fin au niveau de l'interface et beaucoup plus grossier quand on s'en éloigne. Le calcul devient beaucoup plus rapide et utilise moins de mémoire pour la même précision finale.

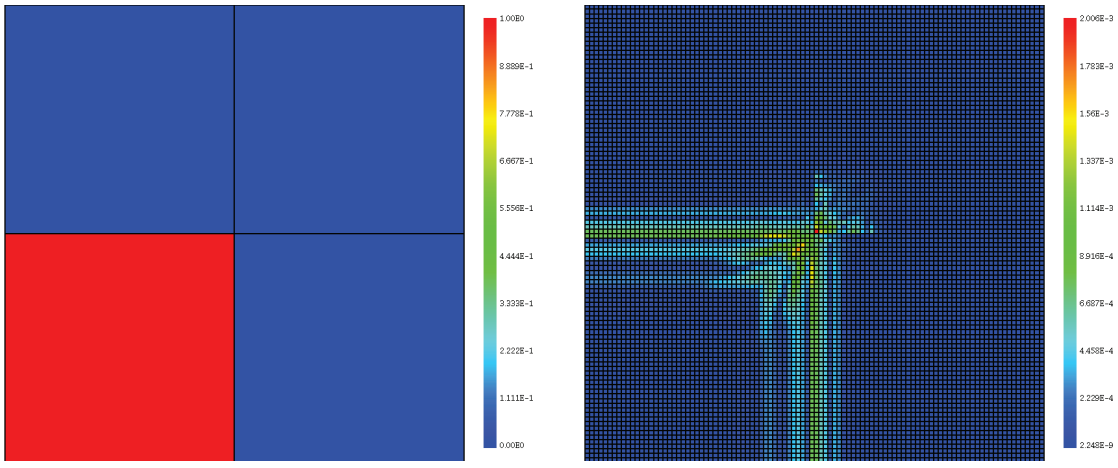


Figure 1.1: Description de la géométrie et erreur en nome L^2 associée

Dans ce cadre, l'équation de transport des neutrons est une équation bilan portant sur la densité de neutrons n dans le réacteur. Cette quantité dépend de la position $\vec{r}$, de l'angle $\vec{\Omega}$ et de l'énergie E. Elle est calculée à l'aide d'une grandeur ϕ appelée flux neutronique par la relation

$$\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = n(\vec{r},\vec{\Omega},E)\vec{v}(E) \tag{1.1}$$

où $\vec{v}(E)$ représente la vitesse des neutrons à l'énergie E.

De manière générale, l'équation de Boltzmann dépend aussi du temps. Si la variable temporelle est particulièrement importante dans l'étude des transitoires lors des incidents ou accidents, dans les calculs de conception de cœurs, on résout l'équation de Boltzmann stationnaire :

$$\mathcal{L}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) + \mathcal{R}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = \mathcal{S}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) + \mathcal{F}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) + S_{ext}(\vec{r},\vec{\Omega},E) \tag{1.2}$$

Eq. 1.2 représente un bilan de neutrons dans un volume élémentaire $d^3\vec{r}\ d^2\vec{\Omega}\ dE$ (53)

– entrant par fission $\mathcal{F}$ ou diffusion $\mathcal{S}$

$$\mathcal{S}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}', E \leftarrow E')\phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E')d\Omega' dE' \tag{1.3}$$

$$\mathcal{F}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = \frac{1}{4\pi}\chi(\vec{r},E)\int_0^\infty \nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\int_{4\pi}\phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E')d\Omega' dE' \tag{1.4}$$

– sortant par fuite $\mathcal{L}$ ou interaction $\mathcal{R}$

$$\mathcal{L}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) \tag{1.5}$$

$$\mathcal{R}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = \Sigma_t(\vec{r},E)\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) \tag{1.6}$$

– provenant d'une source externe S_{ext}

Les données du problème sont :

– Σ_t, Σ_s et Σ_f respectivement les sections efficaces totale, de diffusion et de fission. Elles représentent les probabilités d'interaction neutrons-noyaux. Σ_t et Σ_f ne dépendent que de la position et l'énergie des neutrons. Par contre, Σ_s dépend aussi de l'angle via le cosinus de l'angle entre la direction $\vec{\Omega}$ et $\vec{\Omega}'$. Ainsi, $\Sigma_s(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}', E \leftarrow E')$ est liée à la probabilité qu'un neutron à la position $\vec{r}$ dans la direction $\vec{\Omega}'$ reparte dans la direction $\vec{\Omega}$ et passe de l'énergie E' à E.
– ν le nombre moyen de neutrons produits par fission
– χ le spectre de fission défini de sorte que $\chi(E)dE$ représente la proportion de neutrons émis par fission à l'énergie E.

Afin que le problème soit bien posé, il convient de fermer Eq. 1.2 avec des conditions aux limites. On impose une condition sur toutes les frontières entrantes du domaine c'est-à-dire les frontières $\partial\mathcal{D}$ où $\vec{\Omega}\cdot\vec{n}<0$ (avec $\vec{n}$ normale sortante au domaine spatial $\mathcal{D}$). Les notations sont illustrées Figure 1.2.

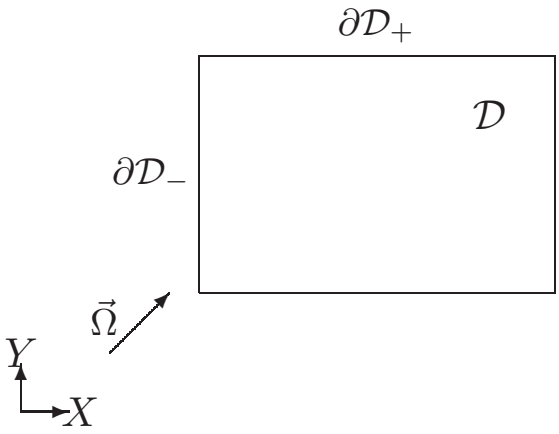


Figure 1.2: Notations utilisées pour décrire le domaine spatial

Flux entrant et sortant sont alors reliés par la relation générale suivante :

$$\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)=\int_{\partial\mathcal{D}}\int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{n}>0}\left|\vec{\Omega}'\cdot\vec{n}\right|\beta\left(\left(\vec{r'},\vec{\Omega'}\right)\rightarrow\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)\right)\phi(\vec{r'},\vec{\Omega'},E)d\vec{\Omega'}d\vec{r'}+\phi^{BC}(\vec{r},\vec{\Omega},E) \tag{1.7}$$

où $\beta\left(\left(\vec{r'},\vec{\Omega'}\right)\rightarrow\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)\right)$ représente la contribution du flux sortant du domaine en $\left(\vec{r'},\vec{\Omega'}\right)$ au flux entrant $\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)$ et ϕ^{BC} un flux entrant imposé comme source.

Dans le cas où $S_{ext}=0$ et $\phi^{BC}=0$, on a à faire à un problème homogène. On relâche alors le système en résolvant un problème aux valeurs propres afin d'avoir une solution non nulle. En notant k_{eff} la plus grande valeur propre du système (appelée facteur de multiplication effectif), Eq. 1.2 se réécrit :

$$\begin{aligned}\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)+\Sigma_t(\vec{r},E)\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)&=\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}',E\leftarrow E')\phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E')d\Omega'dE'\\&+\frac{1}{k_{eff}}\frac{1}{4\pi}\chi(\vec{r},E)\int_0^\infty\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\int_{4\pi}\phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E')d\Omega'dE'\end{aligned} \tag{1.8}$$

Le k_{eff} permet de mesurer l'écart entre la solution stationnaire et l'état courant du système. Ainsi, si $k_{eff}>1$ plus de neutrons sont produits que ceux qui sont absorbés ou quittent le système, le système est dit surcritique. Le cas limite $k_{eff}=1$ correspond à l'état d'équilibre, le système est dit critique. Il est dit sous-critique quand $k_{eff}<1$. Cette quantité est donc fondamentale pour mesurer la criticité du cœur et donc la contrôler.

Dans la suite, on parlera de problème à source si $S_{ext} \neq 0$ ou $\phi^{BC} \neq 0$ et de problème critique dans le cas contraire. On discrétise nos équations dans le cas où $S_{ext} \neq 0$ mais le traitement est le même pour le problème critique.

En neutronique, traditionnellement, les sections de diffusion définies dans Eq. 1.13 sont décomposées en série de Legendre

$$\Sigma_s(\vec{r}, \mu, E \leftarrow E') = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} L_l(\mu) \Sigma_{s_l}(\vec{r}, E \leftarrow E') \tag{1.9}$$

où $\mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$, L_l est le polynôme de Legendre de degré l et

$$\Sigma_{s_l} = \int_{-1}^{1} \Sigma_s(\vec{r}, \mu, E \leftarrow E') L_l(\mu) d\mu \tag{1.10}$$

Alors,

$$\int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}', E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d^2\vec{\Omega}' = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \Sigma_{s_l}(\vec{r}, E \leftarrow E') \int_{4\pi} L_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d^2\vec{\Omega}' \tag{1.11}$$

Si l'on suppose que les sections sont isotropes, seul le premier terme de la série est conservé :

$$\int_{4\pi} \Sigma_{s_l}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}', E') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d^2\vec{\Omega} \approx \frac{\Sigma_{s_0}(\vec{r}, E')}{2} \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d^2\vec{\Omega}' \tag{1.12}$$

On se placera dans ce cadre par la suite et on notera simplement $\Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E')$ le terme $\Sigma_{s_0}(\vec{r}, E \leftarrow E')$. Eq. 1.13 s'écrit :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = & \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\Omega' dE' \\ & + \frac{1}{4\pi} \chi(\vec{r}, E) \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\Omega' dE' + S_{ext}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \end{aligned} \tag{1.13}$$

La résolution de cette équation de manière déterministe est réalisée par la discrétisation successive des 3 variables. L'énergie est discrétisée par une approche multigroupe, l'angle par la méthode des ordonnées discrètes (S_N) et l'espace par des éléments finis discontinus (DGFEM). Ces choix sont présentés et discutés Section 1.2. Cependant, cette thèse se plaçant dans le cadre du solver SNATCH (36) du code de calcul ERANOS qui a pour but, en particulier, l'extension du solveur BISTRO (27) (S_N 2D) en 3D, certains choix de discrétisations sont imposés.

1.2 Discrétisation de l'équation de Boltzmann

1.2.1 Discrétisation énergétique

Le traitement de la variable énergétique repose invariablement sur une approche multigroupe. Le domaine énergétique $[E_0, E_{G+1}]$ est découpé en G mailles, appelées groupes. Sur chaque groupe, les sections efficaces sont supposées constantes et on cherche à estimer l'intégrale du flux dans le groupe g notée $\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$:

$$\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE \tag{1.14}$$

L'approximation multigroupe d'Eq. 1.13 est alors donnée par :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) \int_{4\pi} \phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' \\ + \frac{1}{4\pi} \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^{G} \nu^{g'} \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \int_{4\pi} \phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' + S_{ext}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \end{aligned} \tag{1.15}$$

Les sections multigroupes sont déterminées en amont du calcul de manière à conserver les taux de réaction entre le calcul multigroupe et un calcul continu *i.e.*

$$\sigma^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \sigma(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE} \tag{1.16}$$

Cette approche est exacte si la valeur du flux est connue *a priori* ce qui n'est évidemment pas le cas. On effectue alors par une étape d'homogénéisation sur un maillage fin (nombre de groupes élevés) en remplaçant le flux par une fonction de pondération qui l'approche au mieux (flux dans un milieu infini homogène, par exemple $1/E$ dans le domaine épithermique). Ces calculs sont fait lors d'une étape de processing des sections efficaces, par exemple avec le module NJOY (55).

Cependant, cette approche est généralement insuffisante car les variations spatiales des sections efficaces ne sont pas prises en compte par cette étape. On ajoute un calcul réseau réalisé par exemple avec ECCO (78). Il est généralement réalisé en deux étapes :

- une étape d'autoprotection des résonances en utilisant la structure fine du flux au niveau des résonances
- un calcul multigroupe du flux détaillé au niveau d'une cellule (ou d'un groupe de cellules)

On passe ainsi d'une représentation sur un maillage fin (plusieurs centaines de groupes) en énergie à une représentation plus grossière (dizaines de groupes). Ces sections seront homogénéisées spatialement et serviront de base au calcul de réacteur. Ainsi, les sections utilisées dans Eq. 1.15 seront des fonctions constantes par morceaux.

1.2.2 Discrétisation angulaire et présentation des modèles d'études

La méthode des ordonnées discrètes, ou méthode S_N, est une méthode de collocation. Elle considère que le flux scalaire est obtenu en sommant les flux angulaires dans des directions $\vec{\Omega}_n$ données à l'aide d'une formule de quadrature. On a alors la relation :

$$\int_{\Omega} \phi^g(\vec{r},\vec{\Omega}) d^2\vec{\Omega} = \sum_n w_n \phi_n^g(\vec{r}) \tag{1.17}$$

où les w_n sont les poids de la quadrature dans la direction $\vec{\Omega}_n$.

En supposant que la source externe est isotrope, Eq. 1.15 s'écrit :

$$\begin{aligned}\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\phi_n^g(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\phi_n^g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\sum_{g'=1}^{G}\sum_{n'=1}^{N}\Sigma_s^{g\leftarrow g'}(\vec{r}) w_{n'}\phi_{n'}^{g'}(\vec{r}) \\ + \frac{1}{4\pi}\chi^g(\vec{r})\sum_{g'=1}^{G}\nu^{g'}\Sigma_f^{g'}(\vec{r})\sum_{n'=1}^{N} w_{n'}\phi_{n'}^{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{4\pi}S_{ext}^g(\vec{r})\end{aligned} \tag{1.18}$$

Le principal problème de cette méthode est l'effet de raie. Puisque la propagation des neutrons se fait le long des directions des ordonnées discrètes, certaines zones spatiales ne "verront" pas les neutrons (50). Une solution pour limiter cet effet est d'affiner le maillage angulaire par des méthodes de raffinement sur l'angle (85). Des méthodes de sources fictives (46) ou d'ajout de diffusion numérique (17, 58) ont également été proposées et comparées dans (18).

D'autres méthodes existent pour discrétiser la variable angulaire. On peut utiliser une décomposition du flux sur les harmoniques sphériques ce qui amène à des méthodes dites P_N ou simplifiées P_N (SP_N) (53). Elles sont largement utilisées dans les codes actuels comme VARIANT (63). Cependant, la méthode S_N est imposée par le projet et les erreurs liées à ce choix ne seront pas discutées dans la suite.

La résolution de Eq. 1.18 est faite par itérations imbriquées :

– au niveau le plus externe on fait converger les termes de fission et on résout alors :

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\phi_n^{g,(l+1)}(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\phi_n^{g,(l+1)}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\sum_{g'=1}^{G}\sum_{n'=1}^{N}\Sigma_s^{g\leftarrow g'}(\vec{r})w_{n'}\phi_{n'}^{g',(l+1)}(\vec{r}) + \underbrace{\frac{1}{4\pi}\chi^g(\vec{r})\sum_{g'=1}^{G}\nu^{g'}\Sigma_f^{g'}(\vec{r})\sum_{n'=1}^{N}w_{n'}\phi_{n'}^{g',(l)}(\vec{r}) + \frac{1}{4\pi}S_{ext}^g(\vec{r})}_{Q^{g,(l)}(\vec{r})} \tag{1.19}$$

– ensuite, les termes de diffusion de g' dans g :

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\phi_n^{g,(l+1),(m+1)}(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\phi_n^{g,(l+1),(m+1)}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\Sigma_s^{g\leftarrow g}(\vec{r})\sum_{n'=1}^{N}w_{n'}\phi_{n'}^{g',(l+1),(m+1)}(\vec{r}) + \underbrace{\frac{1}{4\pi}\sum_{g'=1,g'\neq g}^{G}\Sigma_s^{g\leftarrow g'}(\vec{r})\sum_{n'=1}^{N}w_{n'}\phi_{n'}^{g',(l+1),(m)}(\vec{r})}_{Q^{g,(l+1),(m)}(\vec{r})} + Q^{g,(l)}(\vec{r}) \tag{1.20}$$

– enfin, la diffusion du groupe dans lui-même

Dans un premier temps (Chapitre 2), on travaillera sur Eq. 1.20 qui est une équation de transport-réaction que l'on notera simplement :

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\phi_n^g(\vec{r}) + \Sigma_t^g\phi_n^g(\vec{r}) = Q^g(\vec{r}) \tag{1.21}$$

où Q^g représente un terme source supposé connu.

On utilisera Eq. 1.19 pour étudier le couplage espace/énergie (Chapitre 3). On écrira alors :

$$\vec{\Omega}_n\cdot\vec{\nabla}\phi_n^g(\vec{r})+\Sigma_t^g(\vec{r})\phi_n^g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\sum_{g'}\left(\Sigma_s^{g\leftarrow g'}(\vec{r}) + \chi^g(\vec{r})\nu^{g'}(\vec{r})\Sigma_f^{g'}(\vec{r})\right)\sum_{n'}w_{n'}\phi_{n'}^{g'}(\vec{r})+Q^g(\vec{r}) \tag{1.22}$$

En neutronique, on ne s'intéresse généralement pas aux flux angulaires mais à son intégrale, le flux scalaire $\mathbf{\Phi} = (\phi^g)_{g\in[1,G]} \in \mathbb{R}^G$ défini par

$$\phi^g = \sum_n w_n\phi_n^g \tag{1.23}$$

On peut réécrire Eq. 1.22 comme :

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\phi_n^g(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\phi_n^g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\sum_{g'}\left(\Sigma_s^{g\leftarrow g'}(\vec{r}) + \chi^g(\vec{r})\nu^{g'}(\vec{r})\Sigma_f^{g'}(\vec{r})\right)\phi^{g'}(\vec{r}) + Q^g(\vec{r}) \tag{1.24}$$

On note $h_n^g = \vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_t^g$. En multipliant par l'inverse de h_n^g de part et d'autre d'Eq. 1.24 et en sommant sur toutes les directions pondérées par w_n, on obtient :

$$\phi^g(\vec{r}) = \left(\sum_n w_n \left(h_n^g\right)^{-1} \right) \left(\frac{1}{4\pi} \sum_{g'} \left(\Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\vec{r}) + \chi^g(\vec{r}) \nu^{g'}(\vec{r}) \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \right) \phi^{g'}(\vec{r}) + Q^g(\vec{r}) \right) \tag{1.25}$$

En notant,

$$(\boldsymbol{A})_{g,g'} = \left(\sum_n w_n \left(h_n^g\right)^{-1} \right) \tag{1.26}$$

$$(\boldsymbol{C})_{g,g'} = \left(\frac{1}{4\pi} (\Sigma_s^{g \leftarrow g'} + \chi^g \nu^{g'} \Sigma_f^{g'}) \right)_{g,g'} \tag{1.27}$$

$$(\boldsymbol{Q})_g = (Q_g)_g \tag{1.28}$$

Eq. 1.25 s'écrit sous forme matricielle :

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{A} \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{Q} \right) \tag{1.29}$$

On peut donc travailler uniquement sur les équations scalaires. On étudiera dans la suite, deux problèmes modèles :

Problème modèle 1 : Equation de transport

$$\begin{cases} \vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla} \phi_n(\vec{r}) + \Sigma_t(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}) = Q(\vec{r}) \quad \text{sur } \mathcal{D} \\ \phi_n(\vec{r}) = \phi_n^{BC}(\vec{r}) \quad \text{sur } \partial\mathcal{D}^- \end{cases} \tag{1.30}$$

Problème modèle 2 : Système d'équations de transport couplées

$$\begin{cases} \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{A} \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{Q} \right) \quad \text{sur } \mathcal{D} \\ \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Phi}^{BC} \quad \text{sur } \partial\mathcal{D}^- \end{cases} \tag{1.31}$$

Il reste à préciser les espaces auxquels les différents paramètres appartiennent. $\vec{\Omega}_n \in \mathbb{R}^d$ est un vecteur constant normé, Σ_t est une fonction constante par morceaux. Dans les problèmes physiques, Les termes sources Q et aux frontières ϕ_n^{BC} appartiennent à $H^{\frac{1}{2}-\epsilon}$ pour les configurations contenant des zones de vide ($\Sigma_t = 0$) et $H^{\frac{3}{2}-\epsilon}$ sinon (44) (avec $\epsilon > 0$). La régularité de la solution, le flux neutronique ϕ_n, est identique à celle des termes sources.

Dans la suite, on notera H^{s-} l'espace de Hilbert $H^{s-\epsilon} \quad \forall \epsilon > 0$.

1.2.2.1 Cas tests utilisés pour le modèle 1

Afin d'étudier le modèle 1 avec les bonnes hypothèses de régularité, on utilise des benchmarks très simples sur lesquels on connaît la solution analytique et donc la

régularité. Ils ont été présentés pour la première fois dans (54). Le domaine est constitué d'un seul milieu avec $\Sigma_t = 1$ et $\Sigma_s = 0$. Deux cas sont particulièrement intéressants :

- Le benchmark MMS0 génère des solutions discontinues ($\in H^{\frac{1}{2}-}$). On l'obtient en imposant un flux discontinu aux arêtes entrantes ce qui conduit à une solution discontinue le long des lignes caractéristiques. On utilisera une quadrature S_2 en angle, ainsi, les lignes caractéristiques seront les deux diagonales.
- Le benchmark MMS1 créé des solutions continues mais avec une dérivée discontinue ($\in H^{\frac{3}{2}-}$). On impose un flux continu pour conditions aux limites entrantes. La non-régularité est là-aussi située le long des lignes caractéristiques.

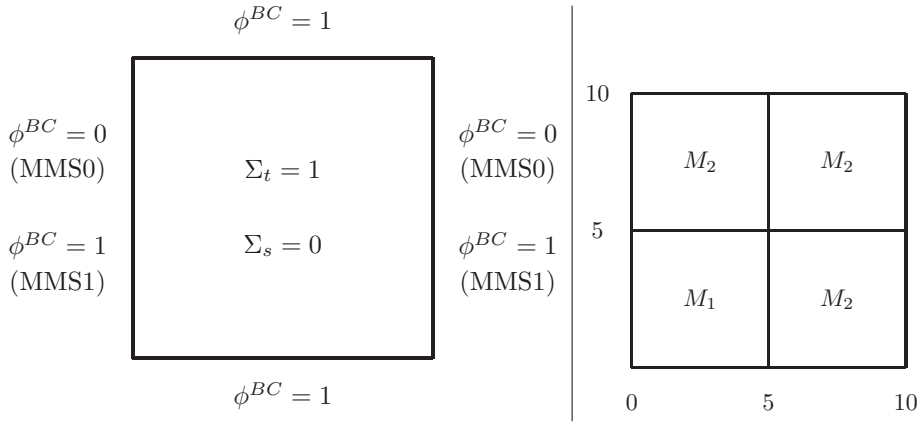


Figure 1.3: Cas tests utilisés pour le modèle 1 (cas MMS et benchmark de protection)

Ces configurations sont représentées Figure 1.3 (gauche). Les solutions analytiques sont explicitées dans (24). Elles sont de classes C^∞ en dehors des lignes caractéristiques et présentent une régularité plus faible le long de ces lignes ($H^{\frac{1}{2}-}$ pour MMS0 et $H^{\frac{3}{2}-}$ pour MMS1).

On peut également vouloir se rapprocher un peu de la représentation d'un cœur. Pour cela, on utilise le benchmark de protection introduit dans (26) et présenté Figure 1.3 (droite). On place une source uniforme dans M1 où les sections efficaces sont données par $\Sigma_t = 1$ et $\Sigma_s = 0.5$. M2 est une protection avec $\Sigma_t = 2$ et $\Sigma_s = 0.025$. Ainsi, la solution présente un fort gradient à l'interface entre les deux matériaux. L'angle est discrétisé selon une quadrature S_4.

1.2.2.2 Cas tests utilisés pour le modèle 2

Pour prendre en compte le couplage énergétique du modèle 2, on utilise la configuration ZONA2B (30) décrite Figure 1.4 qui donne une représentation simplifiée d'un

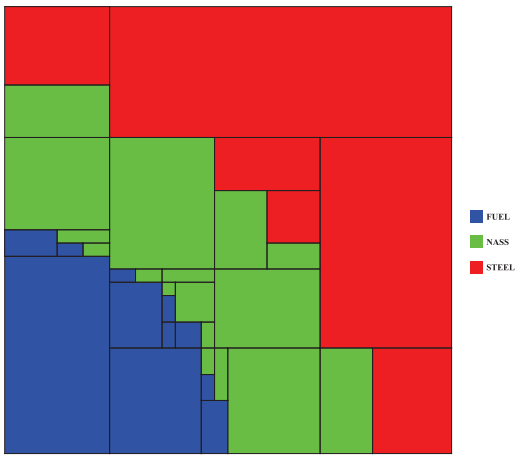


Figure 1.4: Cas d'étude réaliste : le cœur ZONA2B

cœur maquette de réacteur à neutrons rapides (RNR). Trois milieux homogénéisés appelés *FUEL*, *NASS* et *STEEL* sont présents. *FUEL* contient un mélange de sodium et de combustible U/PuO_2. *NASS* est composé de 3/4 d'acier et 1/4 de sodium. *STEEL* est une protection en acier. Le domaine énergétique est discrétisé en 33 groupes et une quadrature S_4 est utilisée pour l'angle (12 directions en 2D).

1.2.2.3 Moyens de comparaison des stratégies

Sur les différents cas tests, la convergence est regardée en norme L^2 sur le flux. On note

$$\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} = \left\|\phi_h^p - \phi\right\|_{L^2(\mathcal{D})} = \left(\int_{\mathcal{D}} \left(\phi - \phi_h^p\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.32}$$

où ϕ représente la solution de référence des problèmes modèles et ϕ_h^p la solution numérique. La solution de référence est la solution analytique lorsqu'elle est connue (cas MMS) ou une solution obtenue sur un maillage fin. On définit de manière analogue une norme locale $\left\|e_h^p\right\|_{L^2(K)}$, erreur L^2 sur la cellule K.

Sur le cas réaliste, on peut aussi regarder la convergence au niveau de la valeur propre k_{eff} (Eq. 1.18)

$$\epsilon_\rho = |\tilde{\rho} - \rho| = \frac{\left|\widetilde{k_{\text{eff}}} - k_{\text{eff}}\right|}{\widetilde{k_{\text{eff}}} \cdot k_{\text{eff}}} \tag{1.33}$$

Cette valeur est généralement donnée en pcm (pour cent mille).

La convergence est étudiée en fonction du nombre de degrés de liberté dof défini par

$$dof = \sum_{K \in \mathcal{T}} (p_K + 1)^d \tag{1.34}$$

Des comparaisons sont également faites sur le temps de calcul. Même s'il est difficile d'évaluer théoriquement les gains en terme de temps, il est toujours intéressant de voir ces aspects notamment sur les cas réalistes.

1.2.3 Discrétisation spatiale

La littérature offre de multiples possibilités pour la discrétisation spatiale de Eq. 1.30. La méthode des caractéristique (1) s'est imposéee pour des calculs à deux dimensions car elle permet de traiter des géométries quelconques. En effet, elle repose sur l'intégration de l'équation de transport le long de lignes obtenues par un lancé de rayons à travers le domaine. Si l'extension de cette méthode à trois dimensions est en soi directe, le coût associé (en termes de mémoire pour stocker les lignes d'intégrations et de temps de calcul) est grand et limite pour l'instant son utilisation à des motifs spatiaux de petite taille (87). Un des buts du projet étant la création d'un solveur 3D, nous nous sommes penchés sur d'autres méthodes. Elles utilisent un découpage du domaine spatial $\mathcal{D}$ en cellules K de sorte que la réunion de ces cellules soit une partition du domaine. Généralement, ces cellules sont des triangles ou des rectangles (tétraèdres et parallélépipèdes en 3D). Sur ce maillage, la solution peut être représentée par diverses méthodes. Les schémas diamants sont les méthodes les plus répandues. Ce sont des méthodes d'ordre deux mais elles ne garantissent pas la positivité du schéma (53). Certaines variations ont été dérivées. Le thêta-schéma (73) garantit la positivité mais des oscillations non-physiques peuvent apparaître. Pour contrer ces problèmes, un thêta-schéma directionnel (DTW) a été créé (65) (schéma stable et positif) et rendu plus précis par une méthode dite thêta-schéma directionnel exponentiel (EDW) (83) où le paramètre thêta est ajusté à l'aide d'une approximation du flux angulaire. Ce paramètre thêta peut également être réajusté au fil des itérations donnant les méthodes appelées exponentielles itératives (EDI). L'une de ces variations est le schéma diamant d'ordre quelconque HODD (42). Les méthodes d'ordres élevées permettent une représentation de la solution sur une base de représentation d'ordre quelconque. Elles comprennent aussi les :

- méthodes nodales d'ordre arbitrairement élevé (AHOT-N (7)) ou aux courtes caractéristiques (AHOT-C (8))
- volumes finis / éléments finis discontinus (DGFEM (36, 52))

Les méthodes permettant d'augmenter l'ordre des bases de fonctions (HODD, AHOT-N, AHOT-C, DGFEM) ont été comparées sur des cas où l'on connaît la solution analytique (80). Aucune différence significative n'a été trouvée sur la vitesse de convergence au regard du nombre de degrés de liberté (et donc de l'empreinte mémoire) entre les différentes méthodes qui se comportent de manière similaire particulièrement dans le

régime asymptotique.

Pour le solveur SNATCH des éléments finis discontinus ont été utilisés. Sur chaque maille, la solution est représentée sur une base de polynômes :

$$\phi_n^g(\vec{r}) = \sum_K \Pi_K(\vec{r}) \sum_j \alpha_{n,K,j}^g f_{n,K,j}^g(\vec{r}) \tag{1.35}$$

où $\Pi_K(\vec{r})$ représente la fonction caractéristique de la cellule K :

$$\begin{cases} 1 & \text{si} \quad \vec{r} \in K \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{1.36}$$

et $f_{n,K,j}^g$ les fonctions de base et $\alpha_{n,K,j}^g$ les coefficients associés. Les fonctions de base constituent une base hiérarchique, construite dans (82). Ce choix permettra de mettre en place facilement des méthodes de raffinement en ordre présentées Section 2.1.2.

Une hypothèse importante qui a fait le succès des méthodes DG est qu'aucune hypothèse de continuité n'est imposée entre les cellules. Cela permet en particulier de mettre en place aisément des méthodes de raffinement en espace (cf. Section 2.1.1) car les modifications engendrées par un raffinement ne seront que locales. De plus, dans le cas d'un schéma upwind, on peut résoudre un problème local (cellule par cellule) plutôt que d'avoir à assembler une matrice complète. C'est un avantage important quand on se rappelle que l'équation doit être résolue pour tous les groupes d'énergie et dans toutes les directions.

Une illustration partielle des discrétisations possibles pour les trois variables est présenté Figure 1.5. Les éléments en gras représentent les méthodes utilisées dans le cadre du solveur SNATCH.

Dans le solveur SNATCH, le domaine spatial $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^d$ ($d = 2, 3$ dimension) est découpé en parallélogrammes (parallélépipèdes en dimension 3) K formant une partition de $\mathcal{D}$. Notons $\mathcal{T}$ cette partition de l'espace telle que $\bigcup_{K\in\mathcal{T}} K = \overline{\mathcal{D}}$. On définit l'espace de Sobolev cassé $H^1(\mathcal{D}, \mathcal{T}) = \left\{u \in L^2(\mathcal{D}) \quad \text{t.q.}\ \forall K \in \mathcal{T},\ u_{|K} \in H^1(K)\right\}$ et pour tout p, l'espace de Hilbert V_h^p

$$V_h^p = \left\{v \in L^2(\mathcal{D}) \,\text{t.q.}\, \forall K \in \mathcal{T} \quad v_{|K} \in \mathbb{Q}^{p_K} \text{ avec } p_K \leq p\right\} \subset H^1(\mathcal{D}, \mathcal{T}) \tag{1.37}$$

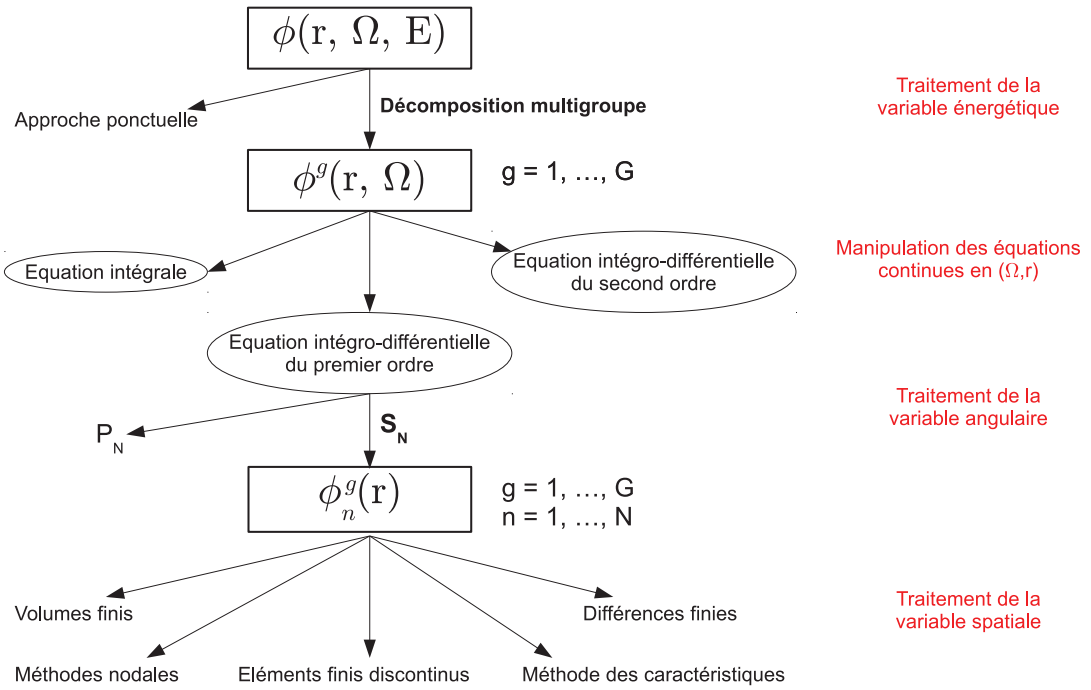


Figure 1.5: Méthodes de discrétisation des différentes variables

muni du produit scalaire standard dans L^2. $\mathbb{Q}^p$ désigne l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à p dans chaque direction, par exemple en 3D :

$$\mathbb{Q}^p = \left\{ \sum_{i=0}^{p} \sum_{j=0}^{p} \sum_{k=0}^{p} \alpha_{i,j,k} x^i y^j z^k \right\} \tag{1.38}$$

La méthode de Galerkin discontinue consiste à multiplier Eq. 1.21 par une fonction test $\psi_h^p \in V_h^p$ et à intégrer par parties sur l'élément K. On notera n la normale sortante et $\partial\mathcal{D}^-$ (resp. $\partial\mathcal{D}^+$) le bord entrant (resp. sortant) c'est-à-dire $\partial\mathcal{D}^- = \{r \in \mathcal{D} \text{ t.q. } \Omega(r) \cdot n(r) < 0\}$ (resp. $\partial\mathcal{D}^+ = \{r \in \mathcal{D} \text{ t.q. } \Omega(r) \cdot n(r) > 0\}$). Des notations analogues seront utilisées pour les bords des cellules comme présenté Figure 1.6 en 2D.

Le flux pouvant être discontinu entre les cellules, on définit la trace entrante (resp. sortante) ϕ^- (resp. ϕ^+) par

$$\phi^{\pm}(r \in \partial K) = \lim_{\epsilon \to 0^{\pm}} \phi(r + \epsilon\Omega) \tag{1.39}$$

Avec ces notations et en omettant les indices g et n pour plus de clarté, la formulation locale d'Eq. 1.30 est donnée par :

$$\int_K \left(-\phi_h^p \Omega \cdot \nabla \psi_h^p + \Sigma_t \phi_h \psi_h^p\right) dV + \int_{\partial K} \left(n \cdot F\left(\Omega, \phi_h^p\right)\right) \psi_h^{p,+} ds = \int_K Q_h \psi_h^p dV \tag{1.40}$$

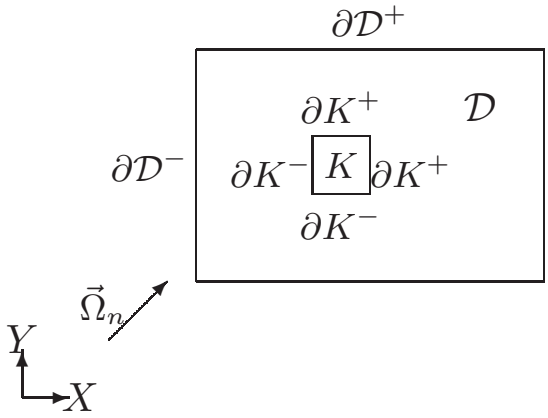


Figure 1.6: Notations utilisées pour décrire le domaine spatial

où F représente le flux numérique. Afin d'assurer la stabilité du schéma, on utilise un flux upwind défini par

$$F\left(\Omega,\phi_h^p\right)=\begin{cases}\Omega\phi_h^{p,BC} & \text{sur } \partial K^-\cap\partial\mathcal{D}\\ \Omega\phi_h^{p,-} & \text{sur } \partial K\backslash\partial\mathcal{D}\cup\partial K^+\cap\partial\mathcal{D}\end{cases} \tag{1.41}$$

La manière la plus naturelle consisterait à prendre comme flux numérique la moyenne entre les valeurs amonts et avals :

$$n\cdot F\left(\Omega,\phi_h^p\right)=\frac{1}{2}\left(\phi_h^{p,+}+\phi_h^{p,-}\right)(n\cdot\Omega) \tag{1.42}$$

Mais cette approche n'est stable que pour la norme L^2 (15). L'utilisation du flux upwind est équivalent à une pénalisation du saut (15) :

$$n\cdot F\left(\Omega,\phi_h^p\right)=\frac{n\cdot\Omega}{2}\left(\phi_h^{p,+}+\phi_h^{p,-}\right)+\frac{|n\cdot\Omega|}{2}\left(\phi_h^{p,+}-\phi_h^{p,-}\right) \tag{1.43}$$

En sommant Eq. 1.40 sur tous les éléments, on obtient la formulation globale :

Trouver $\phi_h^p\in V_h^p$ t.q. $\forall\psi_h^p\in V_h^p$

$$B(\phi_h^p,\psi_h^p)=L(\psi_h^p) \tag{1.44}$$

avec

$$\begin{aligned}B(\phi_h^p,\psi_h^p) &= \sum_{K\in\mathcal{T}}\left(\int_K\left(-\phi_h^p\Omega\cdot\nabla\psi_h^p+\Sigma_t\phi_h^p\psi_h^p\right)dV+\int_{\partial K^-\backslash\partial\mathcal{D}}|n\cdot\Omega|\,\phi_h^{p,-}\left(\psi_h^{p,-}-\psi_h^{p,+}\right)ds\right.\\ &\qquad\left.+\int_{\partial K^+\cap\partial\mathcal{D}}|n\cdot\Omega|\,\phi_h^{p,-}\psi_h^{p,-}ds\right)\\ L(\psi_h^p) &= \sum_{K\in\mathcal{T}}\left(\int_K Q_h\psi_h^p dV+\int_{\partial K^-\cap\partial\mathcal{D}}|n\cdot\Omega|\,\phi_h^{p,BC}\psi_h^{p,+}ds\right)\end{aligned}$$

En intégrant par parties, on peut trouver une expression équivalente pour B :

$$B(\phi_h^p, \psi_h^p) = \sum_{K\in\mathcal{T}} \left(\int_K \left(\psi_h^p \Omega \cdot \nabla \phi_h^p + \Sigma_t \phi_h^p \psi_h^p\right) dV + \int_{\partial K^- \setminus \partial\mathcal{D}} |n\cdot\Omega|\, \psi_h^{p,+} \left(\phi_h^{p,+} - \phi_h^{p,-}\right) ds \right.$$
$$\left. + \int_{\partial K^- \cap \partial\mathcal{D}} |n\cdot\Omega|\, \phi_h^{p,+} \psi_h^{p,+} ds \right) \tag{1.45}$$

Le maillage étant composé de parallélogrammes (parallélépipèdes en 3D), il est possible de se ramener à un élément de référence $\hat{K} = [-1,1]^d$ via une transformation affine. En utilisant la notation chapeau pour les grandeurs définies sur la cellule de référence, Eq. 1.45 se réécrit :

$$B(\hat{\phi}_h^p, \hat{\psi}_h^p) = \sum_{K\in\mathcal{T}} \left(|J| \int_{\hat{K}} \left(\hat{\psi}_h^p \Omega J^{-1} \cdot \hat{\nabla} \hat{\phi}_h^p + \Sigma_t \hat{\phi}_h^p \hat{\psi}_h^p\right) d\hat{V} + \right.$$
$$\left. |J_{\partial K}| \int_{\partial \hat{K}^- \setminus \partial\mathcal{D}} |n\cdot\Omega|\, \hat{\psi}_h^{p,+} \left(\hat{\phi}_h^{p,+} - \hat{\phi}_h^{p,-}\right) d\hat{s} + |J_{\partial K}| \int_{\partial \hat{K}^- \cap \partial\mathcal{D}} |n\cdot\Omega|\, \hat{\phi}_h^{p,+} \hat{\psi}_h^{p,+} d\hat{s} \right) \tag{1.46}$$

où J (resp. $J_{\partial K}$) désigne la matrice jacobienne de la transformation permettant de passer de la cellule K (resp. ∂K) à $\hat{K}$ (resp. $\partial\hat{K}$).

1.3 Méthodes de raffinement pour le transport neutronique et objectifs de la thèse

Afin de mettre en place des méthodes de raffinement de maillage, on a besoin d'une quantité nous indiquant les zones où l'erreur vis-à-vis d'un certain critère est la plus importante. C'est le rôle des estimateurs d'erreurs. On notera l'erreur $e_h^p = \phi - \phi_h^p$ où ϕ représente la solution exacte d'Eq. 1.30 et ϕ_h^p la solution calculée dans l'espace V_h^p. Deux grandes classes d'estimateurs doivent être distinguées :

- les estimateurs *a priori* permettent de trouver l'ordre de convergence du schéma. Pour une discrétisation Galerkin discontinu sur un problème hyperbolique du premier ordre, ce sont les bornes présentées Section 2.1.1 pour la convergence en espace (p fixé et h tendant vers 0) et dans Section 2.1.2 pour la borne en ordre (h fixé et p tendant vers infini). Ces estimateurs présentent un intérêt théorique mais sont inutilisables pour conduire le raffinement car ils dépendent de la solution exacte.
- les estimateurs d'erreurs "classiques" (parfois appelés *a posteriori*) peuvent être évalués au cours des itérations permettant de résoudre l'équation de transport. Ils ne dépendent que de la solution calculée et des données du problème. Ces

estimateurs peuvent permettre d'évaluer la différence entre la solution exacte et une solution approchée mais aussi l'erreur commise sur une quantité d'intérêt.

La qualité d'un estimateur d'erreur est jugée sur deux critères :

- **efficacité :** il doit approcher l'erreur de manière aussi précise que possible. Pour la mesurer, on définit l'indice d'efficacité eff comme

$$eff = \frac{\left\|E_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})}}{\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})}} \tag{1.47}$$

  où E_h^p est l'estimateur d'erreur et e_h^p la vraie erreur. L'indice d'efficacité doit tendre vers 1 quand la taille des mailles tend vers 0 ou l'ordre tend vers l'infini. Idéalement, on peut même borner l'estimateur par la vraie erreur *i.e.* il existe deux constantes C_1 et C_2 telles que

$$C_1 \left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} \leq \left\|E_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} \leq C_2 \left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} \tag{1.48}$$

- **rapidité :** l'estimateur doit aussi être facile à calculer, c'est-à-dire que son temps de calcul doit être nettement inférieur au temps de résolution d'Eq. 1.2.

Par consistance du schéma, la solution exacte satisfait Eq. 1.44. On obtient alors la relation d'orthogonalité :

$$\int_K e_h^p \left(-\Omega \cdot \nabla \psi_h^p + \Sigma_t \psi_h^p\right) dV + \int_{\partial K^+} |n \cdot \Omega|\, e_h^p \psi_h^p ds + \int_{\partial K^- \setminus \partial \mathcal{D}} |n \cdot \Omega|\, e_h^{p,-} \psi_h^p ds = 0$$
$$B(e_h^p, \psi_h^p) = 0 \tag{1.49}$$

Cette équation est à la base des méthodes d'estimations d'erreurs. Le but est de la modifier afin de ne plus faire intervenir la solution exacte ϕ et d'obtenir une majoration ne dépendant que de la solution calculée et de certaines grandeurs dépendantes du problème. On obtiendra alors une estimation de l'erreur $E^g(K)$ par groupe g sur chaque cellule K qui nous permettra de choisir les cellules à raffiner. On raffinera une cellule $K^\star$ du groupe g si :

$$E^g(K^\star) \leq \alpha \max_{K \in \mathcal{T}} E^g(K) \tag{1.50}$$

où α est une constante comprise entre 0 et 1. Cette formule sera modifiée dans les parties où l'on prendra en compte la dimension énergétique.

Dès que l'on sait les cellules que l'on veut raffiner, deux choix sont encore possibles :

- $h-$raffinement ou raffinement en espace consiste à diviser une cellule en sous-cellules comme présenté Figure 1.7

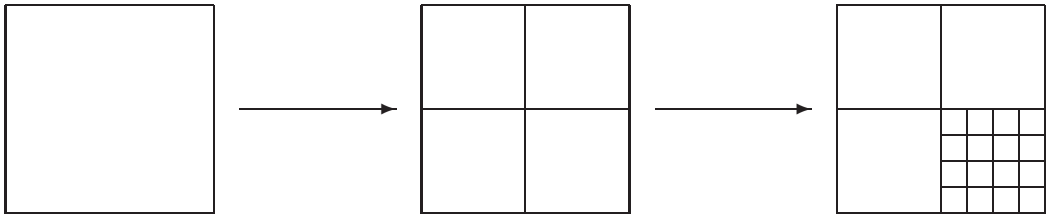


Figure 1.7: Illustration du $h-$raffinement

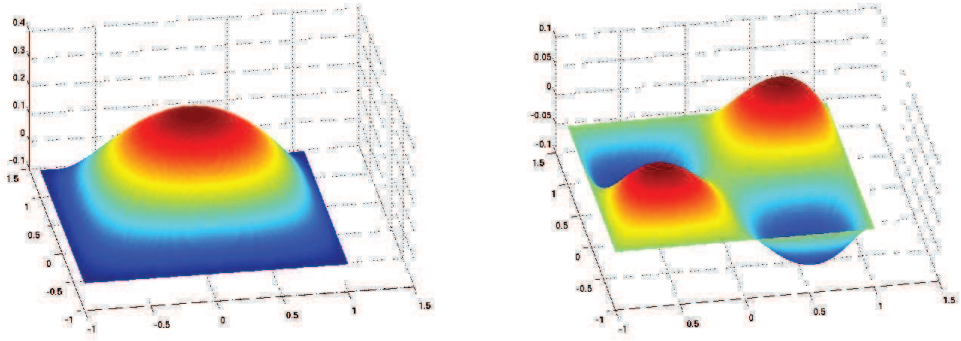


Figure 1.8: Bases de fonctions à l'ordre deux (gauche) et trois (droite)

– $p-$raffinement ou raffinement en ordre consiste à augmenter l'ordre de la base d'éléments finis. On utilise une base hiérarchique construite dans (82) ce qui permet d'éviter une projection de la solution lorsque l'on passe de l'ordre p à $(p+1)$. Un exemple de fonctions sur les cellules aux ordres deux et trois est donné Figure 1.8.

1.3.1 Méthodes de raffinement sur l'angle

Avant de nous consacrer au problème spatial qui sera le cœur de cette thèse, regardons les méthodes existantes pour la variable angulaire. Dans le cadre du S_N, peu de choses ont été faites. Rhoades propose dans les codes DORT (2D) (74) et TORT (3D) (75) d'ajouter des directions dans certaines portions de la sphère mais ce choix est fait de manière *a priori* selon les spécificités du problèmes. Une adaptation automatique a été proposée par Stone (85, 86). Partant d'une quadrature initiale, des points sont ajoutés dans les directions où l'erreur est la plus importante. Pour connaître cette erreur, une comparaison est faite avec un calcul sur une quadrature plus fine. Cette approche est équivalente à celle réalisée au niveau spatial avec deux maillages présentée ci-dessous.

Pour une méthode P_N, Park et Oliveira (64) ont proposé une discrétisation couplée des variables angulaires et spatiales. Des méthodes utilisant le dual (présentés Section 1.3.2.2 pour l'espace) sont utilisées pour déterminer les zones où l'erreur est la plus importante. Le raffinement a alors lieu en deux étapes. Tout d'abord le domaine spatial est raffiné à l'aide d'un estimateur prenant en compte les erreurs angulaires et spatiales jusqu'à atteindre la convergence souhaitée. Au niveau angulaire, le flux courant est comparé au flux calculé avec une méthode P_{N+2} et les zones où la différence est la plus grande sont raffinées.

Une méthode novatrice, basée sur une représentation angulaire du flux sur une base d'ondelettes a été proposé dans (16). Cette approche est intéressante car les ondelettes offrent un cadre naturel pour trouver des estimateurs d'erreurs grâce à leur structure hiérarchique et leur propriété de localisation permet de représenter aisément des variations brusques et locales ce qui peut être le cas lorsque l'anisotropie est importante. Les résultats de convergence ont montré l'efficacité de la méthode en particulier lorsque les variations du flux angulaire étaient importantes.

Dans cette thèse, on se concentrera sur le raffinement en espace. En effet, pour un calcul de cœur, la source étant répartie, une méthode S_N avec N faible est généralement bien adaptée. Par contre, la description spatiale étant faite avec plusieurs milliers de cellules, les méthodes adaptatives en espace peuvent apporter un gain important.

1.3.2 Méthodes de raffinement en espace

1.3.2.1 Estimateur d'erreur

Dans la littérature, on trouve quelques papiers liés au raffinement pour le transport en neutronique. Les quantités utilisées pour le raffinement sont généralement des indicateurs d'erreur basés sur une analyse physique ou des quantités indépendantes du problème. Le code STYX (6) utilise le libre parcours moyen des neutrons, c'est-à-dire la distance moyenne parcourue avant une collision, pour guider le raffinement. Cette quantité n'est toutefois pas un très bon estimateur de l'erreur et conduit à un raffinement peu efficace.

La méthode des éléments finis discontinus donne un estimateur assez naturel. Si la solution est continue, la solution discrète doit l'être aussi et donc le saut du flux entre les cellules doit tendre vers 0. Cette approche a été utilisée pour la première fois sur l'équation S_N en 1D (96) afin d'effectuer du $p-$raffinement et plus récemment pour

des dimensions supérieures dans (71). Nous donnerons Section 2.2.2 une justification théorique de l'utilisation de cet estimateur pour l'équation de transport.

Une approche classique, indépendante de l'équation, est l'utilisation de variations locales de la solution avec par exemple un gradient discret ou des erreurs d'interpolation (4). Cette méthode a été testée en 2D sur les équations S_N (43) amenant à une réduction de l'espace mémoire d'un facteur deux par rapport aux méthodes uniformes.

Il est également possible d'utiliser la solution sur un maillage plus grossier afin d'avoir une idée de l'erreur. En effet,

$$\begin{aligned}\phi_h^p - \phi_{\frac{h}{2}}^p &= \phi_h^p - \phi + \phi - \phi_{\frac{h}{2}}^p \\ &= e_h^p - e_{\frac{h}{2}}^p\end{aligned}$$

Si l'on suppose que l'erreur est plus importante sur le maillage grossier que sur le fin, on a

$$\phi_h^p - \phi_{\frac{h}{2}} \approx e_h^p \tag{1.51}$$

La différence entre les deux flux est donc une approximation de l'erreur. Cette approche a été utilisée dans (94) pour l'équation S_N mais aussi sur l'équation de la diffusion (90, 91) car elle permet la mise en place de méthode *hp*. En effet, de manière équivalente à Eq. 1.52, on peut écrire :

$$\phi_h^p - \phi_h^{p+1} \approx e_h^p \tag{1.52}$$

En comparant $\phi_h^p - \phi_{\frac{h}{2}}$ à $\phi_h^p - \phi_h^{p+1}$ on peut choisir le raffinement qui fait décroître le plus l'erreur. Le choix est généralement fait au regard d'une fonction coût. Pour cela, on utilise $\phi_{h/2,p+1}$ comme solution de référence, et on choisit le type de raffinement en cherchant à minimiser l'erreur de projection par degré de liberté :

$$\frac{\left\|\phi_{h/2,p+1} - \Pi_{hp}\phi_{h/2,p+1}\right\|^2 - \left\|\phi_{h/2,p+1} - \Pi_{hp_{opt}}\phi_{h/2,p+1}\right\|^2}{dof_{hp_{opt}} - dof_{hp}} \tag{1.53}$$

où $\Pi_{hp_{opt}}$ représente les différents types de projection possibles ($h \to \frac{h}{2}$, $p \to p+1$). Cette stratégie a été introduite dans (69) puis reprise plus récemment dans (23). Elle a été testée sur l'équation de transport des neutrons couplée avec l'équation de la chaleur dans (70).

Cette méthode ne sera pas retenue car elle entraîne un surcout dû au calcul du flux sur les différents maillages et aux différents ordres. Toutefois, l'idée de la fonction coût définie Eq. 1.53 sera reprise Section 2.3.2 et nous permettra de trouver une idée simple afin de choisir entre les deux types de raffinement.

1.3.2.2 Raffinement suivant une quantité d'intérêt

L'intérêt d'un calcul neutronique n'est pas nécessairement la solution complète de l'équation de Boltzmann. Bien plus que le flux neutronique, les physiciens peuvent être intéressés par la convergence sur la valeur propre du système (k_{eff}) ou encore sur des taux des réactions (intégrales sur un domaine énergétique et spatial du produit de sections efficaces par le flux). Il parait donc intéressant de mener le raffinement non pas au regard de l'erreur sur le flux mais d'une fonctionnelle J. Dans ce cas, l'analyse d'erreur utilise des arguments de dualité présentés pour la première fois dans (12). Considérant une fonctionnelle linéaire J, il faut tout d'abord définir le problème dual :

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } \phi_h^{p,\star} \in V_h^p \text{ t.q. } \forall z \in V_h^p \\ &\qquad\qquad B(z, \phi_h^{p,\star}) = J(z) \end{aligned} \tag{1.54}$$

Alors, l'erreur sur la fonctionelle $\Delta J = J(\phi_h^p) - J(\phi)$ peut être exprimée en fonction de la solution calculée ϕ_h^p et du flux adjoint $\phi^\star$:

$$\begin{aligned} \Delta J &= J(\phi_h^p) - J(\phi) \\ &= J(\phi_h^p - \phi) \quad \text{par linéarité de J} \\ &= B(\phi_h^p - \phi, \phi^\star) \quad \text{par définition du problème dual} \\ &= B(\phi_h^p - \phi, \phi^\star - \phi_h^{p,\star}) \quad \text{par la relation d'orthogonalité (Eq. 1.49)} \\ &= -L(\phi^\star - \phi_h^{p,\star}) + B(\phi_h^p, \phi^\star - \phi_h^{p,\star}) \quad \text{par consistence du schéma} \\ &= L(e_h^{p,\star}) - B(\phi_h^p, e_h^{p,\star}) \end{aligned} \tag{1.55}$$

Il s'agit cette fois d'estimer l'erreur sur le flux adjoint $e_h^{p,\star}$. Elle peut provenir d'une des méthodes présentées Section 1.3.2.1 pour le problème direct. Dans le cadre S_N, la première utilisation des méthodes duales a été faite dans (76). Plus tard, Wang (92) puis Lathouwers (48) proposent d'approcher l'erreur sur le flux adjoint $e_h^{p,\star}$ grâce au flux adjoint calculé sur un espace plus grand (par exemple V_h^{p+1}) ce qui correspond aux méthodes à deux maillages présentées Section 1.3.2.1. Même si cette méthode est coûteuse, elles peuvent permettre d'améliorer le raffinement et sont parfois indispensable pour mener le raffinement de manière correcte. Dans un article plus récent (49), Lathouwers a montré l'influence de l'utilisation d'un flux adjoint dégradé. Une telle approche permet d'obtenir une convergence intéressante sans augmenter le coût de manière trop importante. Ces méthodes ont également été testées sur la forme P_N de l'équation de transport (97) et SP_N (88). Dans ce dernier cas, ce sont les sauts entre les cellules qui sont utilisés pour estimer l'erreur faite sur le calcul du flux adjoint.

De manière générale, l'utilisation d'une quantité d'intérêt oblige à calculer un dual ce qui est très coûteux puisque l'on doit résoudre deux problèmes au lieu d'un seul. Ces méthodes utilisant le dual sont intéressantes lorsque l'on ne s'intéresse qu'à une zone précise du domaine comme par exemple pour les problèmes de protection. En effet, dans ces cas-là, l'utilisation d'un estimateur d'erreur classique entraîne même une dégradation de la convergence. Pour les problèmes de conception de cœur, définir une quantité d'intérêt présente peu d'avantages comparé au surcout occasionné par le calcul du dual. Notons aussi que les méthodes utilisant le dual nécessitent aussi une estimation de l'erreur (sur le flux direct et/ou adjoint) et donc que les méthodes présentées ici peuvent servir de base à un raffinement suivant une quantité d'intérêt.

1.3.3 Méthodes de raffinement *hp*

1.3.3.1 Utilisation d'informations *a priori*

Une première façon de choisir entre les deux types de raffinement est l'utilisation d'informations connues *a priori*. Elles peuvent concerner les coins et les singularités aux arêtes (9, 81) ou les couches frontières (57, 81). Le calcul commence alors sur un maillage adapté et il s'en suit un raffinement en p. Il est également possible de raffiner en h dans les zones contenant les singularités et en p ailleurs ((89) pour l'équation de Stokes). Si la nature des singularités est connue *a priori*, ces méthodes sont particulièrement efficaces et difficiles à battre.

La situation est évidemment différente lorsque la nature des singularités n'est pas connue *a priori*, c'est pourquoi les méthodes suivantes ont vu le jour. Commencer avec un maillage non adapté et poursuivre avec du $p-$raffinement peut conduire à des taux de convergence pire que le $h-$raffinement. Demkowicz et al. (23) pensent que pour une convergence de l'ordre de 1 à 5% en norme L^2 relative sur la solution, un raffinement en h avec des éléments quadratiques offrent le meilleur compromis complexité/convergence. Cela rejoint nos conclusions (voir par exemple Section 3.5) ainsi que celles de Wang et Ragusa (93).

Même si dans les cas concrets on peut connaître certaines zones qui vont poser problèmes (interfaces, lignes caractéristiques) il est difficile de savoir à quel point le maillage doit être raffiné et à partir de quelle distance de l'interface on peut considérer que la solution est assez régulière de sorte que le $p-$raffinement soit le plus intéressant. On cherche donc des méthodes plus automatiques afin de choisir entre $h-$ et $p-$raffinement.

1.3.3.2 Pseudo-méthode hp : "Texas 3-step"

On peut appeler cette méthode pseudo-hp car les deux types de raffinement sont fait de manière successive et il n'y pas de véritable critère pour choisir. Afin de corriger/modifier un maillage initial inadapté, Oden et al. (61) ont proposé cet algorithme en 3 étapes. Partant d'un maillage initial, différents paramètres sont calculés, notamment des tolérances intermédiaires TOL_I et TOL_F. Ensuite, le maillage est modifié afin que l'erreur soit inférieure à TOL_I puis le maillage est fixé et l'ordre des polynômes est incrémenté afin d'assurer une erreur inférieure à TOL_F. Il peut être nécessaire de boucler en modifiant le ratio TOL_I/TOL_F. L'algorithme complet est détaillé dans (60) (pp. 6-8).

Il est évident que cette méthode n'est pas optimale et qu'il est plus intéressant de pouvoir choisir à chaque pas de raffinement et pour chaque cellule quel type de raffinement est le plus efficace.

1.3.3.3 Méthodes utilisant deux maillages

Les méthodes présentées ici utilisent les solutions sur des maillages différents. Il peut s'agir de la solution calculée sur un maillage plus fin ou un ordre polynômial supérieur comme présenté Section 1.3.2.1 ou de l'estimateur sur le maillage précédent. On parlera dans ce cas là de méthode "type-parameter". On suppose connue une estimation de l'erreur $\eta_K(\phi_h^p, h_K, p_K)$ sur chaque élément K dépendant de la solution numérique ϕ_h^p, de la taille de l'élément h_K et de l'ordre de la base d'éléments finis sur cet élément p_K. En supposant que $\eta_K(\phi_h^{p-1}, h_K, p_K - 1) \neq 0$, on définit

$$\rho_K = \frac{\eta_K(\phi_h^p, h_K, p_K)}{\eta_K(\phi_h^{p-1}, h_K, p_K - 1)} \tag{1.56}$$

ρ mesure la régularité perçue de la solution (2, 37). On choisit alors $\gamma \in]0, 1[$ ($\gamma = 0.6$ dans (2)) et on raffine en h si $\rho_K < \gamma$ et en p sinon. γ est appelé "type-parameter". Cette méthode nécessite un calcul initial avec $p = 1$ et $p = 2$ pour initialiser l'algorithme. Une analyse de ce type de méthode a ensuite été faite dans (31) pour des équations paraboliques.

Cette méthode nous parait intéressante car elle n'entraîne pas de surcout supplémentaire. En effet, il suffit de stocker l'estimateur à l'itération précédente et de le comparer à l'estimateur courant. Seule la première étape de raffinement est forcée mais cela ne constitue pas un véritable problème car augmenter p jusqu'à deux est toujours intéressant pour

améliorer la convergence. Cette méthode sera testée et comparée à d'autres algorithmes *hp* dans la suite.

1.3.3.4 Estimation locale de la régularité

Nous verrons Section 2.1 que la vitesse de convergence est liée à la régularité de la solution. Il paraît donc naturel d'essayer d'estimer la régularité locale de la solution afin de pouvoir déterminer la stratégie optimale de raffinement. Cela fut proposé dans (5) pour des problèmes elliptiques en déterminant la régularité locale de Sobolev s_K et en raffinant en p si $s_K > p_K + 1$ et en h sinon. s_K est déterminé à l'aide d'estimateurs locaux calculés à des ordres différents. Cette méthode a ensuite été utilisée pour des problèmes hyperboliques (41).

Deux méthodes combinant la convergence des coefficients de Legendre et estimation de la régularité ont été proposées dans (40) sous le nom "ratio test algorithm" et "root test algorithm". La vitesse de convergence des coefficients de Legendre permet de déterminer à quel espace de fonctions appartient la solution et ainsi de choisir le type de raffinement.

Une autre méthode utilisant uniquement les coefficients de Legendre a été proposée dans (56). En notant a_i les coefficients de l'expansion 1D en polynômes de Legendre, on a

$$a_i \sim Ce^{-\sigma i} \tag{1.57}$$

où C et σ sont déterminés par la méthode des moindres carrés. Dans (56), l'interpolation est réalisée à l'aide des 4 derniers coefficients de Legendre et le raffinement en p est choisi si $\sigma > 1$. Cette stratégie se généralise pour chaque direction dans les cas 2D et 3D.

Cette méthode a été réutilisée dans (84) en estimant le rayon de Bernstein [1] de la série de Legendre.

L'approche "type-parameter" a été retenue pour effectuer les comparaisons de nos algorithmes *hp* avec ceux déjà existant. Ces méthodes d'estimation locale de la régularité paraissent intéressantes et on propose dans la suite une autre approche visant à "mesurer" la régularité.

1. le rayon de Bernstein $\rho = 2\frac{a+b}{h}$ (où a (resp. b) est la longueur du grand (resp. petit) axe de l'ellipse) est le rayon de l'ellipse dans laquelle la série de Legendre converge uniformément et absolument dans n'importe quel ensemble fermé

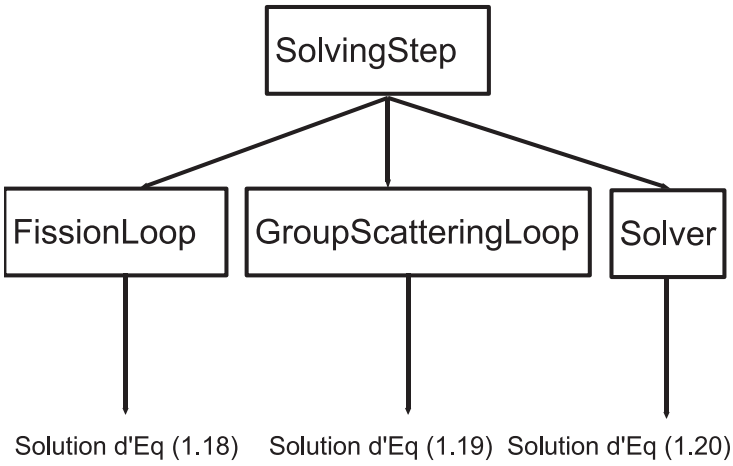


Figure 1.9: Organisation de la partie Solveur dans SNATCH

1.4 Aspects informatiques

Avant d'étudier les différents modèles, on présente les outils informatiques qui ont servi de cadre à ce travail et les choix de conception associés à ces développements. Comme expliqué précédemment, ce travail s'inscrit dans le cadre du développement de méthodes de raffinement de maillage pour le solveur SNATCH. Ce solveur S_N 3D est développé au sein du CEA Cadarache en langage JAVA. On présente tout d'abord quelques éléments essentiels du solveur qui nous seront utiles par la suite pour expliquer les méthodes nécessaires afin de mettre en place des méthodes d'adaptation de maillage.

1.4.1 Composition du solveur

On a vu que la résolution de l'équation de transport des neutrons s'effectuait à l'aide d'itérations imbriquées. On retrouve cette structure au niveau informatique. Le problème aux valeurs propres est résolu dans la classe *SourceFissionLoop*, les itérations concernant la source de diffusion hors des groupes dans *GroupScatteringLoop* et enfin celle du groupe dans lui-même, c'est-à-dire la résolution du problème modèle 1, dans la classe *Solver*. Toutes ces classes héritent d'une classe générique appelée *SolvingStep*. On peut récupérer à partir de ces classes, la solution courante de l'équation de transport aux différents niveaux d'itérations comme présenté Figure 1.9.

1.4.2 Éléments nécessaires à l'adaptation de maillage

Une classe *AMR* contient les éléments génériques qui seront nécessaires pour mener le raffinement :

- un estimateur d'erreur *ErrorEstimator*
- un objet qui permet de marquer les cellules où l'erreur est importante et qui doivent donc être raffinées *CellTagger*
- un mécanisme de mise à jour de tous les containers (flux, sections efficaces, ...) qui assure la projection sur le nouveau maillage et la nouvelle base de fonctions après raffinement du maillage. Étant donnée la nature des containers utilisés (des objets agrégeant maillage, base de fonctions et coefficients du développement sur cette base), ce mécanisme a été implémenté sous la forme d'un objet supplémentaire *FieldVisitor* qui parcourt les divers containers et assure leur mise à jour.

Cet objet *AMR* peut être attaché au niveau d'itération que l'on souhaite (*FissionLoop*, *GroupScatteringLoop*, *Solver*). Dès que le résidu est inférieur à une certaine valeur, le mécanisme d'adaptation est déclenché. *AMR* demande à l'objet *ErrorEstimator* de lui fournir une estimation de l'erreur sur chaque cellule du maillage. Cette estimation peut être faite par l'estimateur de Radau (cf. Section 2.2.1, calcul effectué par Eq. 2.17) ou par l'estimateur présenté Section 2.2.2 avec Eq. 2.21. *ErrorEstimator* fait évidemment appel à *SolvingStep* afin de récupérer toutes les informations nécessaires au calcul de l'erreur. A l'issue de cette étape, nous avons donc une estimation locale de l'erreur $E(K)$ pour toutes les cellules K du domaine spatial.

CellTagger ordonne alors ces erreurs afin de sélectionner celles à raffiner. Cela peut être soit les N cellules où l'erreur est la plus grande, soit les cellules où l'erreur est supérieure à un certain pourcentage de l'erreur maximale. Dans tous les cas, on obtient alors une liste contenant les numéros des cellules à raffiner.

C'est alors le rôle du *FieldVisitor* de préparer les différentes quantités afin de pouvoir continuer le calcul. Pour toutes les cellules données par le *CellTagger*, le *FieldVisitor* doit choisir les cellules pour le $h-$raffinement et celles pour le $p-$raffinement selon une stratégie donnée par l'utilisateur comme celles présentées Section 1.3.3. Avec la liste des cellules pour le $h-$raffinement, on met à jour le maillage en attachant un sous-maillage à toutes les cellules raffinées. Le champ contenant les informations relatives à l'ordre de la base d'éléments finis dans les différentes cellules est lui mis à jour à l'aide de la liste des cellules pour le $p-$raffinement. Il ne reste alors plus qu'à projeter les différentes quantités sur le nouveau maillage pour pouvoir continuer la résolution de l'équation de transport.

Pour traiter le cas dépendant de l'énergie (modèle 2), il faut modifier un peu cette procédure. Dans ce cas, tous les groupes d'énergie qui ont un maillage différent ont aussi un objet *AMR* différent. Il y a ainsi autant d'objets *AMR* que de maillages. Un objet appelé *AMRWrapper* englobe tous ces objets. Il en est de même pour le solveur. Nous avons différents solveurs englobés par un objet *SolverWrapper*. *SolverWrapper* remplace *Solver* sur la Figure 1.9. Lorsque le *SolverWrapper* veut déclencher le raffinement, il le notifie à tous ces solveurs qui font chacun appel à leur *AMR*. Chaque *AMR* demande alors une estimation de l'erreur à l'aide de son *ErrorEstimateur* et fait remonter l'information à *AMRWrapper*. Le wrapper renvoit alors à chaque *AMR*, la liste des cellules qu'il doit modifier. Ainsi, le fonctionnement est similaire au cas indépendant de l'énergie. Le seul changement est le remplacement des objets *AMR* et *Solver* par respectivement *AMRWrapper* et *SolverWrapper*.

On voit donc que l'on a pu utiliser pleinement les propriétés des langages orientés objet afin de créer une classe *AMR* générique qui peut être réutilisée dans n'importe quel contexte. Ensuite, les trois grandes étapes nécessaires au raffinement ont été détaillées dans des classes de plus en plus spécifiques.

2

Modèle 1 : Equation de transport spatiale

Dans ce chapitre, on travaille sur le problème modèle 1 que l'on rappelle :

Problème modèle 1 : Equation de transport

$$\begin{cases} \Omega \cdot \nabla \phi(r) + \Sigma_t(r)\phi(r) = Q(r) & \text{sur } \mathcal{D} \\ \phi(r) = \phi^{BC}(r) & \text{sur } \partial\mathcal{D}^- \end{cases} \tag{2.1}$$

avec $\Omega \in \mathbb{R}^d$ constant, Σ_t fonction constante par morceaux et ϕ, ϕ^{BC} et Q appartenant à H^s ($s = \frac{1}{2} - \epsilon$ ou $\frac{3}{2} - \epsilon$).

Remarque 1. *La plupart des résultats relatifs à l'étude du modèle 1 ont été soumis pour publication : D. Fournier, R. Herbin, R. Le Tellier, "Analysis of hp-Refinement Methods for the Resolution of the Neutron Transport Equation" (33).*

2.1 Estimateurs d'erreur *a priori*

Afin d'estimer les performances possibles des algorithmes adaptatifs, nous commençons par étudier la vitesse de convergence lorsque la taille de la maille diminue ($h-$raffinement) ou l'ordre des polynômes augmente ($p-$raffinement). Rappelons que les estimateurs d'erreurs *a priori* ne nous donnent aucune indication sur la marche à suivre pour raffiner. Toute cette étude est réalisée en dimension 2 mais les résultats restent valides en dimension 3.

2.1.1 Convergence du $h-$raffinement

Dans cette partie, l'ordre de la base de polynômes est fixé et on redivise de manière uniforme les cellules du domaine. En supposant que ϕ appartiennent à H^s, Lesaint et

Raviart (52) ont montré que pour des maillages rectangulaires

$$\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} = \mathcal{O}\left(h^{\min(p+1,s)}\right) \tag{2.2}$$

Richter (77) et plus récemment Cockburn (19) ont montré que cette borne était valide pour des maillages triangulaires si

- chaque élément du maillage K a une seule frontière sortante par rapport à Ω
- que cette frontière sortante est une frontière entrante pour un autre élément du maillage

Pour une triangulation quelconque, on perd un ordre $\frac{1}{2}$ et on retrouve le résultat de Johnson et Pitkäranta (45) :

$$\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} = \mathcal{O}\left(h^{\min(p+\frac{1}{2},s)}\right) \tag{2.3}$$

Eq. 2.2 a été vérifié dans (93) pour différentes variantes des benchmarks de Larsen sur des maillages triangulaires. Ses auteurs ont montré que la convergence était limitée par la régularité sauf si le maillage était aligné avec les singularités auquel cas une convergence en h^{p+1} est observée.

Dans les benchmarks MMS0 et MMS1 (en dimension 2), on a toujours $s < p+1$ ce qui implique qu'il existe une constante C_p indépendante de h telle que

$$\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} = C_p h^s = \frac{C_p'}{dof^{s/2}} \tag{2.4}$$

Ce résultat est vérifié sur Figure 2.1 où l'erreur en norme L^2 est tracée en fonction du nombre de degrés de liberté en échelle logarithmique. On retrouve bien la pente en s quelle que soit la valeur de p. On note toutefois la forte dépendance de C_p à l'ordre de la base de polynômes. Ainsi, même si la régularité de la solution est limitée, il peut y avoir un intérêt à augmenter l'ordre.

2.1.2 Convergence du $p-$raffinement

Dans cette section, les benchmarks MMS sont décrits avec une seule cellule et on augmente l'ordre. Peu de résultats théoriques sont connus sur ce problème dans le cas hyperbolique. Les premiers travaux (13) utilisaient des méthodes de stabilisation où la forme faible résolue s'écrivait :

$$B(\phi_h^p, \psi_h^p) = L(\psi_h^p) \tag{2.5}$$

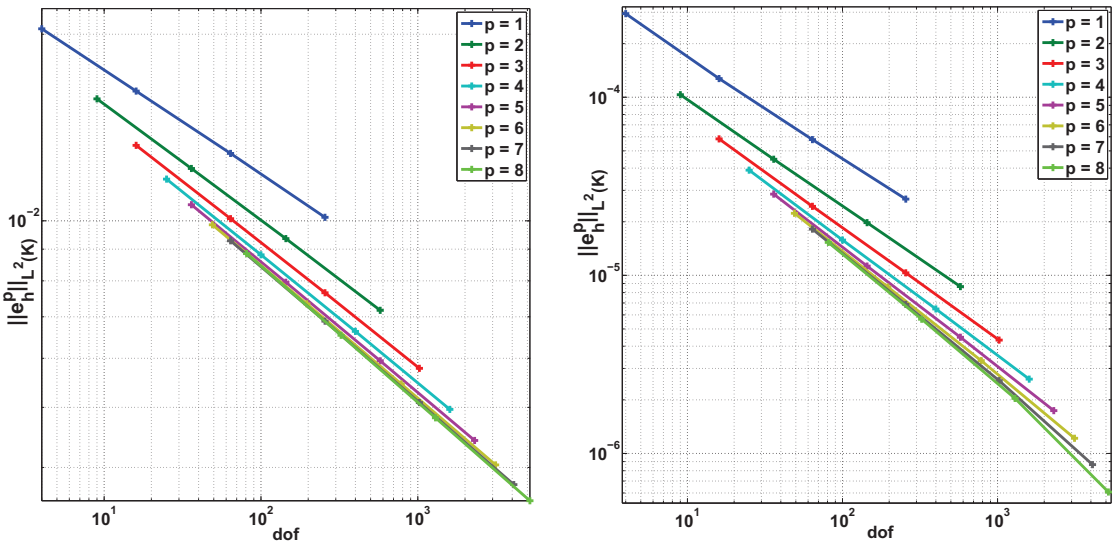


Figure 2.1: Erreur en norme L^2 pour le benchmark MMS0 (gauche) et MMS1 (droite) en raffinement uniforme en h

avec $B(\phi_h^p, \psi_h^p) = \sum_K B_K(\phi_h^p, \psi_h^p)$ et $L(\psi_h^p) = \sum_K L_K(\psi_h^p)$ et

$$\begin{aligned} B_K(\phi_h^p, \psi_h^p) = &\int_K \left(\Omega \cdot \nabla \phi_h^p + \Sigma_t \phi_h^p\right) \left(\psi_h^p + \frac{h_K}{{p_K}^2} \Omega \cdot \nabla \psi_h^p\right) \\ &+ \left(1 + \frac{h_k}{p_K^2}\right) \int_{\partial K^- \setminus \Gamma} |\Omega \cdot n| \left(\phi_h^{p,+} - \phi_h^{p,-}\right) \psi_h^{p,+} \\ &+ \left(1 + \frac{h_k}{p_K^2}\right) \int_{\partial K^- \cap \Gamma} \phi_h^{p,+} |\Omega \cdot n| \, \psi_h^{p,+} \end{aligned} \tag{2.6}$$

$$L_K(\psi_h^p) = \int_K Q_h \left(\psi_h^p + \frac{h_K}{{p_K}^2} \Omega \cdot \nabla \psi_h^p\right) + \left(1 + \frac{h_k}{p_K^2}\right) \int_{\partial K^- \cap \Gamma} \phi_h^{p,BC} |\Omega \cdot n| \, \psi_h^p \tag{2.7}$$

Dans ce contexte, en définissant la norme dépendante du maillage :

$$\begin{aligned} |||v|||_{hp,\mathcal{D}}^2 = \sum_K \frac{h_K}{{p_K}^2} \|\Omega \cdot \nabla v\|_{L^2(K)}^2 + \|v\|_{L^2(K)}^2 + \int_{\partial K^- \setminus \partial \mathcal{D}^-} |\Omega \cdot n| \left(v^+ - v^-\right)^2 \\ + \int_{\partial K \cap \partial \mathcal{D}} |\Omega \cdot n| \, v^2 \end{aligned}$$

Bey et al. ont prouvé que, si la solution appartient à H^s, alors

$$\left|||e_h^p|||_{hp,\mathcal{D}} = \mathcal{O}\left(\frac{h^{\nu - \frac{1}{2}}}{p^{s-1}}\right) \tag{2.8}$$

avec $\nu = \min(p+1, s)$. Ce résultat n'est pas optimal pour h fixé et $p \to \infty$. Cette borne a ensuite été améliorée dans (38) en modifiant le paramètre de stabilisation en utilisant

$\frac{h_K}{p_K}$ au lieu de $\frac{h_K}{p_K^2}$. Les formes bilinéaires et linéaires s'écrivent alors :

$$B_K(\phi_h^p, \psi_h^p) = \int_K \left(\Omega \cdot \nabla \phi_h^p + \Sigma_t \phi_h^p\right) \left(\psi_h^p + \frac{h_K}{p_K} \Omega \cdot \nabla \psi_h^p\right) + \int_{\partial K^- \setminus \Gamma} |\Omega \cdot n| \left(\phi_h^{p,+} - \phi_h^{p,-}\right) \psi_h^{p,+} + \int_{\partial K^- \cap \Gamma} |\Omega \cdot n| \, \phi_h^{p,+} \psi_h^{p,+}$$

$$L_K(\psi_h^p) = \int_K Q_h \left(\psi_h^p + \frac{h_K}{p_K} \Omega \cdot \nabla \psi_h^p\right) + \int_s \partial K^- \cap \Gamma \, |\Omega \cdot n| \, \phi_h^{p,BC} \psi_h^p$$

Les éléments modifiés ont été colorés en rouge dans Eqs. 2.6 and 2.7 pour plus de clarté. Dans ce contexte, en définissant la norme par :

$$|||v|||_{hp,\mathcal{D}}^2 = \sum_K \frac{h_K}{p_K} \|\Omega \cdot \nabla v\|_{L^2(K)}^2 + \|v\|_{L^2(K)}^2 + \int_{\partial K^- \setminus \partial \mathcal{D}} |\Omega \cdot n| \left(v^+ - v^-\right)^2 + \int_{\partial K \cap \partial \mathcal{D}} |\Omega \cdot n| \, v^2$$

Houston et al. ont prouvé que, si la solution appartient à H^s, alors

$$\left|\left|\left|e_h^p\right|\right|\right|_{hp,\mathcal{D}} = \mathcal{O}\left(\frac{h^{\nu - \frac{1}{2}}}{p^{s-\frac{1}{2}}}\right) \tag{2.9}$$

Ce résultat est optimal. La stabilisation est nécessaire afin de pouvoir obtenir une borne optimale sur le terme de gradient. Si l'on ne s'intéresse qu'à la norme L^2, Houston et al. (39) ont montré qu'avec un schéma upwind classique, en utilisant la norme définie par :

$$|||v|||_{DG,\mathcal{D}}^2 = \sum_K \|v\|_{L^2(K)}^2 + \int_{\partial K^- \setminus \partial \mathcal{D}} |\Omega \cdot n| \left(v^+ - v^-\right)^2 + \int_{\partial K \cap \partial \mathcal{D}} |\Omega \cdot n| \, v^2$$

alors

$$\left|\left|\left|e_h^p\right|\right|\right|_{DG,\mathcal{D}} = \mathcal{O}\left(\frac{h^{\nu - \frac{1}{2}}}{p^{s-\frac{1}{2}}}\right) \tag{2.10}$$

On obtient donc en particulier le résultat suivant pour la norme L^2 :

Theorème 1. *Soit $\phi \in H^s$ solution de Eq. 1.21 et ϕ_h^p de Eq. 1.40 avec $0 < \Sigma_t^0 \leq \Sigma_t$. Alors, il existe une constante C indépendante de h et p telle que*

$$\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} \leq C \sum_K \frac{h_K^{\nu_K - \frac{1}{2}}}{p_K^{s-\frac{1}{2}}} \|u\|_{L^2(K)} \tag{2.11}$$

avec $\nu_K = \min(p_K + 1, s)$.

Ce résultat a ensuite été vérifié sur les benchmarks MMS (Figure 2.2). L'ordre de convergence en $\mathcal{O}\left(p^{-s+\frac{1}{2}}\right)$ est observé. En particulier, il est impossible de faire converger le cas MMS0 en raffinant uniquement en ordre. Mais, il existe une zone

préasymptotique dans laquelle la convergence est en $\mathcal{O}\left(p^{-s}\right)$. Cela correspond à la meilleure interpolation possible d'une fonction dans H^s par un polynôme de degré p (10). Cela montre qu'augmenter l'ordre de la base de polynômes s'avère intéressant même lorsque la solution n'est pas continue.

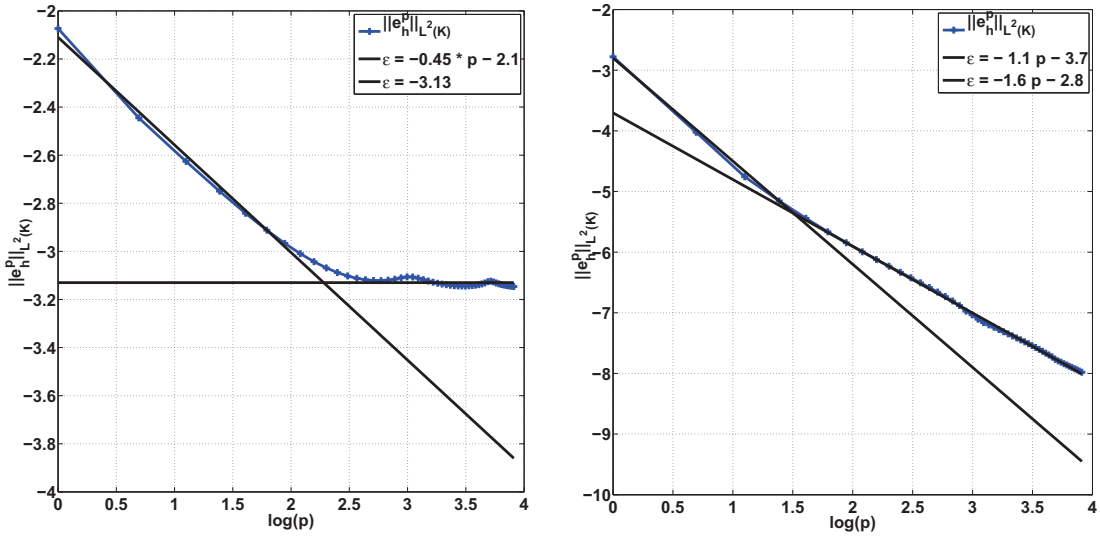


Figure 2.2: Erreur en norme L^2 pour un raffinement uniforme en p pour les benchmarks MMS0 (gauche) et MMS1 (droite)

2.2 Estimateur d'erreur *a posteriori*

Après avoir estimé les vitesses de convergence théoriques, on cherche un estimateur d'erreur *a posteriori* c'est-à-dire une quantité locale représentant l'erreur qui puisse être calculée au fil des itérations. Deux estimateurs sont dérivés par la suite. Dans un premier temps (Section 2.2.1), on dérive une borne sans prendre en compte le manque de régularité dans le cas du transport en physique des réacteurs puis on propose (Section 2.2.2) un estimateur basé sur des hypothèses plus faibles.

2.2.1 Estimateur d'erreur avec des hypothèses de régularité fortes

On suppose que la solution est analytique *i.e.* qu'elle est de classe C^∞ et développable en série entière. La dérivation de cette borne utilise les polynômes de Radau définis dans (52).

Definition 1. Le polynôme de Radau à droite de degré k est défini par

$$\begin{cases} R_0(\xi) = L_0(\xi) & -1 \leq \xi \leq 1 \\ R_k(\xi) = L_k(\xi) - L_{k-1}(\xi) & k \geq 1, \quad -1 \leq \xi \leq 1 \end{cases} \tag{2.12}$$

où L_k est le polynôme de Legendre d'ordre k.

De même, le polynôme de Radau à gauche de degré k est

$$\begin{cases} R_0(\xi) = L_0(\xi) & -1 \leq \xi \leq 1 \\ R_k(\xi) = L_k(\xi) + L_{k-1}(\xi) & k \geq 1, \quad -1 \leq \xi \leq 1 \end{cases} \tag{2.13}$$

On suppose tout d'abord que le maillage est conforme avec des cellules carrées telles que $h_x = h_y = h$ et que la base de polynômes est uniforme d'ordre p. Comme décrit dans Section 1.2.3, il existe une transformation affine F permettant de passer d'une cellule quelconque K à la cellule de référence $\hat{K} = [-1, 1]^d$. En notant $(\xi, \eta) = F(x, y)$, on montre le théorème suivant (35) :

Theorème 2. *Soit ϕ solution de Eq. 1.21 et ϕ_h^p solution de Eq. 1.44. L'erreur locale satisfait*

$$\hat{e}_h^p(\xi, \eta) = \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k Q_k(\xi, \eta) \quad avec \quad Q_{p+1}(\xi, \eta) = \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta) \tag{2.14}$$

où β_ξ et β_η sont deux constantes qui seront déterminées par la suite.
De plus,

$$\int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) \hat{e}_h^p ds = \mathcal{O}\left(h^{2p+2}\right) \tag{2.15}$$

Remarque 2. *Le choix du type de polynômes de Radau dépend de la direction du S_N. Par exemple pour la coordonnée x, si $\Omega_x = \Omega \cdot x > 0$, on utilise un polynôme de Radau à droite (à gauche sinon). Ainsi, on assure que le polynôme de Radau s'annule à la frontière sortante. C'est cette propriété qui permet de montrer la superconvergence à la frontière sortante.*

Pour utiliser Theorème 2 comme estimateur d'erreur, la série est tronquée afin de garder uniquement le terme dominant *i.e*

$$\hat{e}_h^p(\xi, \eta) \approx \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta) \tag{2.16}$$

En injectant Eq. 2.16 dans la relation d'orthogonalité Eq. 1.49, on obtient un système vérifié par les coefficients β_ξ et β_η. Pour un domaine maillé par des parallélogrammes, ce système est même découplé et on a :

$$\begin{cases} \left(4\Omega_x J_{00}^{-1} + 2\Sigma_t |J| \left\|R_{p+1}\right\|^2\right) \beta_\xi = |J| \int_{\hat{K}} \left(Q - \Omega J^{-1} \nabla\phi_h - \Sigma_t \phi_h\right) R_{p+1}(\xi) d\xi d\eta \\ \left(4\Omega_y J_{11}^{-1} + 2\Sigma_t |J| \left\|R_{p+1}\right\|^2\right) \beta_\eta = |J| \int_{\hat{K}} \left(Q - \Omega J^{-1} \nabla\phi_h - \Sigma_t \phi_h\right) R_{p+1}(\eta) d\xi d\eta \end{cases} \tag{2.17}$$

Le calcul des coefficients β_ξ et β_η est donc rapide. Il suffit d'effectuer une projection du résidu sur une base de polynômes ce qui est peu coûteux. Il reste maintenant à étudier l'efficacité d'un tel estimateur.

Pour cela, on trace l'indice d'efficacité sur les benchmarks MMS (Figure 2.3). Dans les zones où la solution vérifie les hypothèses du théorème (loin des diagonales), l'estimateur se comporte très bien et l'indice d'efficacité est égal à 1. Par contre, le long des lignes caractéristiques, l'erreur est très largement sous-estimée. La zone affectée par le manque de régularité est d'autant plus grande que la solution est peu régulière.

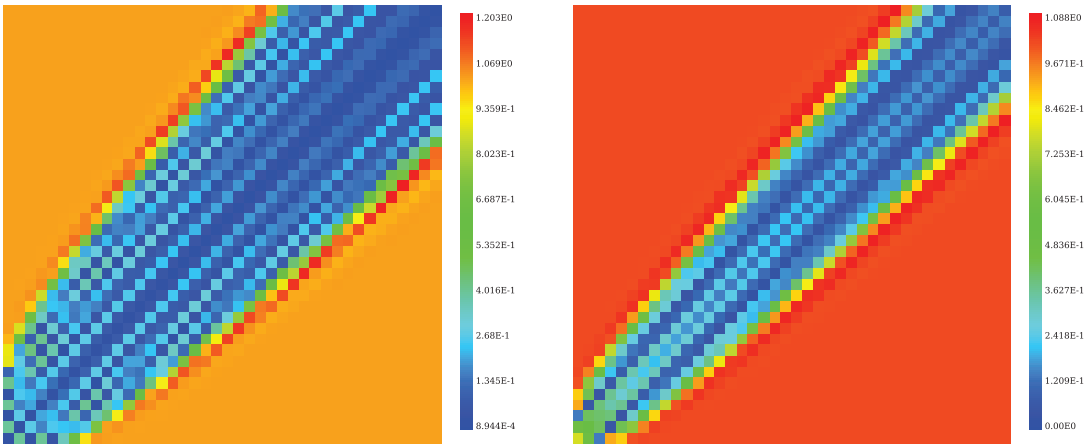


Figure 2.3: Indice d'efficacité sur un maillage conforme pour les benchmarks MMS0 (gauche) et MMS1 (droite)

De plus, cet estimateur a été dérivé dans le cas d'un maillage conforme avec un ordre polynômial uniforme. Or, lors d'une procédure de raffinement, le maillage va devenir non conforme ($h-$raffinement) ou l'ordre ne sera pas uniforme ($p-$raffinement). Dans Section 2.4, on montre l'influence sur l'indice d'efficacité d'un maillage non conforme ou d'une variation d'ordre de la base de polynômes. Pour cela, on modifie l'ordre dans une cellule (ou on créé une non-conformité en redécoupant une cellule) et on regarde les variations de l'indice d'efficacité. Une dégradation est observée dans la cellule modifiée mais aussi dans les cellules avales situées dans le prolongement de la cellule modifiée le long de la ligne caractéristique. Ce phénomène est représenté Figure 2.4 lorsque l'on passe d'une cellule fine aux autres plus grossières et inversement. L'indice d'efficacité s'éloigne de 1 mais on note toutefois que cette dégradation est très inférieure à celle liée aux problèmes de régularité.

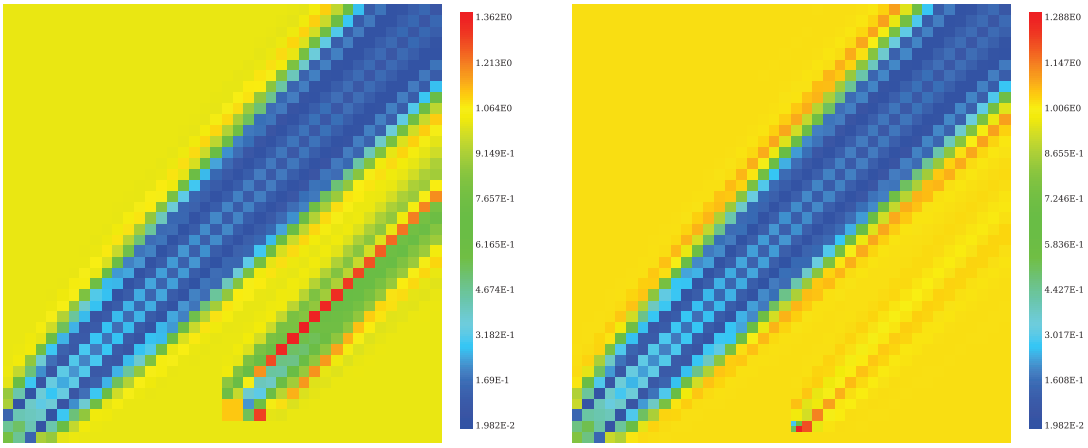


Figure 2.4: Indice d'efficacité pour le benchmark MMS1 dans le cas du raffinement (gauche) ou déraffinement (droite) d'une cellule

Il reste à voir si le fait de sous-estimer l'erreur dans les zones non régulières va empêcher de raffiner les zones contribuant le plus à l'erreur. Si la solution n'est pas continu (cas MMS0), l'estimateur ne localise pas correctement les zones où l'erreur est importante (Figure 2.5). Pour E^R, l'erreur est la plus importante au-dessus et en-dessous des lignes caractéristiques et non pas sur ces lignes. Ainsi, si le raffinement est mené avec cet estimateur, on obtient le maillage présenté Figure 2.5 (droite) qui est inadapté.

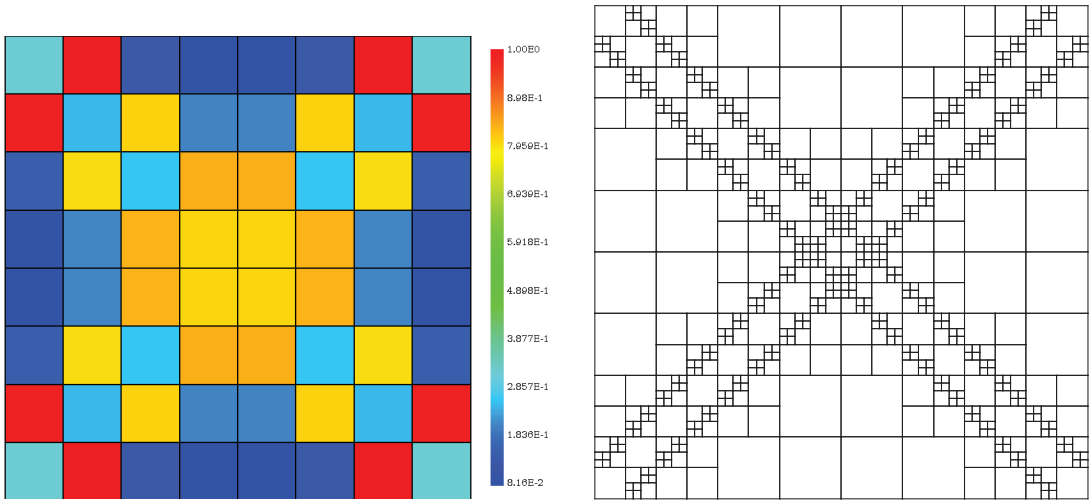


Figure 2.5: Estimateur de Radau sur le maillage initial (gauche) et maillage obtenu après raffinement (droite) sur le cas MMS0

Par contre, dès que la solution est au moins continue, E^R peut permettre de me-

ner le raffinement de manière efficace même si l'estimateur a été dérivé dans le cas C^∞. En effet, les valeurs les plus grandes de E^R sont bien localisées sur les diagonales (Figure 2.6). Si le raffinement est conduit avec E^R, on aboutit au maillage présenté Figure 2.6 (droite) qui est adapté.

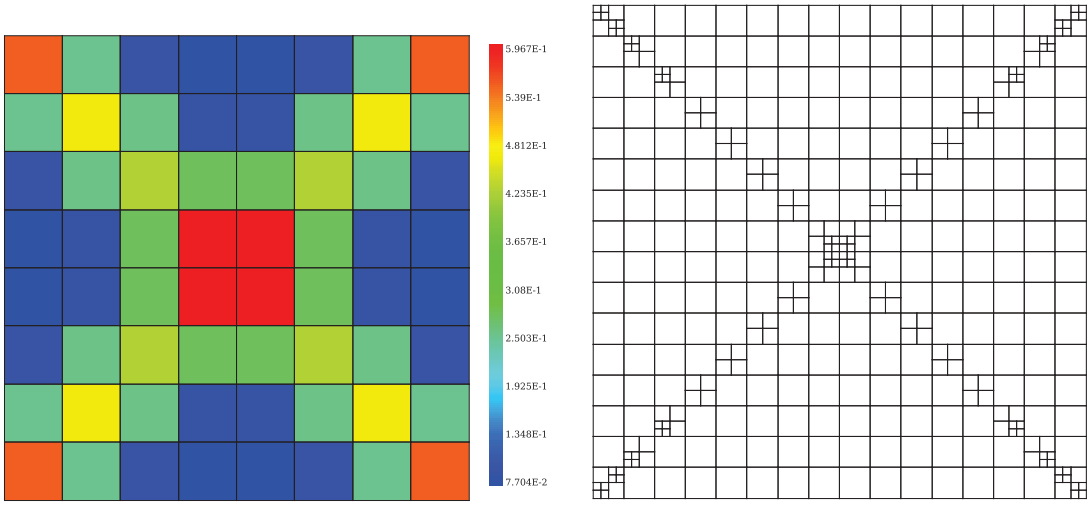


Figure 2.6: Estimateur de Radau sur le maillage initial (gauche) et maillage obtenu après raffinement (droite) sur le cas MMS1

E^R peut donc être efficace même lorsque la régularité est peu importante. Toutefois, si la solution n'est pas continue, il se révèle incapable de localiser les zones où l'erreur est grande conduisant à un maillage inadapté et donc à une mauvaise convergence. On cherche donc un estimateur dérivé avec des hypothèses de régularité plus faibles.

2.2.2 Estimateur d'erreur avec des hypothèses de régularité faibles

La solution du problème physique ne pouvant avoir une régularité supérieure à $H^{\frac{3}{2}-}$, on cherche un estimateur d'erreur avec des hypothèses de régularité plus faibles. On suppose seulement les hypothèses minimales permettant de garantir que le problème est bien posé c'est-à-dire que la solution appartient à l'espace des fonctions aux variations bornées (BV) dans le cadre des volumes finis (VF) et à $W^{1,1}(K) \cap L^\infty(K)$ en DG. $W^{1,1}(K)$ représente l'espace de Sobolev

$$W^{1,1}(K) = \left\{ u \in L^1(K) \text{ t.q. } u' \in L^1(K) \right\} \tag{2.18}$$

Les premiers estimateurs dans ce cadre ont été dérivés pour schémas de type volumes finis (28) que l'on peut voir comme le cas limite des méthodes DG (ordre 0). En VF,

Eq. 1.21 s'écrit :

$$h_K \Sigma_t \phi_h + \sum_{\gamma \in \partial K} h_\gamma n \cdot F(\Omega, \phi_h) = h_K Q_h \quad \forall\, K \in \mathcal{T} \tag{2.19}$$

où F représente le flux upwind défini de manière consistante à Eq. 1.41 en DG.

Theorème 3 (Estimation d'erreur en VF)**.** *Soit ϕ solution de Eq. 1.21 et ϕ_h de Eq. 2.19. Alors, nous avons une estimation locale de l'erreur autour d'un point x_0 :*

$$\|\phi_h - \phi\|_{L^1(B_R(x_0))} \leq C\sqrt{\tilde{\eta}}$$

avec $\tilde{\eta}$

$$\tilde{\eta} = \sum_{K \in \mathcal{J}} \tilde{\eta}_K = \sum_{K \in \mathcal{J}} \sum_{\gamma \in \partial K} h_\gamma \left|\Omega \cdot n\right| \left|\phi_h^+ - \phi_h^-\right| \tag{2.20}$$

où $\mathcal{J}$ représente l'ensemble des cellules telles que $K \cap B_R(x_0) \neq \emptyset$.

Démonstration. Voir Annexe 1 pour l'adaptation de la preuve (28) dans notre cadre. □

L'extension de cette preuve au cas DG a été faite par Dedner et Ohlberger (22) pour un problème de Cauchy. L'adaptation à notre problème est disponible en Annexe 2.

Theorème 4 (Estimation d'erreur en DG)**.** *Soit ϕ solution de Eq. 1.21 et ϕ_h^p de Eq. 1.44. Alors :*

$$\left\|\phi_h^p - \phi\right\|_{L^1(B_R(x_0))} \leq \eta_h = \sqrt{K_1 \eta_1} + \sqrt{K_2 \eta_2}$$

avec $\eta_i = \sum_{K \in \mathcal{J}} \eta_{i,K}$, $i = 1, 2$ et les contributions locales sont données par

$$\begin{aligned}
\eta_{1,K} &= \eta_{1,K}^1 + \eta_{1,K}^2 = \int_K h_K \left|\Omega \cdot \nabla \phi_h^p + \Sigma_t \phi_h^p - Q_h\right| + \sum_{\gamma \in \partial K} h_\gamma \int_\gamma \left|\Omega \cdot n\right| \left|\phi_h^{p,+} - \phi_h^{p,-}\right| \\
\eta_{2,K} &= \left\|\overline{\phi_h^p} - \phi_h^p\right\|_{L^\infty(K)} \int_K \left|\Omega \cdot \nabla \phi_h^p + \Sigma_t \phi_h^p - Q_h\right| \\
&\quad + \sum_{\gamma \in \partial K} \left\|\overline{\phi_h^p} - \phi_h^p\right\|_{L^\infty(\gamma)} \int_\gamma \left|\Omega \cdot n\right| \left|\phi_h^{p,+} - \phi_h^{p,-}\right|
\end{aligned}$$

et $\overline{\phi_h^p}$ représente la valeur moyenne de ϕ_h^p sur la cellule K.

Démonstration. Voir Annexe 2 pour l'adaptation de la preuve (22) dans notre cadre. □

Cet estimateur d'erreur demande le calcul de 4 termes sur chaque cellule. Nous allons analyser la vitesse de convergence des différents termes afin de voir si certains

sont négligeables et éventuellement mettre en place un estimateur simplifié.

Figure 2.7 représente la convergence des termes η_1^1 et η_1^2 en fonction de h et de p sur les cas MMS. Indépendamment de la régularité, η_1^1 est négligeable par rapport à η_1^2. Dans les 2 cas, on a $\eta_1^1 \approx h^2\eta_1^2$. On peut donc utiliser uniquement les termes calculés sur les arêtes pour estimer l'erreur, ceux sur la cellule étant négligeables.

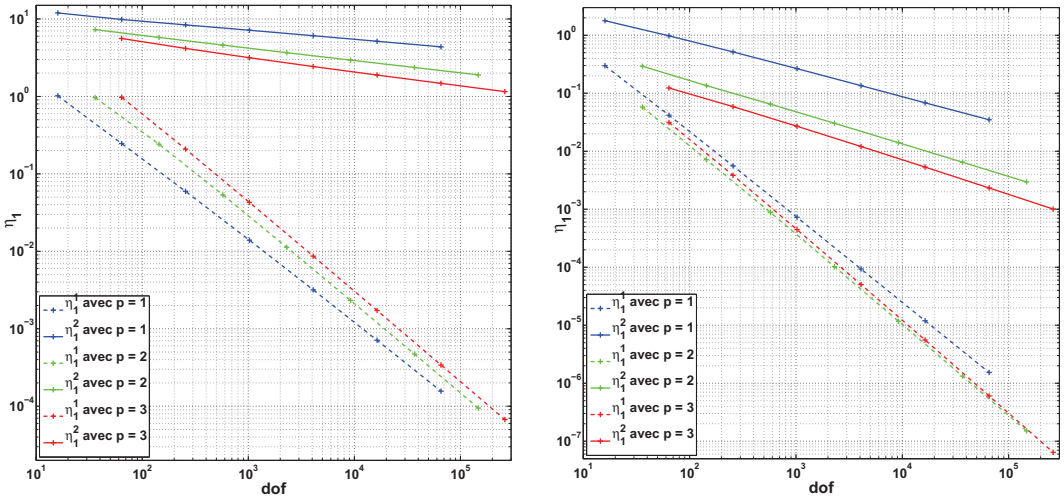


Figure 2.7: Comparaison de η_1^1 et η_1^2 en fonction de *dof* et de p pour les cas MMS0 (gauche) et MMS1 (droite)

Il nous reste à comparer η_1^2 et η_2^2. Sur le cas MMS0, $\left\|\overline{\phi_h^p} - \phi_h^p\right\|_{L^\infty(K)}$ ne converge pas alors que dans le cas MMS1, on a $\left\|\overline{\phi_h^p} - \phi_h^p\right\|_{L^\infty(K)} = \mathcal{O}(h)$ (33). Donc, η_1^2 et η_2^2 sont équivalents si la solution est au moins continue, par contre, η_2^2 domine pour MMS0. Il serait donc nécessaire de garder $\eta_2^2 = \sum_{\gamma\in\partial K} \left\|\overline{\phi_h^p} - \phi_h^p\right\|_{L^\infty(\gamma)} \int_\gamma |\Omega\cdot n| \left|\phi_h^{p,+} - \phi_h^{p,-}\right|$ comme estimateur d'erreur.

Pour voir l'impact de ces 2 termes, on adapte le maillage sur le cas MMS0 en utilisant comme estimateur d'erreur :

- η_1^2 (on conserve uniquement le terme le plus simple à calculer)
- $\eta_1^2 + \eta_2^2$ (en calculant la norme infinie)

La norme L^2 en fonction des *dof* est montrée Figure 2.8. On remarque très peu de différences entre les 2 stratégies ce qui peut paraître surprenant *a priori*. Afin de comprendre ce phénomène, on trace Figure 2.9 l'allure de η_1^2 et de $\eta_1^2 + \eta_2^2$. Les 2 quantités nous permettent de bien repérer la diagonale et donc de mener le raffinement de

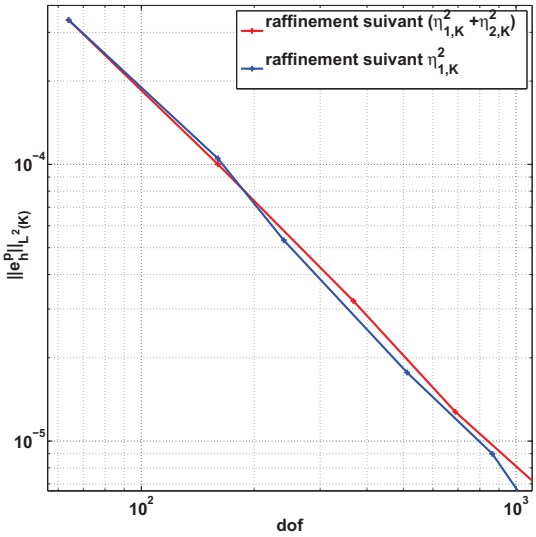


Figure 2.8: Erreur L^2 sur le cas MMS0 suivant les termes conservés dans l'estimateur E^{DG}

manière efficace. La norme infinie $\left\|\overline{\phi_h^p}-\phi_h^p\right\|_{L^\infty(K)}$ ne fait qu'accentuer l'effet du terme de saut $\sum_{\gamma\in\partial K}\int_\gamma |\Omega\cdot n|\left|\phi_h^{p,+}-\phi_h^{p,-}\right|$ et ne modifie pas de manière significative la façon de raffiner.

Afin d'éviter la complexité associée au calcul de $\left\|\overline{\phi_h}-\phi_h\right\|_{L^\infty(K)}$, on peut conserver uniquement $\eta^2_{1,j}$ pour raffiner. On notera cet estimateur simplifié $\tilde{E}^{DG}$

$$\tilde{E}^{DG}=\sum_{K\in\mathcal{J}}\eta^2_{1,K}=\sum_{K\in\mathcal{J}}\sum_{\sigma\in\partial K}h_\sigma\int_\sigma|\Omega\cdot n|\left|\phi_h^+-\phi_h^-\right| \tag{2.21}$$

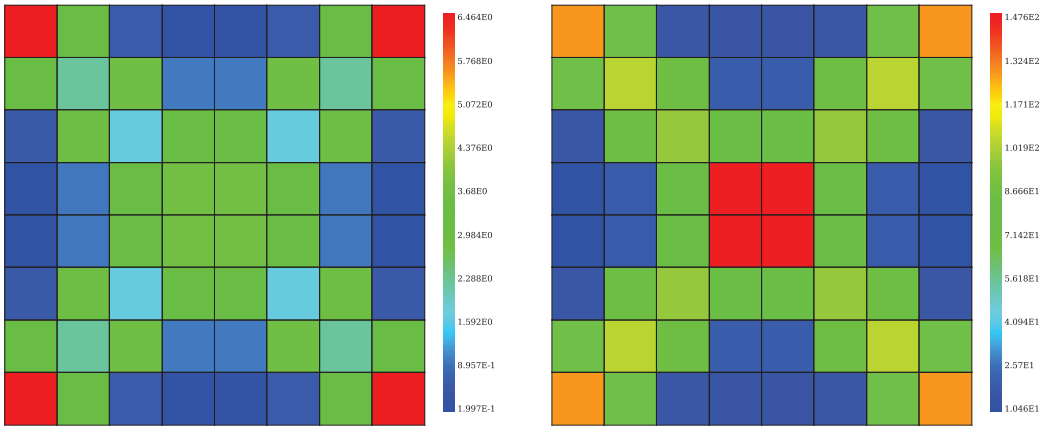


Figure 2.9: Représentation de $\eta^2_{1,K}$ (gauche) et de $\eta^2_{1,K}+\eta^2_{2,K}$ (droite) sur le cas MMS0

Notons que cet estimateur correspond à celui défini Theorème 3 dans le cadre des

volumes finis. Cela donne aussi une justification à l'utilisation du saut entre les cellules parfois utilisé de manière heuristique pour raffiner. On citera par exemple (71) pour une utilisation dans le cadre de l'équation de transport des neutrons discrétisée angulairement par méthode S_N.

Figure 2.10 présente le maillage obtenu en raffinant avec $\tilde{E}^{DG}$. Contrairement à E^R (Section 2.2.1), les cellules sont bien raffinées là où l'erreur est la plus importante, *i.e.* le long des diagonales. La convergence est évidemment bien meilleure avec cet estimateur (Figure 2.10 (droite)). Cet estimateur dérivé avec des hypothèses de régularité faibles permet donc de raffiner correctement tous nos cas d'applications, même lorsque la solution n'est pas continue.

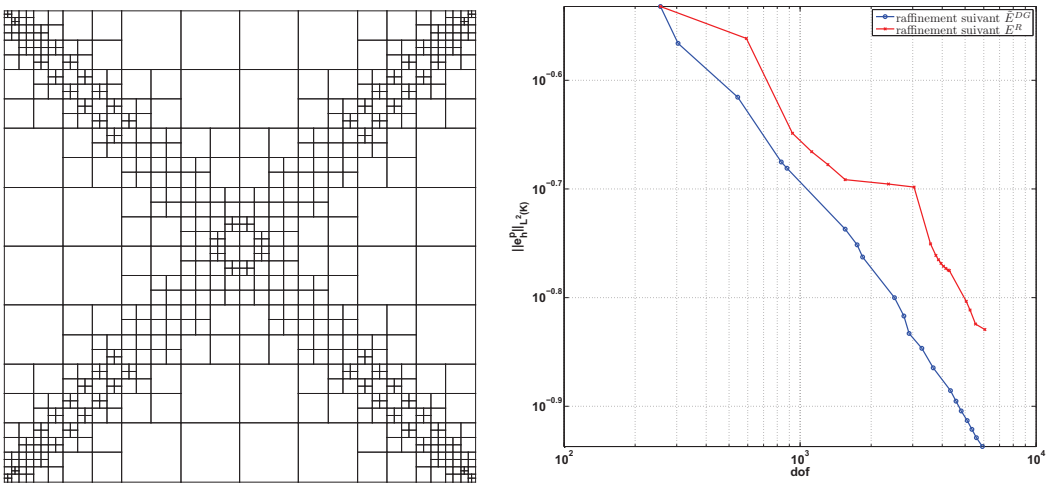


Figure 2.10: Maillage obtenu en raffinant avec $\tilde{E}^{DG}$ (gauche) et comparaison de la convergence avec un raffinement suivant E^R (droite) sur le cas MMS0

Dès que la solution est au moins continue, les deux estimateurs se comportent de manière similaire (Figure 2.11), le maillage est raffiné de la même manière (le long des diagonales) et la convergence des deux méthodes est équivalente.

Dans la suite, on utilisera $\tilde{E}^{DG}$ pour guider le raffinement car cet estimateur permet de raffiner de manière efficace tous nos cas d'applications.

2.3 Stratégies *hp*

Différentes manières de choisir entre $h-$ et $p-$raffinement ont été présentées Section 1.3.3. En particulier, la méthode "type-parameter" a été retenue afin d'effectuer

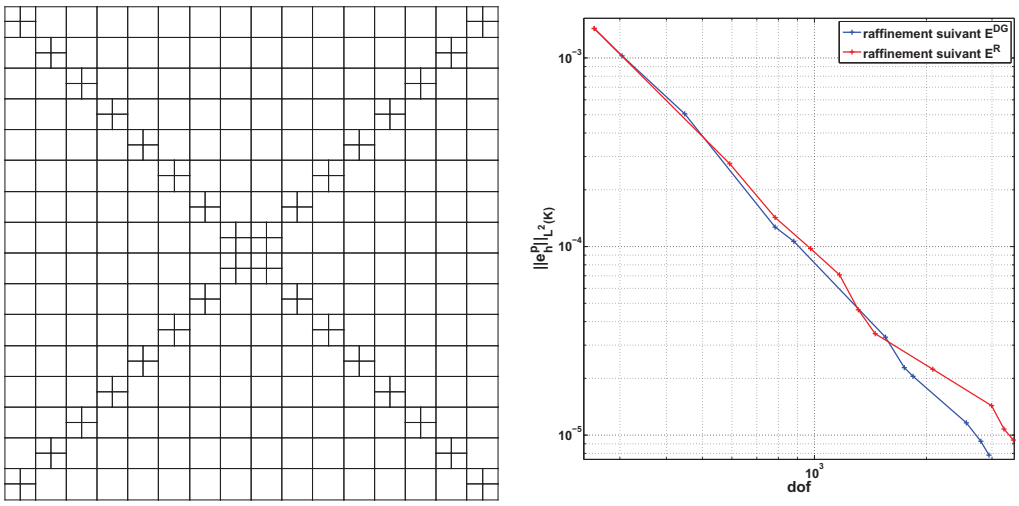


Figure 2.11: Maillage obtenu en raffinant avec $\tilde{E}^{DG}$ (gauche) et comparaison de la convergence avec un raffinement suivant E^R (droite) sur le cas MMS1

des comparaisons avec les 2 autres méthodes que nous proposons ci-dessous.

2.3.1 Stratégie à 2 estimateurs

Cette stratégie est dans la lignée des méthodes d'estimation locale de la régularité. Si les 2 estimateurs présentés Section 2.2 ont le même comportement cela signifie que la solution est assez régulière pour que E^R soit correct donc on favorisera le $p-$raffinement. Dans le cas contraire, du $h-$raffinement sera effectuée. On va dans cette section détailler cette idée et la vérifier à l'aide des cas MMS.

Figure 2.12 représente les 2 estimateurs et l'erreur locale en norme L^1 sur le cas MMS0 sur le maillage initial et après quelques étapes de raffinement en ayant utilisé $\tilde{E}^{DG}$. On note que $\tilde{E}^{DG}$ présente une allure proche de celle de l'erreur et que son utilisation comme estimateur nous permettra donc de mener efficacement le processus de raffinement. Par contre, E^R localise l'erreur au-dessus et en-dessous des diagonales ce qui conduit à un maillage inadapté et donc à une mauvaise convergence comme présenté Section 2.2.1.

La même analyse est faite sur le cas MMS1 dans (33). Dans le cas où la solution est suffisamment régulière, E^R a le même comportement que $\tilde{E}^{DG}$ et on effectuera alors plutôt du $p-$raffinement. Si une cellule marquée par $\tilde{E}^{DG}$ pour raffinement ne l'est pas par E^R, cela montre une zone peu régulière et donc le $h-$raffinement sera utilisé. En notant *tol* la valeur au-delà de laquelle une cellule est raffinée, cette stratégie est

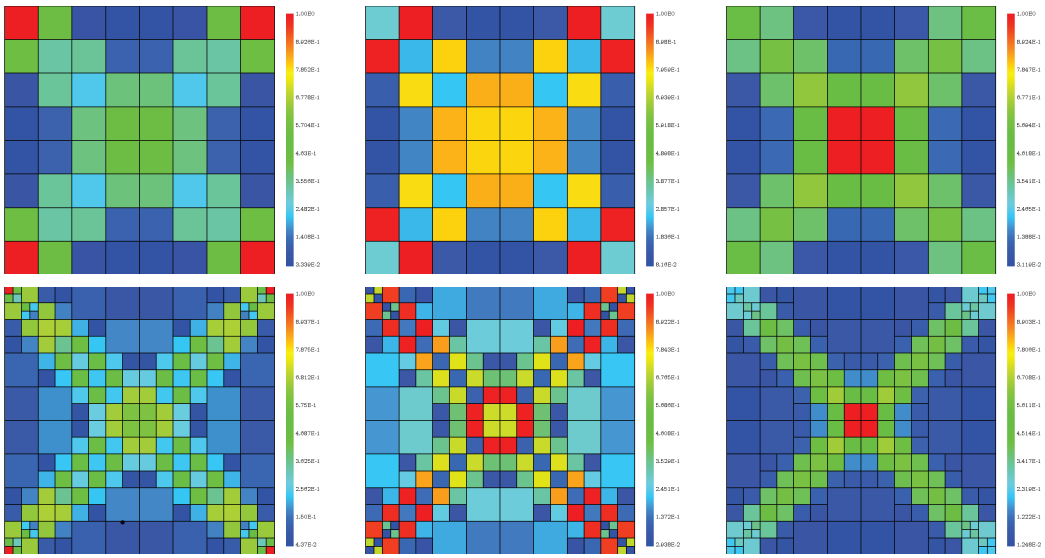


Figure 2.12: Comparaison de $\tilde{E}^{DG}$ (gauche), E^R (milieu) et ϵ_{L^1} (droite) sur le cas MMS0 avec 64 (haut) et 832 (bas) cellules

résumée Table 2.1.

	$E^R > \text{tol}$	$E^R < \text{tol}$
$\tilde{E}^{DG} > \text{tol}$	$p-$raffinement	$h-$raffinement

Table 2.1: Stratégie de raffinement à 2 estimateurs (hp^{2E})

2.3.2 Utilisation des vitesses de convergence théoriques

On peut aussi utiliser les vitesses de convergence théoriques afin de choisir le type de raffinement. On peut se reporter à Sections 2.1.1 et 2.1.2 pour cette analyse. On a montré Section 2.1 que

$$\left\|e_h^p\right\|_{L^2(\mathcal{D})} = \mathcal{O}\left(\frac{h^s}{p^\alpha}\right) \tag{2.22}$$

On a ici utilisé le fait que $p+1 < s$ dans tous nos cas tests. La valeur α vaut $s - \frac{1}{2}$ dans le régime asymptotique mais on a vu qu'elle pouvait valoir s dans une zone pré-asymptotique. Comme dans Chapitre 7 (Annexe 3), on définit une fonction coût :

$$\begin{cases} J_{p\to p+1,h} = \frac{\left|\log(\epsilon_{p+1,h}) - \log(\epsilon_{p,h})\right|}{\log(dof_{p+1,h}) - \log(dof_{p,h})} & \text{pour le p-raffinement} \\ J_{p,h\to h/2} = \frac{\left|\log(\epsilon_{p,h/2}) - \log(\epsilon_{p,h})\right|}{\log(dof_{p,h/2}) - \log(dof_{p,h})} & \text{pour le h-raffinement} \end{cases} \tag{2.23}$$

Plus cette quantité est grande, meilleure est la stratégie. En particulier, le $p-$raffinement est meilleur que le $h-$raffinement si

$$J_{p\to p+1,h} > J_{p,h\to h/2} \tag{2.24}$$

En utilisant Eq. 2.22 dans Eq. 2.24, on montre que le $p-$raffinement est meilleur si

$$\alpha \log\left(\frac{p+1}{p}\right) \geq s \log\left(\frac{p+2}{p+1}\right) \tag{2.25}$$

Dans le cas où $\alpha = s$, Eq. 2.25 est toujours vérifiée et il faudrait donc toujours favoriser le $p-$raffinement. Si $\alpha = s - \frac{1}{2}$, Eq. 2.25 devient :

$$s \geq \frac{1}{2} \frac{\log\left(1+\frac{1}{p}\right)}{\log\left(1+\frac{1}{p(p+2)}\right)} \tag{2.26}$$

Dans nos cas d'études où $s = \frac{1}{2}$ ou $\frac{3}{2}$, cette relation n'est pas vérifiée (dès que p est au moins égal à 2), ainsi le $h-$raffinement est le plus intéressant dès que l'on se trouve dans le régime asymptotique. Une stratégie simple pour choisir entre les 2 types de raffinement consiste donc à raffiner initialement en ordre puis en espace dès que l'on entre dans le régime asymptotique. Figure 2.2 montrait que le régime pré-asymptotique était au moins valable tant que $p \leq 4$. Une stratégie que l'on peut appeler basique hp^B est résumée Table 2.2.

	$p \leq 4$	$p > 4$
$\tilde{E}^{DG} > \text{tol}$	$p-$raffinement	$h-$raffinement

Table 2.2: Stratégie de raffinement basique (hp^B)

Il est également possible de tirer profit du régime pré-asymptotique en favorisant initialement le $p-$raffinement puis en utilisant hp^{2E} par la suite. Cette méthode est présentée Table 2.3.

	$p \leq 4$	$p > 4$ et $E^R > \text{tol}$	$p > 4$ et $E^R < \text{tol}$
$\tilde{E}^{DG} > \text{tol}$	$p-$raffinement	$p-$raffinement	$h-$raffinement

Table 2.3: Stratégie de raffinement à 2 estimateurs (hp^{2E}_{mod})

2.3.3 Comparaison des différentes méthodes de raffinement hp

Les différentes stratégies présentées ci-dessus sont maintenant comparées sur les cas MMS0 et MMS1 (Figure 2.13). On note tout d'abord l'intérêt du $p-$raffinement tant que p n'est pas trop important. Tant que $dof \leq 2000$, le raffinement en p conduit à la meilleure convergence pour les 2 benchmarks. On retrouve l'intérêt d'augmenter l'ordre initialement. Par contre, faire uniquement du p n'est pas suffisant. Inversement, faire uniquement du h est peu efficace. En effet, les taux de convergence du $h-$raffinement avec $p = 1$ sont les moins intéressants. Par contre, si l'on monte l'ordre au moins à 2 avant de faire du $h-$raffinement on arrive à des vitesses de convergence très intéressantes, ce qui est en accord avec les constatations faites dans (23). Il reste maintenant à analyser ce qu'il se passe lorsqu'on utilise notre stratégie à 2 estimateurs. Dans le cas MMS0, si l'on utilise la stratégie hp^{2E}, on effectue toujours du $h-$raffinement le long des diagonales (comme par exemple entre les points 0 et 1 de Figure 2.13) et rarement du $p-$raffinement (entre 1 et 2) mais uniquement sur des cellules entourant les caractéristiques. Ainsi, la convergence est très proche de ce que l'on observe si l'on effectue uniquement du $h-$raffinement. En forçant le $p-$raffinement tant que $p \leq 4$, on améliore la convergence de manière significative. Ainsi du $p-$raffinement est effectuée même sur les lignes caractéristiques où la solution est peu régulière. Ensuite sur ces lignes, du $h-$raffinement est réalisé (entre 1 et 2, 3 et 4, 5 et 6) et du $p-$raffinement est toujours effectué en dehors des diagonales (entre 2 et 3, 4 et 5) où la solution est plus régulière. Sur le cas MMS1, les résultats sont moins marqués mais les algorithmes hp sont toujours efficaces. Vu que la solution est plus régulière, même la stratégie hp^{2E} va conduire à effectuer du $p-$raffinement le long des diagonales afin de monter l'ordre au moins à 2. Ainsi, cette stratégie se retrouve équivalente au $h-$raffinement avec $p = 2$ mais aussi au hp^{2E}_{mod}.

Ainsi, quel que soit le degré de non-régularité de la solution, on voit qu'il est fondamental de commencer par monter l'ordre de la base de polynômes au moins jusqu'à 2. La stratégie hp^{2E}_{mod} paraît prometteuse dans tous les cas. Une analyse sur le cas réaliste ZONA2B est réalisée Section 3.5 et les principaux résultats sont rappelés Section 3.1 après avoir introduit la problématique du couplage énergétique.

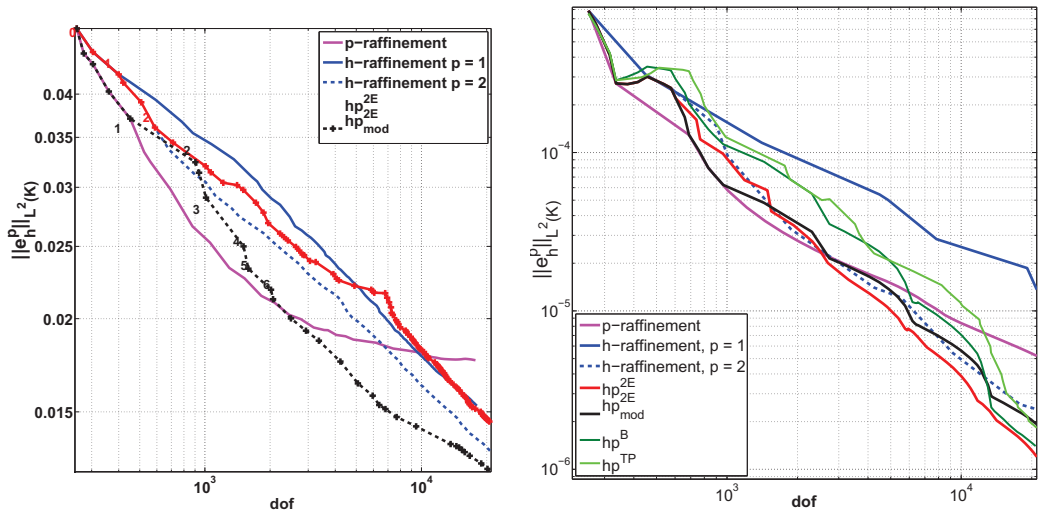


Figure 2.13: Comparaison de différentes stratégies de raffinement *hp* sur les cas MMS0 (gauche) et MMS1 (droite)

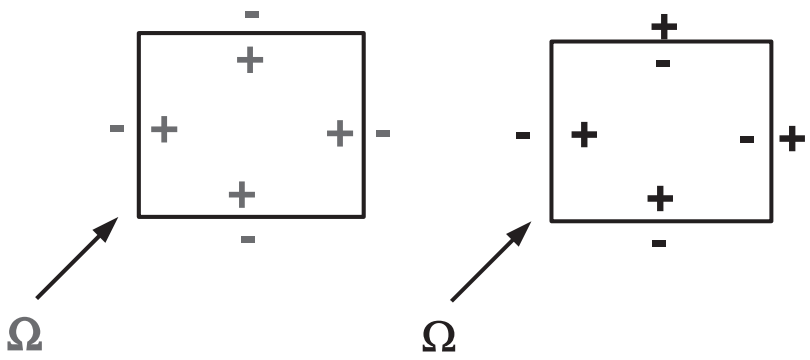


Figure 2.14: Notations utilisées pour la trace dans l'article (gauche) et la thèse (droite)

2.4 Article 1 : Analyse de l'estimateur de Radau

Cette section présente l'article : D. Fournier, R. Le Tellier, C. Suteau, "Analysis of an *a posteriori* error estimator for the transport equation with S_N and discontinuous Galerkin discretizations", Annals of Nuclear Energy en 2011 (**38**, pp.221-231). Le théorème d'estimation d'erreur (Theorème 2) présenté Section 2.2.1 est démontré puis analysé sur les cas MMS et un cas de protection (Section 1.2.2.1). On montre en particulier que même si l'estimateur est dérivé avec des hypothèses de régularité forte, il peut mener le raffinement de manière efficace dès que la solution est au moins continue.

On attire l'attention du lecteur sur le fait que la définition de la trace est différente de celle utilisée dans le reste du document. Les notations utilisées pour les traces ϕ^+ et ϕ^- sont représentées Figure 2.14.

2.4.1 Introduction

The solution of the time-independent Boltzmann equation in a deterministic way invariably requires to discretize successively the energetic, angular and spatial variables. In this paper, a discretization based on a multigroup approach considering flux and cross-sections to be constant within an energy group and a discrete-ordinate discretization as described in (53) are performed. It results in a set of coupled space-dependent linear first-order hyperbolic equations. This paper focuses on the space discretization and the development of associated adaptiveness capabilities.

Currently, most solvers are based on conforming spatial meshes, generally obtained by uniformly refining the geometry of the core. This approach is memory and time consuming. Thanks to adaptive methods, one can start with a coarse mesh and refine locally according to a given criterion. It leads to non-conforming meshes which can be dealt with using different strategies. A first class of methods called patch-based AMR (Adaptive Mesh Refinement) method (43) uses embedded meshes. Starting from a conforming mesh, the regions marked for refinement are decomposed into submeshes. When performed recursively, this type of strategy leads to excessive computational requirements because of the induced iterations to solve the multi-level mesh problem. The block-based AMR method proposed in (11) refines uniformly some blocks of cells assuming that each block is always a simply connected mesh. Because of this implementation, a cell already refined can not be splitted if the neighbor cells have not already been refined. This approach is computationally less expensive than the first one but offers less flexibility. In this paper, a cell-based AMR method (6) is used. Also called tree-based AMR because of its dichotomic topology, this method uses level-by-level nested cells. Each cells can be divided independently into subcells without any constraints on the neighbor cells. Although the information transmission between grid blocks is more complex, this algorithm is expected to be faster and less memory consuming than the two other ones.

With non-conforming meshes, the complexity of the cell interface information can lead to important difficulties for example if a global matrix assembly is required as in the standard continuous finite element method. In this paper, the spatial discretization is ensured by a discontinuous Galerkin method, firstly proposed in (72) and analyzed in (52). This method does not impose a continuity condition on the cell boundaries so that the problem can be solved locally. The combination of the cell-based AMR method and the discontinuous Galerkin (DG) discretization is particularly interesting to deal with

refinement. Non conforming capabilities allow $h-$adaptation and the flexibility given by the choice of the polynomial basis order in the DG method enables $p-$refinement. These two approaches can be combined into $hp-$refinement strategies. Such a flexibility explains the success of the DG method and its development in various fields.

Such an approach has already been implemented in two modern transport codes, XUTHOS (95) and the SNATCH solver of the ERANOS code system (79). For the first one, interesting results on different benchmarks have been presented in (94). The SNATCH solver for non-conforming 2D Cartesian meshes has been presented in (36) and analyzed for hexagonal geometries in (51). Both underline the interest of AMR-strategies to reduce the computational cost and improve the convergence rate. To drive the refinement process, an estimation of the error is required. This quantity has to approximate as precisely as possible the real error but also be easy to compute, *i.e.* its calculation time must be negligible compared to the one required to solve the equation.

Two classes of estimators have to be distinguished. Classical error estimates aim at finding the convergence rate of the approximation scheme. For the DG scheme, first error bounds were proved in (52) and improved in (45, 77) and finally (19) leading to an optimal order of convergence $\mathcal{O}(h^{p+1})$ under some hypotheses (h linked to the cell size and p polynomial basis order). It presents a theoretical interest but is useless for the adaptation mechanism. On the opposite, *a posteriori* error estimates can be evaluated along the transport equation iterations ; they depend on the approximate solution and some quantities related to the problem but not on the exact solution. The difference between the exact and approximate solution can be estimated directly in a given norm (frequently L^2) (3, 19, 26). One can also bound another quantity of interest such as in (39). Error estimations based on mesh-dependent norms have also been tested in (13).

This paper focuses on an *a posteriori* error estimator derived from (3). A simple adaptation strategy is used to test the estimator and assess its efficiency. All the developments necessary for this study have been done in the context of the SNATCH code. As adaptation induces non conforming meshes or different polynomial basis orders in the different cells, the behaviour of the estimator is analyzed in these cases.

The paper is organized as follows. After recalling the principle of discontinuous Galerkin methods in Section 2.4.2, Section 2.4.3 establishes an error estimator for a conforming mesh. Section 2.4.4 shows the limitations of this estimator for a non-conforming

mesh and proposes some improvements. Finally, Section 2.4.5 illustrates the properties of this estimator when used for mesh adaptation.

2.4.2 The upwind discontinuous Galerkin method

Let us consider a bounded polygonal domain $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$ with boundary $\partial\mathcal{D}$. In a given direction $\vec{\Omega}_j$ (a point of the S_N quadrature), we denote $\partial\mathcal{D}_-$ (resp. $\partial\mathcal{D}_+$) the inflow (resp. outflow) boundary *i.e* the set $\partial\mathcal{D}_- = \left\{\vec{r} \in \partial\mathcal{D}\ s.t.\ \vec{\Omega}_j(\vec{r}).n(\vec{r}) < 0\right\}$ (resp. $\partial\mathcal{D}_+ = \left\{\vec{r} \in \partial\mathcal{D}\ s.t.\ \vec{\Omega}_j(\vec{r}).n(\vec{r}) \geq 0\right\}$ where $\vec{n}$ denotes the outgoing normal vector. Notations are illustrated in Figure 2.15.

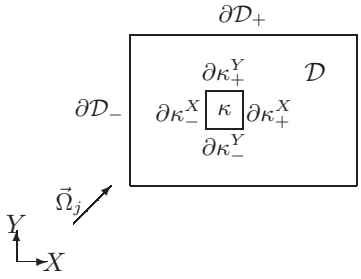


Figure 2.15: Cell and domain notations

The equation resulting from the multigroup S_N discretization is given for each group g and direction j by

$$\begin{cases} \vec{\Omega}_j \cdot \vec{\nabla}\phi_j^g(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\phi_j^g(\vec{r}) = S_j^g(\vec{r}) & \forall \vec{r} \in \mathcal{D} \\ \phi_j^g(\vec{r}) = \phi_{j,g}^{BC}(\vec{r}) & \forall \vec{r} \in \partial\mathcal{D}_- \end{cases} \tag{2.27}$$

where ϕ_j^g is the angular flux in group g and along direction $\vec{\Omega}_j$, Σ_t^g the total cross-section in group g and S_j^g the source in group g and along direction $\vec{\Omega}_j$ resulting of outer levels of iterations that encompasses fission and scattering contributions.

In order to solve Eq. 2.27, the spatial domain has to be discretized : $\mathcal{D}$ is divided into parallelograms in order to constitute a partition of $\mathcal{D}$. Let $\mathcal{T}$ be a subdivision of the space $\mathcal{D}$ into disjoint parallelograms κ such that $\bigcup_{\kappa\in\mathcal{T}} \kappa = \overline{\mathcal{D}}$. We define the broken Sobolev space $H^1(\mathcal{D},\mathcal{T}) = \left\{u \in L^2(\mathcal{D}) \ :\ u_{|\kappa} \in H^1(\kappa) \quad \forall\kappa \in \mathcal{T}\right\}$ and for any p, the Hilbert space V_h^p

$$V_h^p = \left\{v \in L^2(\mathcal{D})\ s.t.\ \forall\kappa \in \mathcal{T} \quad v_{|\kappa} \in V_p\right\} \subset H^1(\mathcal{D},\mathcal{T}) \tag{2.28}$$

with V_p the Hilbert space defined by

$$V_p = \left\{V | V = \sum_{k=0}^{p}\sum_{i=0}^{k} c_i^k x^i y^{k-i} + \sum_{i=1}^{p} c_i^{p+1} x^i y^{p+1-i}\right\} \tag{2.29}$$

associated with the standard L^2 scalar product.
A simple *a posteriori* error estimator can be found within these spaces.

In the following, the indices g and j are omitted unless necessary for clarity. However, one must bear in mind that the error estimation has to be done for each group, direction and cell which induces a large number of equations on a realistic benchmark. It explains the necessity of obtaining a costless estimator.

The discontinuous Galerkin method consists in multiplying Eq. 2.27 by a test function and integrating by parts over the element κ in order to obtain the local formulation

$$\int_\kappa \left(-\phi_h \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h + \Sigma_t \phi_h \psi_h\right) dV + \int_{\partial\kappa\setminus\partial\mathcal{D}} \left(\vec{n}\cdot\vec{F}\left(\vec{\Omega},\phi_h\right)\right)\psi_h^+ ds = \int_\kappa Q_h\psi_h dV - \int_{\partial\kappa_-\cap\partial\mathcal{D}_-} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)\phi_h^{BC}\psi_h^+ ds \tag{2.30}$$

where $\vec{F}$ represents the numerical flux associated to the numerical scheme. In the upwind method, $\vec{F}$ is given by

$$\vec{F}\left(\vec{\Omega},\phi_h\right) = \begin{cases} \vec{\Omega}\phi_h^+ & \text{on } \partial\kappa^+ \\ \vec{\Omega}\phi_h^- & \text{on } \partial\kappa^- \end{cases} \tag{2.31}$$

where ϕ_h^+ (resp. ϕ_h^-) denotes the trace of ϕ_h from the inside (resp. outside) of the element κ under consideration.
Summing over the whole domain leads to the global formulation

Find $\phi_h \in V_h^p$ s.t. $\forall\psi_h \in V_h^p$

$$a(\phi_h,\psi_h) = l(\psi_h) \tag{2.32}$$

with

$$\begin{aligned} a(\phi_h,\psi_h) &= \sum_{\kappa\in\mathcal{D}_h}\left(\int_\kappa \left(-\phi_h\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h + \Sigma_t\phi_h\psi_h\right)dV + \int_{\partial\kappa_+}\left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)\phi_h^+\psi_h^+ ds \right. \\ &\qquad \left. + \int_{\partial\kappa_-\setminus\partial\mathcal{D}_-}\left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)\phi_h^-\psi_h^+ ds\right) \\ l(\psi_h) &= \sum_{\kappa\in\mathcal{D}_h}\left(\int_\kappa Q_h\psi_h dV - \int_{\partial\kappa_-\cap\partial\mathcal{D}_-}\left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)\phi_h^{BC}\psi_h^+ ds\right) \end{aligned}$$

Eq. 2.32 is solved locally (cell by cell) which is the main advantage of the method invoked in the introductive part. Solving is done by sweeping the mesh cells in a $\vec{\Omega}$-dependent order. For example, in a Cartesian mesh and for a given direction $\vec{\Omega}$ such that $\Omega_x > 0$ and $\Omega_y > 0$, the mesh is swept from the bottom left corner to the top right one. A cell κ_i is said upstream of κ if Eq. 2.30 is solved for κ_i before κ. The set of the

upstream cells of κ is denoted $\mathcal{A}_\kappa$.
In the following, we will omit the + notation when a quantity is defined on the computational cell.

2.4.3 Error estimator for a conforming mesh

We define the error on each element by $e_h = \Phi - \phi_h$ where Φ represents the exact solution of Eq. 2.27. It satisfies

$$\int_\kappa e_h \left(-\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h + \Sigma_t\psi_h\right) dV + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) e_h\psi_h ds + \int_{\partial\kappa_-\setminus\partial\mathcal{D}_-} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) e_h^-\psi_h ds = 0 \tag{2.33}$$

The idea is to modify Eq. 2.33 in order to get rid of the exact solution Φ and obtain a bound only dependent on the approximate solution and some quantities linked to the problem.

The derivation uses a basis of polynomial called Radau polynomials (52).

Definition 2. We call right Radau polynomial of order k, the polynomial of order k defined by

$$\begin{cases} R_0(\xi) = L_0(\xi) & -1 \leq \xi \leq 1 \\ R_k(\xi) = L_k(\xi) - L_{k-1}(\xi) & k \geq 1, \quad -1 \leq \xi \leq 1 \end{cases} \tag{2.34}$$

where L_k is the Legendre polynomial of order k.

Similarly, the left Radau polynomial of order k is

$$\begin{cases} R_0(\xi) = L_0(\xi) & -1 \leq \xi \leq 1 \\ R_k(\xi) = L_k(\xi) + L_{k-1}(\xi) & k \geq 1, \quad -1 \leq \xi \leq 1 \end{cases} \tag{2.35}$$

Radau polynomials exhibit some interesting properties :

Proposition 1.
- $(R_k)_{k\leq p}$ *is a basis of the space of polynomials of degree inferior or equal to* p
- $\forall k \geq 1$, *left (resp. right)* R_k *is equal to 0 at -1 (resp. 1)*
- $(R_k)_k$ *is not an orthogonal basis but* $\forall j < k-1$, $\int_\kappa R_j R_k ds = 0$

2.4.3.1 Estimator theory

As the proof proceeds by induction, we consider a given cell κ and the two other ones that contribute to the inflow boundary terms. We suppose in this part that the mesh is conforming and uniform with square cells such that $h_x = h_y = h$. Besides, the finite element basis is assumed to be spatially uniform (cf. Figure 2.16).

Let us define the reference cell $\hat{\kappa}$ as the square cell defined on $[-1,1]\times[-1,1]$ and write Eq. 2.33 in $\hat{\kappa}$. Using the hat notation for variables expressed in the reference cell, it follows

$$\int_{\hat{\kappa}} \hat{e}_h \left(-\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}_{\hat{\kappa}}\hat{\psi}_h + \frac{h}{2}\Sigma_t\hat{\psi}_h \right) d\hat{V} + \int_{\partial\hat{\kappa}_+} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)\hat{e}_h\hat{\psi}_h d\hat{s} + \int_{\partial\hat{\kappa}_-\setminus\partial\mathcal{D}_-} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)\hat{e}_h^-\hat{\psi}_h d\hat{s} = 0 \tag{2.36}$$

Let us suppose that the source term Q and the flux ϕ belong to $\mathcal{C}^\infty$. Note that this condition is not satisfied in real applications and a discussion about the regularity is given in Section 2.4.3.3.

The error on cell κ is estimated by a Taylor-expansion of the real error (without loss of generality, the bottom left corner of the cell is supposed to be located at $(0,0)$).

$$e_h = \sum_{|\alpha|\geq 0} \frac{\mathbf{x}^\alpha}{\alpha!}\partial^\alpha e_h(0,0) \tag{2.37}$$

This expansion is written in the reference cell $[-1,1]\times[-1,1]$, by considering

$$\mathbf{x} = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} 1+\xi \\ 1+\eta \end{pmatrix}, \quad \text{with} \quad \xi,\ \eta \in [-1,1]$$

in such a way that Eq. 2.37 becomes

$$\hat{e}_h(\xi,\eta) = \sum_{|\alpha|\geq 0} \frac{h^\alpha}{2^\alpha\alpha!}\begin{pmatrix} 1+\xi \\ 1+\eta \end{pmatrix}^\alpha \partial^\alpha e_h(0,0) = \sum_{|\alpha|\geq 0} h^\alpha Q^\alpha(\xi,\eta) \tag{2.38}$$

with

$$Q_\alpha(\xi,\eta) = \frac{1}{2^\alpha\alpha!}\begin{pmatrix} 1+\xi \\ 1+\eta \end{pmatrix}^\alpha \partial^\alpha e_h(0,0) = \frac{1}{2^\alpha\alpha!}\sum_{i=0}^{\alpha}(1+\xi)^i(1+\eta)^{\alpha-i}\frac{\partial^\alpha e_h}{\partial x^i\partial y^{\alpha-i}}(0,0) \tag{2.39}$$

In the following, we will omit the hat notation unless necessary for the sake of clarity.

Injecting Eq. 2.38 in Eq. 2.36 leads to

$$\sum_{k=0}^{\infty} h^k \left(\int_\kappa Q_k \left(-\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h + \frac{h}{2}\Sigma_t\psi_h \right) dV + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) Q_k\psi_h ds \right.$$
$$\left. + \int_{\partial\kappa_-\setminus\partial\mathcal{D}_-} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) Q_k^-\psi_h ds \right) = 0 \tag{2.40}$$

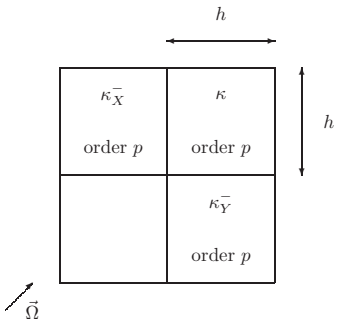


Figure 2.16: Configuration with a conforming mesh and a uniform basis order

In order to prove the main theorem, let us begin by introducing two lemmas.

Lemma 1. *Let* $Q_k \in V_h^p$ *s.t.* $\forall \psi_h \in V_h^p \ (k \leq p)$

$$-\int_\kappa \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h Q_0 dV + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) Q_0\psi_h ds = 0 \tag{2.41}$$

$$-\int_\kappa \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h Q_k dV + \int_\kappa \Sigma_t \psi_h Q_{k-1} dV + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) Q_k\psi_h ds = 0 \quad \forall\, 1 \leq k \leq p \tag{2.42}$$

Then, $\forall k \leq p \quad Q_k = 0$

Proof 1. Let us prove this lemma by induction. Green's formula applied to Eq. 2.41 implies

$$\int_\kappa \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}Q_0\psi_h dV - \int_{\partial\kappa_-} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) Q_0\psi_h ds = 0 \tag{2.43}$$

Summing Eq. 2.41 and Eq. 2.43 with $\psi_h = Q_0$ implies

$$\int_{\partial\kappa} \left|\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right| Q_0^2 ds = 0 \tag{2.44}$$

which leads to $Q_0 = 0$ on $\partial\kappa$. As Q_0 is a polynomial of order 0, it follows directly $Q_0 = 0$ on κ.

Let us suppose that $Q_{k-1} = 0$ on κ and prove that $Q_k = 0$ on κ. As $Q_{k-1} = 0$, Green's formula applied to Eq. 2.42 becomes

$$\int_\kappa \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}Q_k\psi_h dV - \int_{\partial\kappa_-} \left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right) Q_k\psi_h ds = 0 \tag{2.45}$$

Summing Eq. 2.42 and Eq. 2.45 with $\psi_h = Q_k$ implies

$$\int_{\partial\kappa} \left|\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right| Q_k^2 ds = 0 \quad \forall k \leq p \tag{2.46}$$

which leads to $Q_k = 0 \quad \forall k \leq p$ on $\partial\kappa$.

Applying Eq. 2.45 with $\psi_h = \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}Q_k$, it follows that

$$\int_\kappa \left(\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}Q_k\right)^2 dV = 0 \tag{2.47}$$

and consequently, $\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}Q_k = 0$ on κ. Combining with $Q_k = 0$ on $\partial\kappa$ concludes the proof.

Lemma 2. *Let $w \in C^\infty(0,h)$ and πw a polynomial of degree p that interpolates w at the roots of the Radau polynomial on $(0,h)$. Then :*
- $w(x(\xi)) - \pi w(x(\xi)) = \sum_{k=p+1}^{\infty} Q_k^-(\xi) h^k$
- $Q_{p+1}^-(\xi) = \frac{w^{(p+1)}(0)}{2^{p+1}(p+1)!} R_{p+1}(\xi)$
- $Q_k^-(\xi) = R_{p+1}(\xi) r_{k-p-1}(\xi) \quad \forall k > p+1$
  with r_k a polynomial of degree k

Proof 2. The interested reader is referred to (3) for the proof.

Theorem 1. *Let Φ be the solution of Eq. 2.27 and ϕ_h the solution of Eq. 2.32. The local error satisfies*

$$\hat{e}_h(\xi,\eta) = \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k Q_k(\xi,\eta) \quad \textit{with} \quad Q_{p+1}(\xi,\eta) = \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta) \tag{2.48}$$

Besides,

$$\int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) \hat{e}_h ds = \mathcal{O}\left(h^{2p+2}\right) \tag{2.49}$$

Remark 1. The choice of the Radau polynomial type depends on the S_N quadrature direction. If $\Omega_s > 0$, a right-Radau polynomial is used for coordinate s (left-Radau polynomial otherwise). Thus, we ensure that the polynomial is equal to 0 at the corresponding outflow boundary (Proposition 1).

Proof 3. Let us suppose that Eqs. 2.48 and 2.49 are satisfied on cells κ_-^X and κ_-^Y.
By induction hypothesis, $Q_k^- = 0 \quad \forall k \leq p$ on cell κ and Eq. 2.40 can be written

$$\begin{aligned}
&- \int_\kappa \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi_h Q_0 dV + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) Q_0 \psi_h ds \\
&+ \sum_{k=1}^{p} h^k \left(- \int_\kappa Q_k \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi_h dV + \int_\kappa \frac{\Sigma_t}{2} \psi_h Q_{k-1} dV + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) Q_k \psi_h ds \right) \\
&+ \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k \left(- \int_\kappa Q_k \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi_h + \int_\kappa \frac{\Sigma_t}{2} \psi_h Q_{k-1} dV \right. \\
&\qquad \left. + \int_{\partial\kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) Q_k \psi_h ds + \int_{\partial\kappa_- \setminus \partial\mathcal{D}_-} \left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) Q_k^- \psi_h ds \right) = 0
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Lemma 4 implies $Q_k = 0 \quad \forall k \leq p$.

Let us now analyze terms of order $(p+1)$. At this order, Eq. 2.39 is written

$$\begin{aligned} Q_{p+1}(\xi,\eta) &= \frac{1}{2^{p+1}(p+1)!}\sum_{i=0}^{p+1}(1+\xi)^i(1+\eta)^{p+1-i}\frac{\partial^{p+1}e_h}{\partial x^i\partial y^{p+1-i}}(0,0) \\ &= \frac{1}{2^{p+1}(p+1)!}\left(\sum_{i=1}^{p}(1+\xi)^i\ (1+\eta)^{p+1-i}\frac{\partial^{p+1}e_h}{\partial x^i\partial y^{p+1-i}}(0,0)+\right. \\ &\qquad \left.(1+\eta)^{p+1}\frac{\partial^{p+1}e_h}{\partial y^{p+1}}(0,0)+(1+\xi)^{p+1}\frac{\partial^{p+1}e_h}{\partial x^{p+1}}(0,0)\right) \end{aligned} \tag{2.51}$$

By reorganizing the terms, Eq. 2.51 can be written

$$Q_{p+1}(\xi,\eta) = \tilde{Q}_p(\xi,\eta) + \check{Q}_{p+1}(\xi,\eta) \tag{2.52}$$

where $\tilde{Q}_p \in V_p$ and

$$\begin{aligned} \check{Q}_{p+1}(\xi,\eta) &= \frac{1}{2^{p+1}(p+1)!}\frac{\partial^{p+1}\Phi}{\partial x^{p+1}}(0,0)R_{p+1}(\xi) + \frac{1}{2^{p+1}(p+1)!}\frac{\partial^{p+1}\Phi}{\partial y^{p+1}}(0,0)R_{p+1}(\eta) \\ &= \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta) \end{aligned} \tag{2.53}$$

At the incoming boundaries, Lemma 5 implies

$$Q^-_{p+1}(\xi,\eta) = \begin{cases} \frac{1}{2^{p+1}(p+1)!}\frac{\partial^{p+1}\Phi}{\partial x^{p+1}}(0,0)R_{p+1}(\xi) & \text{on} \quad \partial\kappa^Y_- \\ \frac{1}{2^{p+1}(p+1)!}\frac{\partial^{p+1}\Phi}{\partial y^{p+1}}(0,0)R_{p+1}(\eta) & \text{on} \quad \partial\kappa^X_- \end{cases} \tag{2.54}$$

Injecting Eqs. 2.53 and 2.54 in the term of order $(p+1)$ of Eq. 2.50 leads to

$$\begin{aligned} &\left(-\int_\kappa \tilde{Q}_p\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi_h dV + \int_{\partial\kappa_+}\left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right)\tilde{Q}_p\psi_h ds\right) - \int_\kappa \check{Q}_{p+1}\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi_h dV \\ &\qquad + \int_{\partial\kappa_+}(\vec{n}\cdot\vec{\Omega})\check{Q}_{p+1}\psi_h ds + \int_{\partial\kappa_-}(\vec{n}\cdot\vec{\Omega})Q^-_{p+1}\psi_h ds = 0 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Besides, the $\check{Q}_{p+1}$ term on the cell κ can be detailed as

$$\int_\kappa \check{Q}_{p+1}\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\psi_h dV = \int_\kappa (\beta_\xi R_{p+1}(\xi)+\beta_\eta R_{p+1}(\eta))\left(\Omega_x\frac{\partial\psi_h}{\partial\xi}+\Omega_y\frac{\partial\psi_h}{\partial\eta}\right)dV \tag{2.56}$$

$$\begin{aligned} &= \beta_\xi\Omega_x\int_\kappa\frac{\partial\psi_h}{\partial\xi}(\xi,\eta)R_{p+1}(\xi)d\xi d\eta + \beta_\xi\Omega_y\int_\kappa\frac{\partial\psi_h}{\partial\eta}(\xi,\eta)R_{p+1}(\xi)d\xi d\eta \\ &+ \beta_\eta\Omega_x\int_\kappa\frac{\partial\psi_h}{\partial\xi}(\xi,\eta)R_{p+1}(\eta)d\xi d\eta + \beta_\eta\Omega_y\int_\kappa\frac{\partial\psi_h}{\partial\eta}(\xi,\eta)R_{p+1}(\eta)d\xi d\eta \end{aligned} \tag{2.57}$$

As $\frac{\partial\psi_h}{\partial\xi}$ (resp. $\frac{\partial\psi_h}{\partial\eta}$) is a polynomial of degree $(p-1)$ according to the ξ (resp. η) variable, Proposition 1 implies

$$\int\frac{\partial\psi_h}{\partial\xi}R_{p+1}(\xi)d\xi = 0 \quad (\text{resp.} \quad \int\frac{\partial\psi_h}{\partial\eta}R_{p+1}(\eta)d\eta = 0) \tag{2.58}$$

Besides

$$\Omega_x \int_\kappa \frac{\partial \psi_h}{\partial \eta} R_{p+1}(\xi) d\xi d\eta = \Omega_x \left(\int_{\partial \kappa_+^X} \psi_h R_{p+1}(\xi) d\xi - \int_{\partial \kappa_-^X} \psi_h R_{p+1}(\xi) d\xi \right) \tag{2.59}$$

$$\Omega_y \int_\kappa \frac{\partial \psi_h}{\partial \xi} R_{p+1}(\eta) d\xi d\eta = \Omega_y \left(\int_{\partial \kappa_+^Y} \psi_h R_{p+1}(\eta) d\eta - \int_{\partial \kappa_-^Y} \psi_h R_{p+1}(\eta) d\eta \right) \tag{2.60}$$

Combining Eqs. 2.58, 2.59 and 2.60 leads to

$$- \int_\kappa \check{Q}_{p+1} \vec{\Omega}.\vec{\nabla} \psi_h dV + \int_{\partial \kappa_+} (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) \check{Q}_{p+1} \psi_h ds + \int_{\partial \kappa_-} (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) Q_{p+1}^- \psi_h^+ ds = 0 \tag{2.61}$$

Thus, Eq. 2.55 simplifies into

$$- \int_\kappa \tilde{Q}_p \vec{\Omega}.\vec{\nabla} \psi_h dV + \int_{\partial \kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega} \right) \tilde{Q}_p \psi_h ds = 0 \tag{2.62}$$

Applying Lemma 4 on Eq. 2.62 implies $\tilde{Q}_p = 0$.
Finally, Eq. 2.52 leads to $Q_{p+1}(\xi, \eta) = \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta)$.

Let us prove by induction that $\forall \psi_h \in V_h^{2p-k}$

$$\int_\kappa Q_k \psi_h = 0 \quad \forall k \in [\![p+1, 2p-1]\!] \tag{2.63}$$

At the first step, $Q_{p+1}(\xi, \eta) = \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta)$. Applying Lemma 5 gives Eq. 2.63.
Let us suppose that $\int_\kappa Q_{k-1} \psi_h = 0 \quad \forall \psi_h \in V_h^{2p+1-k}$.

By hypothesis on the inflow cells and Lemma 5

$$\int_{\partial \kappa_-} \left(\vec{n} \cdot \vec{\Omega} \right) Q_k^- \psi_h d\sigma = 0 \quad \forall \psi_h \in V_{2p-k} \quad k \in [\![p+1, 2p-1]\!]$$

The terms of order k of Eq. 2.50 become $\forall \psi_h \in V_h^{2p+1-k}$

$$- \int_\kappa Q_k \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_h dV + \int_{\partial \kappa_+} \left(\vec{n}.\vec{\Omega} \right) Q_k \psi_h ds = 0 \tag{2.64}$$

As $(R_i \otimes R_j)$ is a basis of V_h^{2p+1-k}, $\exists\, d_i^j$ such that

$$\psi_h = \sum_{j=0}^{2p+1-k} \sum_{i=0}^{j} d_i^j R_i(\xi) R_{2p+1-k-j}(\eta) + \sum_{i=1}^{p} d_i^{2p+2-k} R_i(\xi) R_{2p+2-k-i}(\eta) \tag{2.65}$$

Recalling that $\forall k > 0$, $R_k = 0$ at the outflow boundaries, Eq. 2.64 leads to

$$- \int_\kappa Q_k \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_h dV = 0 \quad \forall \psi_h \in V_h^{2p+1-k} \setminus V_h^0 \tag{2.66}$$

which implies

$$-\int_{\kappa} Q_k \psi_h dV = 0 \quad \forall \psi_h \in V_h^{2p-k} \tag{2.67}$$

which guarantees Eq. 2.63 $\forall \psi_h \in V_h^{2p-k}$.

Applying Eq. 2.64 with $\psi_h = 1$ leads to

$$\int_{\partial\kappa_+} (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) Q_k ds = 0 \quad \forall k \leq 2p \tag{2.68}$$

which concludes the proof.

2.4.3.2 Estimator computation

The result given by Theorem 9 is at the basis of the error estimator we propose in this paper. The Taylor expansion of the error given by Eq. 2.48 is truncated in order to retain only the leading order

$$E(\xi,\eta) = \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k Q_k(\xi,\eta) \approx h^{p+1} Q_{p+1}(\xi,\eta) = \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta) \tag{2.69}$$

The norm of the estimator on a cell κ is then given by

$$\|E\|_{L^2(\kappa)} = \sqrt{\beta_\xi^2 + \beta_\eta^2}\, \|R_{p+1}\|_{L^2(\kappa)} \tag{2.70}$$

By injecting Eq. 2.69 in the orthogonality relation (Eq. 2.33), a system satisfied by the coefficients β_ξ and β_η on a given cell is obtained. For a domain meshed with parallelograms, this system is even decoupled and the two following equations are satisfied

$$\begin{cases} \left(4\Omega_x + 2\Sigma_t \|R_{p+1}\|^2\right)\beta_\xi = \int_\kappa \left(S - \vec{\Omega} J^{-1} \vec{\nabla}\phi_h - \Sigma_t \phi_h\right) R_{p+1}(\xi) d\xi d\eta \\ \left(4\Omega_y + 2\Sigma_t \|R_{p+1}\|^2\right)\beta_\eta = \int_\kappa \left(S - \vec{\Omega} J^{-1} \vec{\nabla}\phi_h - \Sigma_t \phi_h\right) R_{p+1}(\eta) d\xi d\eta \end{cases} \tag{2.71}$$

where J denotes the jacobian matrix from cell κ to $\hat{\kappa}$.

Thereby, the estimator is easy and fast to compute which is the first requirement for a useable estimator. The second one, its efficiency, is discussed in the following section.

2.4.3.3 Estimator efficiency

Establishing Theorem 9 requires the flux and source term to belong to $\mathcal{C}^\infty$. Pitkäranta proves (66) that the solution only belongs to $H^{\frac{3}{2}-\epsilon}$ with $\epsilon > 0$ and even $H^{\frac{1}{2}-\epsilon}$ if void regions are present within the domain. This lack of regularity can be due to the propagation of the interface between two different media across the characteristic lines (25). To highlight this phenomenon and test our estimator in this case, we consider the simplified test presented in Figure 2.17.

The medium is non-scattering with a constant total cross-section and no sources are imposed in $\mathcal{D}$. A given constant flux is applied at the inflow boundaries. In this way, a pure transport problem has to be solved. The solution along a direction $\vec{\Omega}$ is a decreasing exponential that only depends on the distance between a point and the boundary along $\vec{\Omega}$. It belongs to $\mathcal{C}^\infty$ except across the characteristic line where the first derivative is discontinuous. As a S_2 quadrature is used, the characteristic lines correspond to the diagonals of the domain. The mesh is decomposed uniformly into 40×40 cells. The polynomial basis order is set uniformly equal to 1.

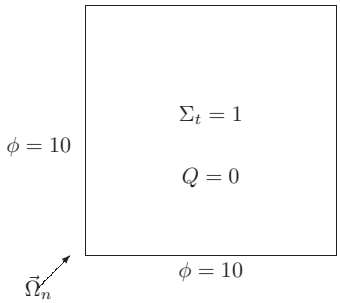


Figure 2.17: Simplified test configuration

As the analytical solution of Eq. 2.27 is generally not known, a converged flux Φ on a reference mesh (with fine cells and high polynomial order) is used as the reference solution. The error in a given norm (for example L^2) is defined as the difference between the calculated flux ϕ_h and this reference solution Φ, *i.e*

$$\|e\|_{L^2(\mathcal{D})} = \|\Phi - \phi_h\|_{L^2(\mathcal{D})} \tag{2.72}$$

To determine the quality of the estimator we define the effectivity index (eff) as the ratio between the error and the estimator in the L^2-norm :

$$\text{eff} = \frac{\|E\|_{L^2(\mathcal{D})}}{\|e\|_{L^2(\mathcal{D})}} \tag{2.73}$$

Ideally, the ratio should tend to 1 as h is reduced or p increased. Local quantities $\|e\|_{L^2(\kappa)}$ and eff_κ, naturally derived from Eqs. 2.72 and 2.73 are used in the following to represent the error and the effectivity in each cell κ of the domain $\mathcal{D}$.

Figure 2.18 (right) shows the local effectivity index in the whole domain. In regions where the flux belongs to $\mathcal{C}^\infty$, the effectivity index is close to 1 ($|\text{eff} - 1| \leq 10^{-3}$ in these regions). On the opposite, the error is largely underestimated near the characteristic line. Actually, the entire proof relies on an important regularity hypothesis which is not satisfied in this case. The first derivative of the solution is discontinuous due to the geometry and particularly to the propagation of the corner of the domain along the characteristic lines.

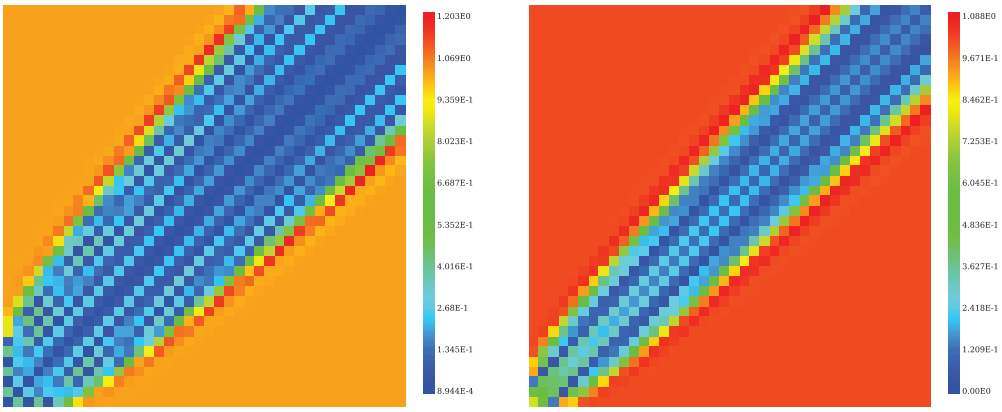


Figure 2.18: Effectivity index in the conforming case for the MMS0 (left) and MMS1 (right)

The worst case scenario, with a discontinuous solution, can also be studied (Figure 2.18 (left)). To generate such a solution, the benchmark presented Figure 2.17 is modified in order to use different incoming fluxes on the left and the bottom boundaries (10 and 1 respectively). As in the previous case, the effectivity index is close to 1 where the flux is regular. The region impacted by the lack of regularity is larger than in the previous case but the overall behaviour is the same.

In real cases, such irregular regions are localized (interfaces between media, along the characteristics) and their effects are attenuated thanks to scattering in such a way that, even if the hypothesis of regularity is not fulfilled everywhere, the use of this estimator can still be considered to drive an AMR process.

2.4.4 Estimator limitations for non-conforming meshes or different orders

As recalled in the introduction, the *a posteriori* error estimation is used to lead the refinement process. Even if we begin with a conforming mesh and uniform polynomial basis order, the adaptive algorithm leads to non conforming meshes if $h-$refinement is performed or different polynomial basis orders for the $p-$refinement case. This section studies the properties that the estimator exhibits in these cases.

2.4.4.1 Different polynomial basis orders

In the configuration $C_{p\to p+1}$ given by Figure 2.19 (left), $\psi_h \in V_h^{p+1}$ on κ but we have at the inflow boundaries

$$Q_{p+1}^- = \begin{cases} \beta_\xi R_{p+1}(\xi) & \text{on } \partial\kappa_+^Y \\ \beta_\eta R_{p+1}(\eta) & \text{on } \partial\kappa_+^X \end{cases}$$

The previous theorem holds but we are not able to obtain a tighter estimator because of Q_{p+1}^-.

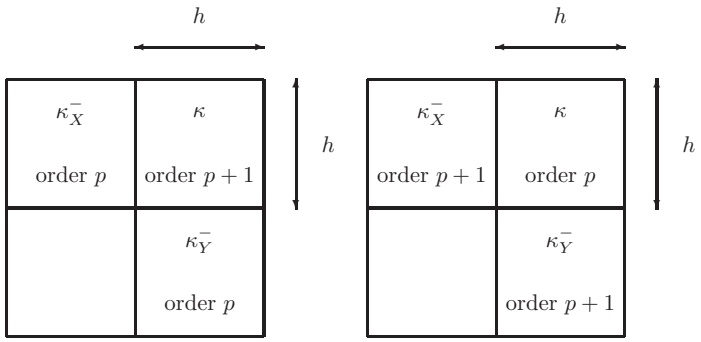


Figure 2.19: Configuration with a local increase of the basis order $C_{p\to p+1}$ (left) and decrease $C_{p+1\to p}$ (right)

In the configuration $C_{p+1\to p}$ given by Figure 2.19 (right), $Q_{p+1}^- = 0$ on $\partial\kappa_-^X$ and $\partial\kappa_-^Y$ but ψ_h only belongs to V_h^p. The previous theorem holds but obtaining a higher order convergence result is not possible because of Q_{p+1}. Actually, the term of order $(p+1)$ of Eq. 2.50 is

$$-\int_\kappa Q_{p+1}\vec{\Omega}\vec{\nabla}\psi_h dV + \int_{\partial\kappa_+}\left(\vec{n}.\vec{\Omega}\right) Q_{p+1}\psi_h d\sigma = 0$$

but Lemma 4 can not be applied because ψ_h only belongs to V_h^p and not V_h^{p+1}.

These results can be summarized in the following theorem

Theorem 2. *Let us denote p_-^X (resp. p_-^Y) the polynomial basis order on $\partial\kappa_-^X$ (resp. $\partial\kappa_-^Y$) and p the one in cell κ. Then, the error estimator in cell κ is given by*

$$e_h(\xi,\eta) = \beta_\xi R_{\min(p_-^Y,p)+1}(\xi) + \beta_\eta R_{\min(p_-^X,p)+1}(\eta) \tag{2.74}$$

Let us consider the test case presented in Section 2.4.3.3 where the polynomial order is changed in a given cell (marked with a cross in Figure 2.20 (left)) from 1 to 2.

If Theorem 9 is used, the effectivity index is about 10^{-3} in the cell where the order is equal to 2. Thanks to Theorem 2 the error is "only" underestimated by about a factor 3. The cells located after the modified one, in the direction of $\vec{\Omega}$ are also affected. Actually, the error is decreased thanks to this upstream 2^{nd} order cell but the estimator is unchanged. It explains why the effectivity index becomes slightly lower than 1 downstream the marked cell.

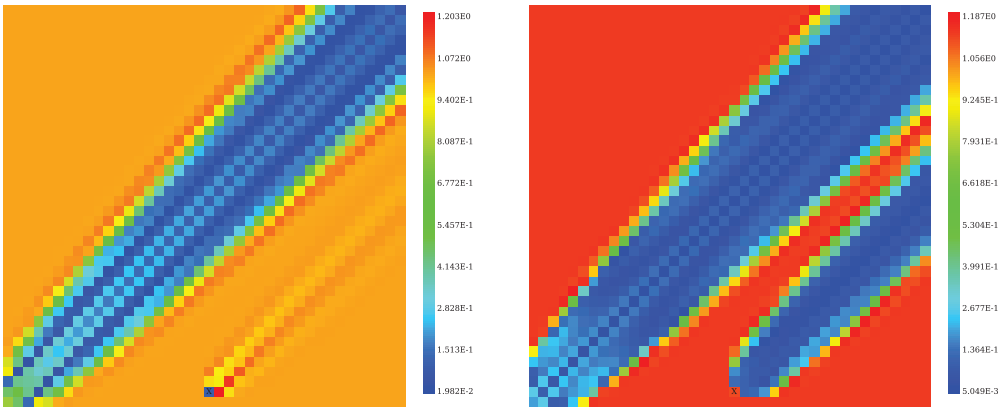


Figure 2.20: Effectivity index in $C_{p\to p+1}$ configuration ($p+1$ in the cross-marked cell) (left) and $C_{p+1\to p}$ (right) applying Theorem 9

On the opposite, if the polynomial order is decreased in one cell (2 everywhere except in the marked cell in Figure 2.20 (right)), the error is largely underestimated in all the cells located after the modified one along the direction $\vec{\Omega}$ as presented in Figure 2.20 (right). To understand this behaviour, the corresponding local $L^2(\kappa)$-error is presented in Figure 2.21 (left). The error in all the cells after the modified one in the direction $\vec{\Omega}$ exhibits the same order of magnitude as the error in the modified cell. The deterioration of the solution in the marked cell is propagated along the characteristic line. As stated by Theorem 9, the estimator is local and does not take into account the modified cell. It explains such an important error in the estimation downstream the cell with a lower polynomial order along the direction $\vec{\Omega}$.

The result given by Theorem 2 makes use of the polynomial order in the previous cells to calculate the Radau polynomial order in the current one. It implies to propagate the Radau order to downstream cells by imposing the order on cell κ by $p_\kappa = \min_{\kappa_i \in \mathcal{A}_\kappa} p_{\kappa_i}$ ($\mathcal{A}_\kappa$ defined in Section 2.4.2). Unfortunately, such a modification impacts all the cells located after the modified one and not only those along the characteristic line (Figure 2.21 (right)). It deteriorates the estimator in the whole area $\mathcal{A}_\kappa$ and is not useable for practical purposes.

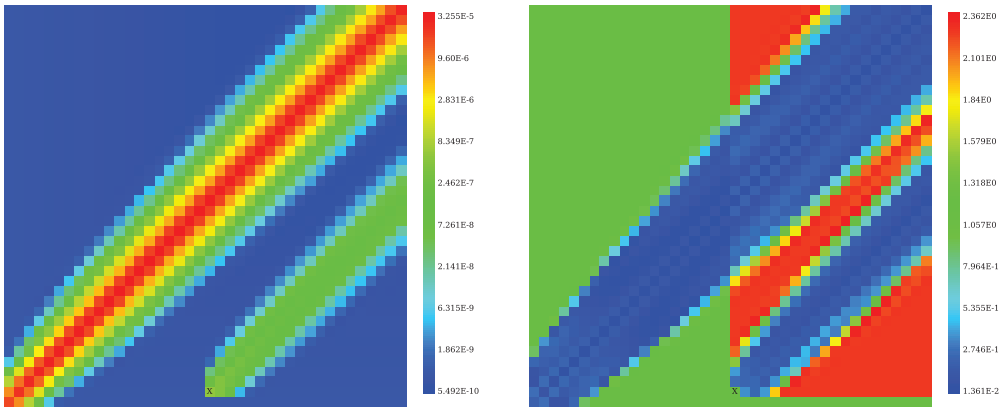


Figure 2.21: Local $L^2(\kappa)$-Error (left) in $C_{p+1\to p}$ configuration (p in the cross-marked cell) and effectivity index in $C_{p\to p+1}$ configuration (right) applying Theorem 2

2.4.4.2 Non-conforming meshes

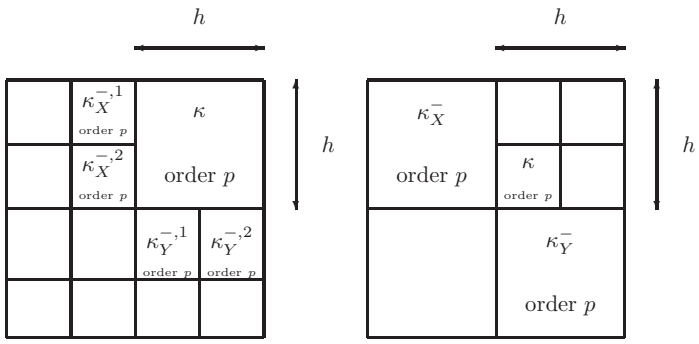


Figure 2.22: Configuration with a local mesh coarsening $C_{\frac{h}{2}\to h}$ (left) and refinement $C_{h\to\frac{h}{2}}$ (right)

In the configuration $C_{\frac{h}{2}\to h}$ given by Figure 2.22 (left), $Q_{p+1}^{-,1}$ and $Q_{p+1}^{-,2}$ are equal to 0. In this way, there exists a polynomial of order $(2p+2)$ that interpolates the boundary error. We can neglect Q_{p+1}^- from Q_{p+1}. The previous demonstration holds and the term of order $(p+1)$ of Eq. 2.50 is $\forall\psi_h \in V_h^p$

$$\int_\kappa Q_{p+1}\left(-\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi_h + \frac{\Sigma_t}{2}\psi_h\right)dV + \int_{\partial\kappa_+}\left(\vec{n}\cdot\vec{\Omega}\right)Q_{p+1}\psi_h d\sigma = 0$$

which leads to $Q_{p+1} = \beta_\xi R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta R_{p+1}(\eta)$

The estimate of Theorem 9 remains valid in this case.

In the configuration $C_{h\to\frac{h}{2}}$ given by Figure 2.22 (right), Q_{p+1}^- is a Radau polynomial of degree $(p+1)$ on the whole edge. On half an edge, it possesses only $(p/2+1)$

roots and is no longer a Radau polynomial (with the variable change from $[-1,1]$ to $[-1,0]$ (or $[0,1]$)). In this way, we can only assert that $Q_k^- = 0 \quad \forall k \in [\![0, p/2+1]\!]$ and then deduce thanks to Lemma 4 that $Q_k = 0 \quad \forall k \in [\![0, p/2+1]\!]$. Thus, the error is dominated by a polynomial of order $p/2+2$.

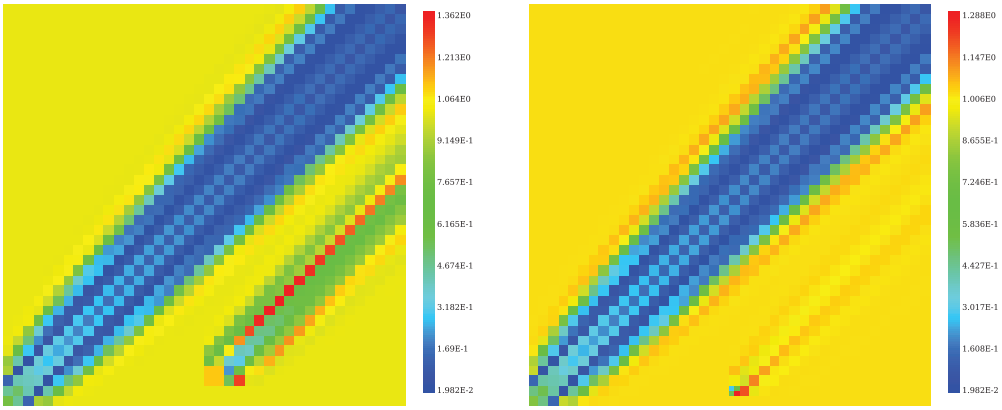


Figure 2.23: Effectivity index in $C_{\frac{h}{2}\to h}$ (left) and $C_{h\to\frac{h}{2}}$ configurations (right)

We proceed with the same tests for $h-$refinement than those done in Section 2.4.4.1 for $p-$enrichment. On Figure 2.23 (left), one cell is coarser than the other ones and, on the opposite, on Figure 2.23 (right), one cell has been subdivised into 4 subcells. As expected, no information is lost when passing from fine to coarse cells. The effectivity index is still close to 1 in the coarse cell of Figure 2.23 (left). In the other case, the effectivity index is no longer equal to 1 in the divided cell but also in the cells located downstream along the direction $\vec{\Omega}$. Note however that this value is not far from 1 and particularly, the deterioration induced by non-conformities is far less important than the one induced by the lack of regularity.

Results obtained for $h-$refinement are similar to the ones presented for $p-$refinement in Section 2.4.4.1. Decreasing (resp. increasing) the polynomial order in one cell is equivalent (in term of the impact on the effectivity index) to coarsening (resp. refining) one cell ; the effectivity index is deteriorated similarly along the characteristic line.

2.4.5 Use for Adaptive Mesh Refinement

The shielding benchmark described in Figure 2.24 (left) was taken from (26). It is a one-group problem with a S_4 angular discretization. A unit source is uniformly distributed in M_1 and the cross-sections are given by $\Sigma_t = 1$ and $\Sigma_s = 0.5$. M_2 is a shielding material with $\Sigma_t = 2$ and $\Sigma_s = 0.025$. Concerning boundaries, reflection

conditions are imposed on the left and bottom boundaries and void on the two other ones. An important flux gradient is located at the interface between the two materials. A representation of the angular reference flux in the direction $\vec{\Omega}_1$ (diagonal direction from bottom left to top right corner) is given in Figure 2.24 (right).

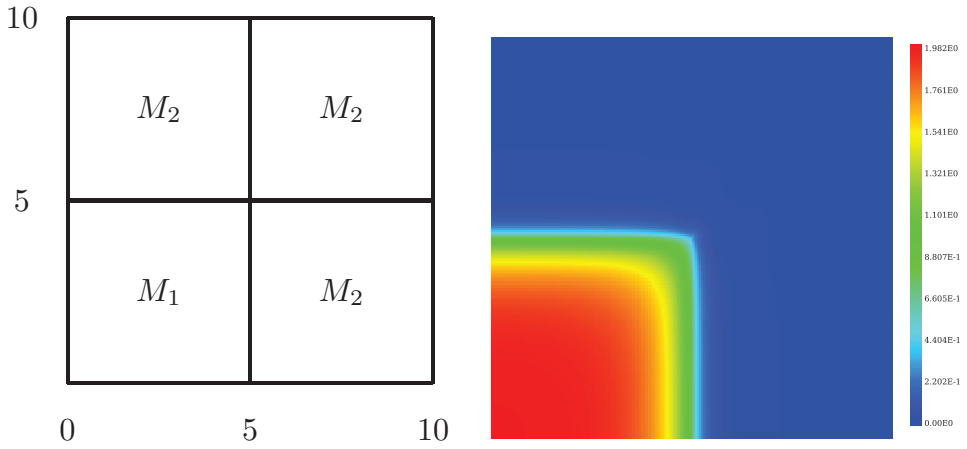


Figure 2.24: Shielding benchmark geometry (left) and Reference angular flux $\phi(\vec{\Omega}_1)$ (right)

To justify the interest of the error estimator, an adaptation algorithm has been implemented. The interested reader is referred to (51) for further details concerning the implementation.

The estimator is expected to locate the material interface and the characteristic lines as discussed in Section 2.4.3.3 because of the flux variation and trigger refinement in these regions. Figure 2.25 shows a mesh obtained after some refinements. As expected, the mesh is particularly refined near the interface and along the characteristic lines.

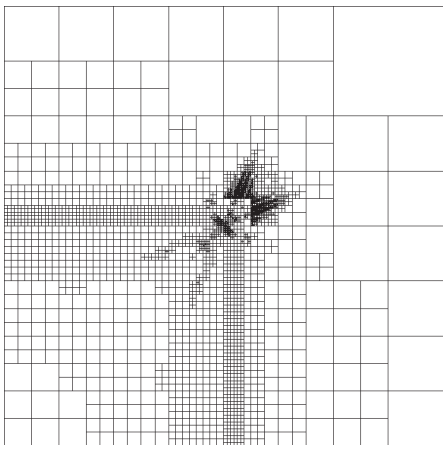


Figure 2.25: Refined mesh obtained for the shielding benchmark (degrees of freedom = 45801)

Theorem 9 gives an order of convergence in $\mathcal{O}(h^{p+1})$ in a conforming mesh. In this way, $p-$refinement seems better (at least asymptotically) than $h-$refinement. We have nevertheless

to moderate this point when the solution is not regular. Figure 2.26 shows the L^2 error as a function of the number of degrees of freedom for different strategies.

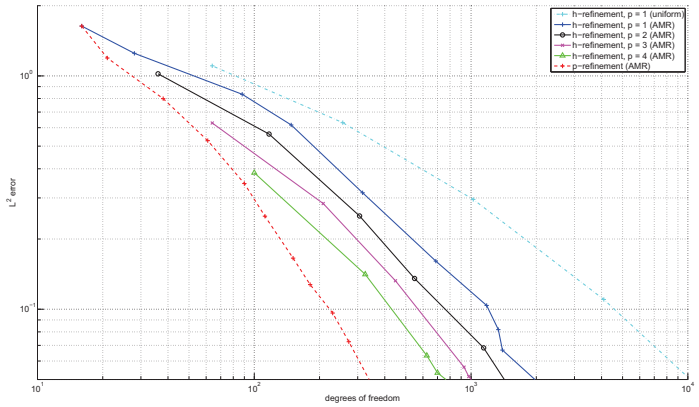


Figure 2.26: Comparison of different refinement strategies

Obviously, an adaptive refinement strategy is better than the uniform one in any case. Then, increasing the polynomial order seems more interesting than splitting cells. In this simplified benchmark, $p-$enrichment reduces the computational cost more significantly than $h-$refinement even if the flux exhibits a first order derivative discontinuity. Similar conclusions are given in (51) for a more realistic benchmark.

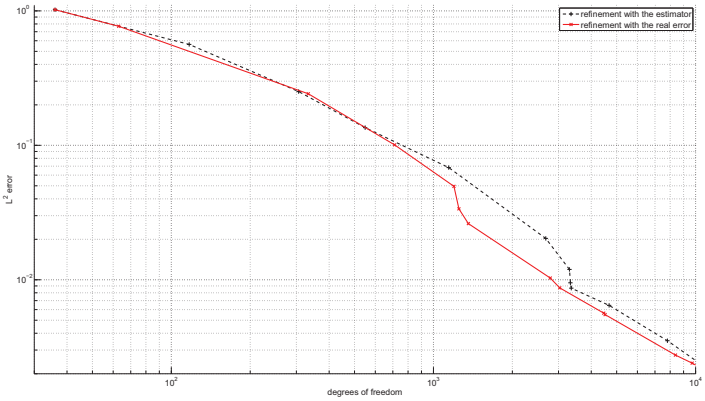


Figure 2.27: Comparison of $h-$refinement with the estimated and real error ($p = 2$)

To estimate the efficiency of our estimator, the same refinement strategy is applied but the error is no longer calculated with the estimator but with the real error as defined by Eq. 2.72. Figure 2.27 compares the convergence for a fixed polynomial order equal to 2. Results are similar except in the range between 1000 and 3000 degrees of freedom where an interesting difference between the two curves can be noted. To explain this,

let us compare the real and estimated error in Figure 2.28. Error and estimator are very close except in the corner between the two media. As the error is underestimated in this part, some cells are not marked for refinement. In particular, the cell where the error is the biggest is not refined which explains the gap between the two curves in Figure 2.27. This is directly related to the limitation of the estimator in region where the flux is not regular.

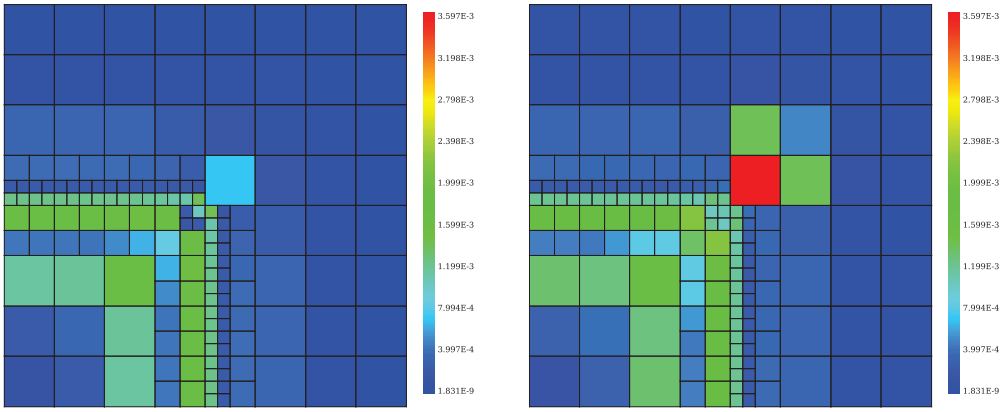


Figure 2.28: Estimated (left) and real (error) error (degrees of freedom = 2871)

2.4.6 Conclusions

An error estimator has been derived for the S_N neutron transport equation discretized by a Discontinuous Galerkin method. It is accurate as long as the flux is regular and the mesh conforming. This work is a first step for the implementation of an adaptive process in a transport code for production calculations in the framework of fast reactor analysis.

The impact of non-conforming meshes and a variable polynomial basis order has been studied theoretically and illustrated with numerical tests. Despite some limitations, the estimator allows to build an efficient adaptation process. Further research concerning the error estimation for non conforming meshes and, more importantly for non regular solutions, is in progress.

3

Modèle 2 : Système hyberbolique couplé

On a pour l'instant traité des modèles simplifiés afin de comprendre l'intérêt des méthodes de raffinement pour l'équation de transport et d'analyser certaines propriétés. La discrétisation énergétique était réalisée avec un seul groupe ce qui n'est évidemment pas le cas dans les calculs de cœur. En introduisant la dimension énergétique, on s'intéresse au problème modèle 2 :

Problème modèle 2 : Système d'équations de transport couplées

$$\begin{cases} \widetilde{\boldsymbol{\Phi}} = \widetilde{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{C}\widetilde{\boldsymbol{\Phi}} + \boldsymbol{Q}\right) & \text{sur } \mathcal{D} \\ \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Phi}^{BC} & \text{sur } \partial\mathcal{D}^{-} \end{cases} \tag{3.1}$$

Remarque 3. *Les notations "tilde" sont utilisées afin d'avoir des notations cohérentes avec Section 3.5.*

Remarque 4. *Notons bien que l'on s'est affranchi de la variable angulaire afin de définir le problème modèle 2. Ainsi, les estimateurs et l'erreur sont des quantités indépendantes de l'angle définies de la même manière que le flux scalaire c'est-à-dire :*

$$\left(\boldsymbol{E}\right)_g = \sum_n w_n E_n^g \tag{3.2}$$

$$\left(\boldsymbol{e}\right)_g = \sum_n w_n e_n^g \tag{3.3}$$

Les estimateurs d'erreur ont été dérivés sur Eq. 1.21 (modèle 1) et ne prennent donc pas en compte le couplage entre les groupes dû à la matrice noté $\boldsymbol{C}$. Ils représentent la distance entre un flux exact $\widehat{\boldsymbol{\Phi}}$ et un approché $\boldsymbol{\Phi}$

$$\|\boldsymbol{E}\| = \left\|\widehat{\boldsymbol{\Phi}} - \boldsymbol{\Phi}\right\| \tag{3.4}$$

où $\widehat{\boldsymbol{\Phi}}$ et $\boldsymbol{\Phi}$ satisfont

$$\widehat{\boldsymbol{\Phi}} = \widetilde{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{Q}\right) \tag{3.5}$$

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{Q}\right) \tag{3.6}$$

avec $\boldsymbol{A}$ opérateur discret correspondant à la discrétisation de l'opérateur continu $\widetilde{\boldsymbol{A}}$ défini par Eq. 1.26.

L'estimateur n'est donc plus directement relié à l'erreur mais on a :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e} &= \widetilde{\widehat{\boldsymbol{\Phi}}} - \boldsymbol{\Phi} \\ &= \widetilde{\widehat{\boldsymbol{\Phi}}} - \widehat{\boldsymbol{\Phi}} + \widehat{\boldsymbol{\Phi}} - \boldsymbol{\Phi} \\ &= \widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{e} + \boldsymbol{E} \qquad (3.7) \\ \boldsymbol{E} &= \left(\boldsymbol{I} - \widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{C}\right)\boldsymbol{e} \qquad (3.8) \end{aligned}$$

La matrice $\boldsymbol{C}$ contient les différentes sections efficaces et $\widetilde{\boldsymbol{A}}$ la section efficace totale. Ainsi, la somme des sections efficaces étant inférieure à la section totale, on assure que le rayon spectral de $\widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{C}$ est inférieur à 1. Alors, Eq. 3.7 implique :

$$\left(1 - \rho(\widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{C})\right)\|\boldsymbol{e}\| \leq \|\boldsymbol{E}\| \tag{3.9}$$

$$\|\boldsymbol{e}\| \leq \frac{1}{1 - \rho(\widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{C})}\|\boldsymbol{E}\| \tag{3.10}$$

Si l'on raffine de sorte à faire décroitre le maximum de l'estimateur sur tous les groupes grâce à Eq. 3.11, on assure la décroissance de l'erreur et donc la convergence du système. On peut donc utiliser toutes les méthodes vues précédemment afin de conduire le raffinement sur un cas réaliste. Cette comparaison est faite Section 3.1 sur le cas ZONA2B présenté Figure 1.4 avec 33 groupes énergétiques et 12 directions spatiales (quadrature S_4). On verra ensuite que l'allure de la solution est différente suivant l'énergie et que l'on peut donc avoir intérêt à proposer des maillages spatiaux différents suivant les groupes énergétiques. On modifiera alors les estimateurs présentés Chapitre 2 afin de prendre en compte le couplage entre les groupes et de proposer une discrétisation spatiale différente suivant l'énergie tout en assurant la convergence.

Remarque 5. *Toute l'étude théorique est faite pour la résolution d'un problème à source (problème modèle 2). Par contre, les résultats sur ZONA2B sont extraits du papier de la conférence M&C présenté en Annexe 3 et concernent donc un problème aux valeurs propres. Même si l'on ne possède pas de résultats théoriques sur ce problème, on a effectué le raffinement en prenant le maximum sur les groupes sans observer de problème additionnel.*

3.1 Utilisation d'un seul maillage

Dans un premier temps, on utilise le même maillage pour tous les groupes énergétiques. Le raffinement d'une cellule $K^\star$ est effectué si :

$$\max_{g'} E^{g'}(K^\star) > \alpha \max_{g'} \max_{K} E^{g'}(K) \tag{3.11}$$

Eq. 3.11 est l'équivalent d'Eq. 1.50 lorsque la discrétisation énergétique comprend plusieurs groupes. Elle nous donne un moyen de mener le raffinement lorsque le découpage énergétique comprend plusieurs groupes. On peut donc tester les différentes stratégies présentées Section 2.2 sur un cas réaliste (ZONA2B) et comparer les résultats aux différents cas simplifiés étudiés.

Figure 3.1 présente la convergence en norme L^2 en fonction des degrés de liberté suivant la stratégie utilisée. Pour les stratégies adaptatives, E^R est utilisé pour raffiner et la constante α d'Eq. 3.11 est fixée à 0.5.

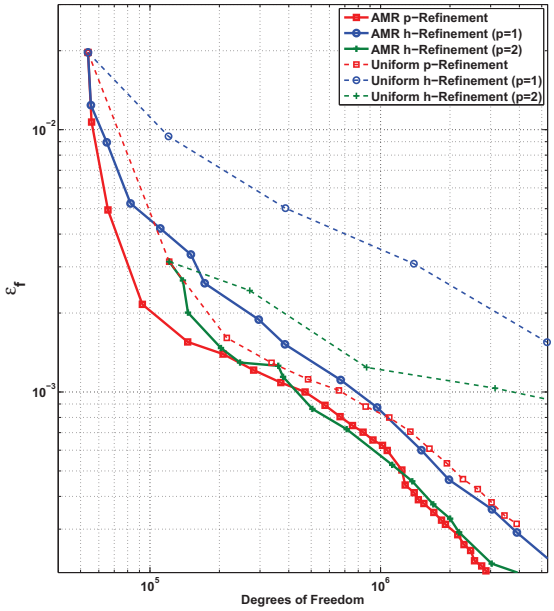


Figure 3.1: Erreur sur le flux en norme L^2 en fonction de dof pour les stratégies adaptatives et uniformes sur le cas ZONA2B

Remarque 6. *Nous avons vu Chapitre 2 que l'estimateur E^{FV} était plus adapté pour mener le raffinement. L'utilisation de E^R ici est due à la chronologie de la thèse. Nous avons tout d'abord dérivé l'estimateur E^R pour faire du $h-$ et du $p-$raffinement puis l'estimateur E^{FV} est venu plus tard dans une logique de méthodes plus précises dans les cas de faible régularité puis pour la mise en place de méthodes hp.*

On note l'intérêt des stratégies adaptatives en comparaison au raffinement uniforme ce qui montre que l'estimateur permet de bien localiser les zones où l'erreur est importante. Pour les différentes stratégies adaptatives, on note comme dans les cas MMS, l'intérêt d'augmenter l'ordre au moins jusqu'à deux avant de faire du $h-$raffinement et l'avantage du $p-$raffinement pour de faibles valeurs de p.

On teste les différentes stratégies hp sur ce cas. On représente Figure 3.2 l'erreur pour différentes stratégies hp. Les stratégies à 2 estimateurs présentées Table 2.1

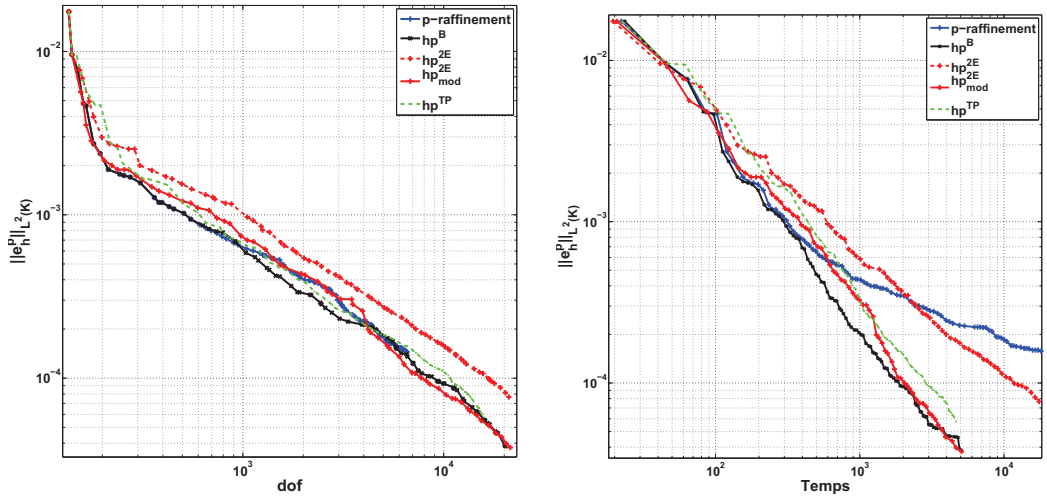


Figure 3.2: Erreur sur le flux en norme L^2 en fonction de dof (gauche) et du temps (droite) pour les stratégies hp sur le cas ZONA2B

and 2.3, la méthode basique (Table 2.2) et la méthode type-parameter décrite Section 1.3.3 avec $\gamma = 0.6$. Si l'on voit clairement l'intérêt d'augmenter l'ordre pour de faibles valeurs de p rendant la stratégie hp^{2E} peu efficace, les autres critères permettant de choisir entre h et p ont des performances proches. Finalement, dans les cas réalistes, une stratégie basique paraît suffisante afin de choisir entre les deux types de raffinement.

On peut aussi utiliser ce cas réaliste pour mesurer les améliorations induites par les stratégies hp sur le temps de calcul (Figure 3.2 (droite)). Les conclusions sont assez similaires à celles faites en fonction de dof. On peut seulement noter que le $p-$raffinement devient encore plus désavantageux au regard du temps lorsque p devient trop grand. En effet, une augmentation de l'ordre entraîne une augmentation de la taille des matrices à inverser sur chaque cellule alors qu'un raffinement en espace ne fait qu'augmenter le nombre de systèmes à inverser. Ainsi, la dépendance entre le temps et les dof est théoriquement linéaire pour le $h-$raffinement contrairement au $p-$raffinement.

Les conclusions sont identiques lorsque l'on considère un cas 3D (Figure 3.3). Le surcoût dû au grandes valeurs de p est encore plus important particulièrement au niveau du temps de calcul. Un phénomène qui peut paraître surprenant est que le temps de calcul du $p-$raffinement est équivalent avec adaptation ou avec un raffinement uniforme. Deux phénomènes expliquent cette observation. Le maillage initial comporte peu de mailles, du coup de nombreuses cellules sont raffinées ce qui peut conduire à un comportement proche d'un raffinement uniforme. Cependant, en terme de degrés

de liberté, le raffinement adaptatif était tout de même meilleur, il existe donc une autre explication. Un aspect qui engendre un surcoût important pour les méthodes adaptatives sont les projections entre les cellules. En effet, à mesure que l'écart entre les ordres des cellules voisines augmente, le coût de projection de la trace augmente. C'est une limite supplémentaire du $p-$raffinement : ces performances sont fortement dépendantes du maillage et un maillage initial trop grossier induit des pertes de performances en conduisant à des ordres très élevés dans certains cellules. Pour obtenir le maillage présenté Figure 1.4, on a créé une routine qui transforme le maillage conforme traditionnellement utilisé pour décrire les cœurs (voir Section 3.5) en un maillage non-conforme. Le maillage ainsi obtenu est le plus grossier possible afin de décrire encore la géométrie. Il est intéressant lorsqu'il est utilisé avec des méthodes de raffinement en espace, par contre, le raffinement en ordre uniquement peut poser des problèmes.

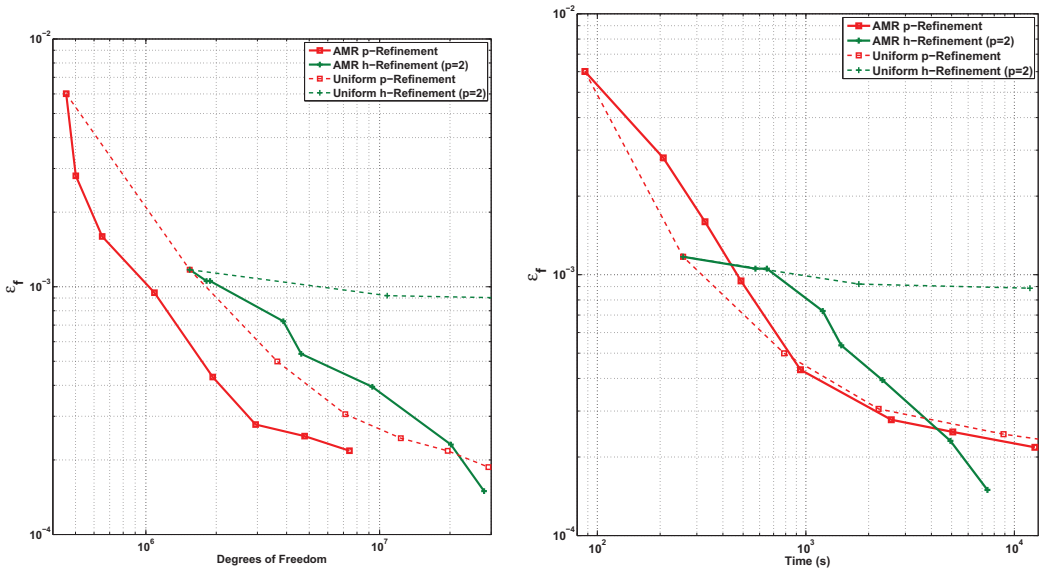


Figure 3.3: Erreur sur le flux en norme L^2 en fonction de dof (gauche) et du temps (droite) pour les stratégies hp sur le cas ZONA2B en 3D

3.2 Intérêt de maillages spatiaux dépendant de l'énergie

Figure 3.4 représente le flux dans 2 zones énergétiques différentes pour le cas ZONA2B. On remarque que l'allure du flux est totalement différente et qu'il n'y a donc *a priori* aucune raison d'utiliser le même maillage spatial. On peut donc penser dans ce cas à raffiner une cellule $K^\star$ du groupe g si :

$$E^g(K^\star) > \alpha \max_{g'} \max_{K} E^{g'}(K) \tag{3.12}$$

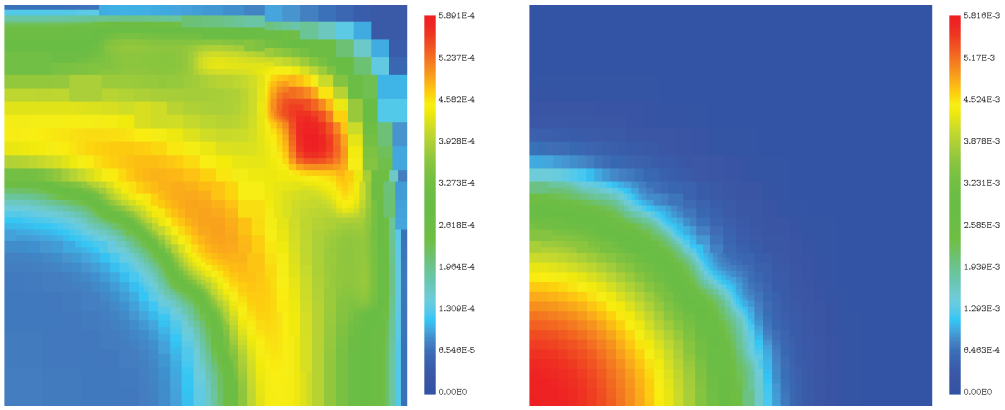


Figure 3.4: Flux dans une zone thermique (gauche) et rapide (droite) pour le cas ZONA2B

On présente Figure 3.5 la convergence sur le flux et la valeur propre k_{eff} si l'on raffine en utilisant Eq. 3.12. Pour le flux, on ne remarque pas d'amélioration de la convergence et c'est encore pire sur le k_{eff} où la convergence est dégradée. Cela est dû au fait que l'on ne prend plus en compte le couplage entre les groupes présenté Eq. 3.8. Si l'approche avec un seul maillage permettait de garantir la convergence grâce au maximum sur les groupes, ce n'est plus le cas maintenant. On ne peut donc pas utiliser directement nos estimateurs pour mener un raffinement dépendant de l'énergie.

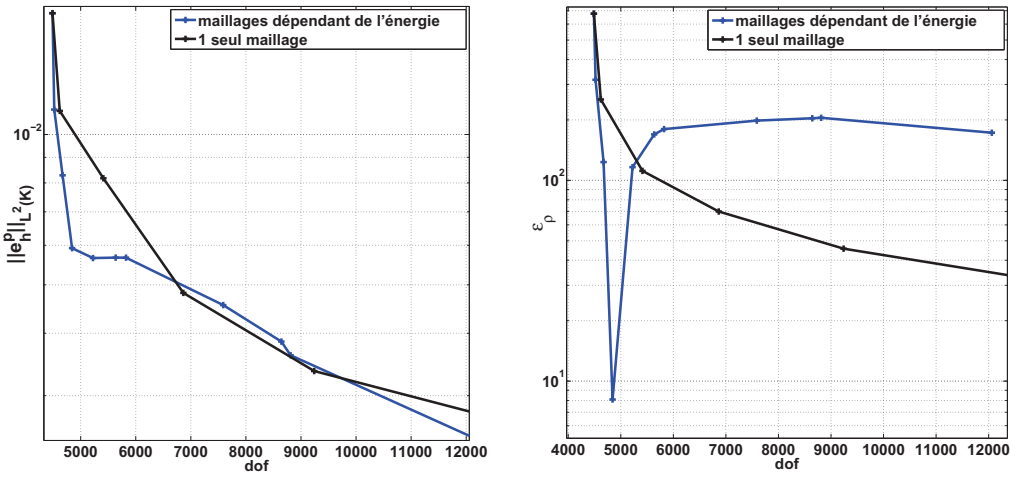


Figure 3.5: Erreur sur le flux en norme L^2 (gauche) et en réactivité (en pcm à droite) en fonction de *dof* sur le cas ZONA2B avec des maillages différents selon l'énergie

3.3 Estimateur de Radau sur le système hyperbolique

La démonstration de l'estimateur de Radau pour un système hyperbolique est en tout point similaire à celle faite Section 2.4. Il faut cependant être vigilant lors du

traitement de la variable angulaire. En effet, la forme du polynôme de Radau dépend de l'angle (en modifiant le signe entre L_{p+1} et L_p). Ainsi la somme sur les directions des polynômes de Radau n'est plus un polynôme de Radau. On se retrouve donc obligé d'exprimer notre estimateur sur les deux coefficients de Legendre L_{p+1} et L_p. Si l'estimateur dans le groupe g et la direction n s'écrit :

$$E_n^g(\xi,\eta) = \beta_\xi^{n,g} R_{p+1}(\xi) + \beta_\eta^{n,g} R_{p+1}(\eta) \tag{3.13}$$

alors l'estimateur scalaire $\boldsymbol{E^g} = (E^g)_g$ satisfait

$$E^g(\xi,\eta) = \beta_{\xi_1}^g L_{p+1}(\xi) - \beta_{\xi_2}^g L_p(\xi) + \beta_{\eta_1}^g L_{p+1}(\eta) - \beta_{\eta_2}^g L_p(\eta) \tag{3.14}$$

avec

$$\beta_{\xi_1}^g = \sum_n w_n \beta_\xi^{n,g} \tag{3.15}$$

$$\beta_{\xi_2}^g = \sum_n w_n \mathrm{sgn}(\Omega_{n_\xi}) \beta_\xi^{n,g} \tag{3.16}$$

et des définitions analogues pour les β_η^g. En notation matricielle le Theorème 9 s'écrit :

Theorème 5. *Soit* $\boldsymbol{\Phi}$ *solution de Eq. 3.1 et* $\boldsymbol{\Phi_h^p}$ *solution du problème discret. Alors l'erreur locale satisfait :*

$$\boldsymbol{E_h^p}(\xi,\eta) = \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k \boldsymbol{Q_k}(\xi,\eta) \tag{3.17}$$

avec

$$\boldsymbol{Q_{p+1}}(\xi,\eta) = \boldsymbol{\beta_{\xi_1}} L_{p+1}(\xi) - \boldsymbol{\beta_{\xi_2}} L_p(\xi) + \boldsymbol{\beta_{\eta_1}} L_{p+1}(\eta) - \boldsymbol{\beta_{\eta_2}} L_p(\eta) \tag{3.18}$$

où les β_{ξ_i} *et* β_{η_i} $(i = 1, 2)$ *sont des coefficients constants donnés par Eq. 3.25.*

De manière similaire au problème modèle 1, on va conserver uniquement le terme dominant et utiliser comme estimateur d'erreur $\boldsymbol{E_h^p}$

$$\boldsymbol{E_h^p} = \boldsymbol{\beta_{\xi_1}} L_{p+1}(\xi) - \boldsymbol{\beta_{\xi_2}} L_p(\xi) + \boldsymbol{\beta_{\eta_1}} L_{p+1}(\eta) - \boldsymbol{\beta_{\eta_2}} L_p(\eta) \tag{3.19}$$

Pour obtenir les coefficients β, le processus est similaire à celui présenté Section 2.4. L'équation vérifiée par l'estimateur E_n^g pour le groupe g et dans la direction Ω_n est maintenant :

$$\iint_{\hat{K}} \left(E_n^g - A_n^g \boldsymbol{C} \boldsymbol{E^g}\right) R_{p+1}^n(\xi) d\xi d\eta = \underbrace{\iint_{\hat{K}} \left(A_n^g Q_n^g - \phi_n^g + A_n^g \boldsymbol{C} \boldsymbol{\phi^g}\right) R_{p+1}^n(\xi) d\xi d\eta}_{I_\xi^n} \tag{3.20}$$

$$\iint_{\hat{K}} \left(E_n^g - A_n^g \boldsymbol{C} \boldsymbol{E^g}\right) R_{p+1}^n(\eta) d\xi d\eta = \iint_{\hat{K}} \left(A_n^g Q_n^g - \phi_n^g + A_n^g \boldsymbol{C} \boldsymbol{\phi^g}\right) R_{p+1}^n(\eta) d\xi d\eta \tag{3.21}$$

On injecte alors la forme de l'estimateur dans ces équations pour obtenir :

$$\beta_{\xi}^{n,g}+\frac{2\left|J\right|\boldsymbol{C}}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\left(\boldsymbol{\beta_{\xi_1}}\left\|L_{p+1}\right\|^2-\mathrm{sgn}(\Omega_{n_x})\boldsymbol{\beta_{\xi_2}}\left\|L_p\right\|^2\right)=I_{\xi}^{n} \quad (3.22)$$

et une équation similaire en η. On présente ici comment obtenir l'estimateur dans la direction ξ, le processus est le même pour η. Pour obtenir les coefficients $\boldsymbol{\beta_{\xi_1}}$ et $\boldsymbol{\beta_{\xi_2}}$, on somme Eq. 3.22 pour tous les n et on effectue la somme pondérée par le signe de Ω_{n_ξ}. On obtient alors un système d'équations couplées :

$$\begin{aligned}\beta_{\xi_1}^{g} = -2\left|J\right|\boldsymbol{C^g}\Bigg(&\left\|L_{p+1}\right\|^2\sum_n\frac{w_n}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\boldsymbol{\beta_{\xi_1}^g}\\&+\left\|L_p\right\|^2\sum_n\frac{w_n\mathrm{sgn}(\Omega_{n_x})}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\boldsymbol{\beta_{\xi_2}^g}\Bigg)\\&+\sum_n w_n I_{\xi}^{n} \quad (3.23)\\ \beta_{\xi_2}^{g} = -2\left|J\right|\boldsymbol{C^g}\Bigg(&\left\|L_{p+1}\right\|^2\sum_n\frac{w_n}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\boldsymbol{\beta_{\xi_2}^g}\\&+\left\|L_p\right\|^2\sum_n\frac{w_n\mathrm{sgn}(\Omega_{n_x})}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\boldsymbol{\beta_{\xi_1}^g}\Bigg)\\&+\sum_n w_n\mathrm{sgn}(\Omega_{n_x})I_{\xi}^{n} \quad (3.24)\end{aligned}$$

Les coefficients vérifient $\boldsymbol{\beta_{\xi_1}}$ et $\boldsymbol{\beta_{\xi_2}}$ satisfont donc le système :

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{I_G}+2\left|J\right|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\left\|L_{p+1}\right\|^2 & 2\left|J\right|\boldsymbol{D_s}^{-1}\boldsymbol{C}\left\|L_p\right\|^2\\ 2\left|J\right|\boldsymbol{D_s}^{-1}\boldsymbol{C}\left\|L_{p+1}\right\|^2 & \boldsymbol{I_G}+2\left|J\right|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\left\|L_p\right\|^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\beta_{\xi_1}}\\ \boldsymbol{\beta_{\xi_2}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{P}\\ \boldsymbol{P_s}\end{pmatrix} \quad (3.25)$$

avec

$$(\boldsymbol{D}^{-1})_{g,g'}=\sum_n\frac{w_n}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\delta_{g,g'} \quad (3.26)$$

$$(\boldsymbol{D_s}^{-1})_{g,g'}=\sum_n\frac{w_n\mathrm{sgn}(\Omega_{n_x})}{4\left|\Omega_{n_x}\right|J_{00}^{-1}+2\left|J\right|\left\|R_{p+1}\right\|^2\Sigma_t^g}\delta_{g,g'} \quad (3.27)$$

$$(\boldsymbol{P})_g=\sum_n w_n I_{\xi}^{n} \quad (3.28)$$

$$(\boldsymbol{P_s})_g=\sum_n w_n\mathrm{sgn}(\Omega_{n_x})I_{\xi}^{n} \quad (3.29)$$

La quadrature utilisée étant symétrique, $\boldsymbol{D_s}^{-1}=0$. Ainsi, les coefficients $\boldsymbol{\beta_{\xi_1}}$ et $\boldsymbol{\beta_{\xi_2}}$ ne sont pas liés. Ils vérifient :

$$\begin{cases}\underbrace{\left(\boldsymbol{I_G}+2\left|J\right|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\left\|L_{p+1}\right\|^2\right)}_{\mathrm{e}_{\boldsymbol{\xi_1}}}\boldsymbol{\beta_{\xi_1}}=\boldsymbol{P}\\ \underbrace{\left(\boldsymbol{I_G}+2\left|J\right|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}\left\|L_p\right\|^2\right)}_{\mathrm{e}_{\boldsymbol{\xi_2}}}\boldsymbol{\beta_{\xi_2}}=\boldsymbol{P_s}\end{cases} \quad (3.30)$$

Remarque 7. *Si $\boldsymbol{C} = 0$, on retrouve le système vérifié pour le problème modèle 1. Il n'y a plus de couplage entre les différents groupes d'énergie.*

Il faut cependant noter que la méthode n'est valable que lorsque les maillages sont les mêmes dans tous les groupes c'est-à-dire pour la première itération. Après, il serait nécessaire de projeter les éléments de la matrice de couplage sur les bases de Radau. Dans Eq. 3.30 nous n'aurions plus $\boldsymbol{C}\,\|L_{p+1}\|^2$ mais des produits d'intégrales de Legendre comme par exemple $\boldsymbol{C}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{0} L_{p+1}(x)L_{p+1}(2x+1)dx$. Mais nous avons vu sur le modèle 1 (Chapitre 2) que l'estimateur de Radau est dérivé pour un maillage conforme. Il n'y a donc pas de sens à modifier la matrice de couplage vu que l'estimateur sans couplage n'est plus valide.

Dans un premier temps, on se place dans le cadre exact du théorème *i.e.* avec le même maillage dans chaque groupe et des sections indépendantes de l'espace. La géométrie est identique au benchmark de protection du modèle 1 (Figure 1.3) avec une source constante $Q = 10$ dans M1 mais on travaille maintenant avec deux groupes énergétiques. Les matériaux M1 et M2 sont identiques avec $\Sigma_t = (11.5, 1.5)$ et $\Sigma_s = (1,0; 10,1)$ impliquant une forte dépendance du groupe 2 au groupe 1. Le maillage spatial est uniforme avec un pas $h = \frac{1}{10}$.

Un premier moyen de vérification de l'importance du couplage consiste à réécrire Eq. 3.7 sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{e} = \widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{e} + \boldsymbol{E} \tag{3.31}$$

$$\boldsymbol{e} - \boldsymbol{E} = \widetilde{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{C}\left(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{E}\right) + \boldsymbol{C}\boldsymbol{E}\right) \tag{3.32}$$

Ainsi, $(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{E})$ est solution du problème initial avec comme terme source l'estimateur d'erreur multiplié par la matrice de couplage $\boldsymbol{C}\boldsymbol{E}$. On commence donc par résoudre notre problème de protection

$$\boldsymbol{\phi} = \widetilde{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{\phi} + \boldsymbol{Q}\right) \tag{3.33}$$

et à calculer l'estimateur d'erreur $\boldsymbol{E}$ ainsi que l'erreur $\boldsymbol{e}$. On résout ensuite le problème donné par Eq. 3.32 avec l'estimateur d'erreur $\boldsymbol{E}$ du calcul initial servant de base au calcul du terme source. Figure 3.6 gauche (resp. droite) représente l'indice d'efficacité entre l'erreur $\boldsymbol{e}$ du problème de protection (Eq. 3.33) et l'erreur calculée à partir de la résolution d'Eq. 3.32 (resp. $\boldsymbol{E^R}$ obtenu par Eq. 3.30), $\boldsymbol{e^R}$ obtenue en additionnant $\boldsymbol{E}$ à la solution d'Eq. 3.32 c'est-à-dire :

$$eff = \frac{\|\boldsymbol{e^R}\|}{\|\boldsymbol{e}\|} \quad \left(\text{resp. } = \frac{\|\boldsymbol{E^R}\|}{\|\boldsymbol{e}\|}\right) \tag{3.34}$$

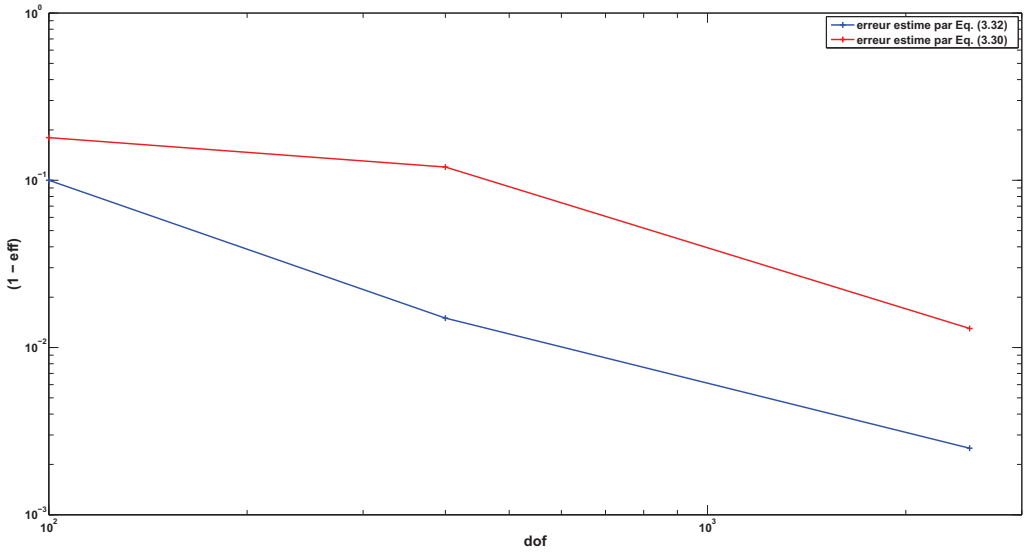


Figure 3.6: Indice d'efficacité avec l'erreur estimé par Eq. 3.32 et par Eq. 3.30

On observe que l'indice d'efficacité tend bien vers 1 et donc que $\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{R}}$ tend vers $\boldsymbol{e}$ nous assurant ainsi de la validité d'Eq. 3.32 pour estimer l'erreur couplée.

Lorsque l'erreur est estimée par Eq. 3.30 l'efficacité tend aussi vers 1 mais de manière plus lente. Afin de voir les zones où l'erreur est le moins bien estimée, on représente Figure 3.7 l'efficacité spatiale lorsque l'erreur est estimée par Eq. 3.30 (la valeur 2 a été imposée lorsque l'efficacité était supérieure à 2 pour des raisons de visibilité). On avait vu Section 2.4.5 que malgré les problèmes liés à la régularité de la solution, l'estimateur de Radau permettait de mener efficacement le raffinement dans un cas de protection à un groupe. Ici, on remarque que l'indice d'efficacité est parfois assez éloigné de 1, en particulier à l'interface entre la partie du domaine où l'on a imposé une source et le reste. Afin de mieux juger de l'intérêt d'Eq. 3.30, Figure 3.8 est la représentation spatiale de l'erreur L^2 et des estimateurs sans couplage $\boldsymbol{E}$ et estimé par Eq. 3.30 dans le groupe 2. On peut ainsi voir que la matrice de couplage permet à l'estimateur de se rapprocher de l'erreur. Ainsi, même si l'on a vu Figure 3.6 que l'efficacité pouvait être assez éloigné de 1, l'utilisation d'Eq. 3.30 pour estimer l'erreur permet de se rapprocher de l'erreur.

Ainsi, Eq. 3.32 est une bonne approximation de l'erreur. Mais bien sûr cela ne peut pas nous fournir une estimation viable de l'erreur. En effet, obtenir un estimateur d'erreur par Eq. 3.32 implique la résolution d'un problème de transport équivalent au problème initial ce qui introduit un surcout important. Eq. 3.30 permet de se rappro-

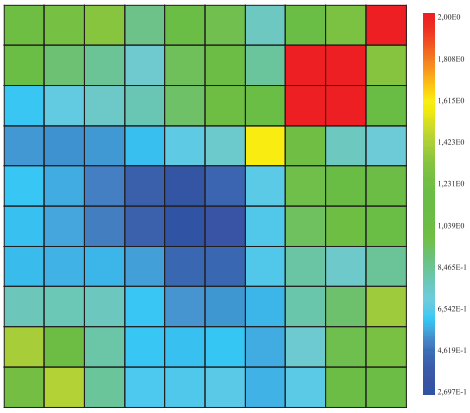


Figure 3.7: Représentation spatiale de l'efficacité avec estimation d'erreur faite par Eq. 3.30 dans le groupe 2

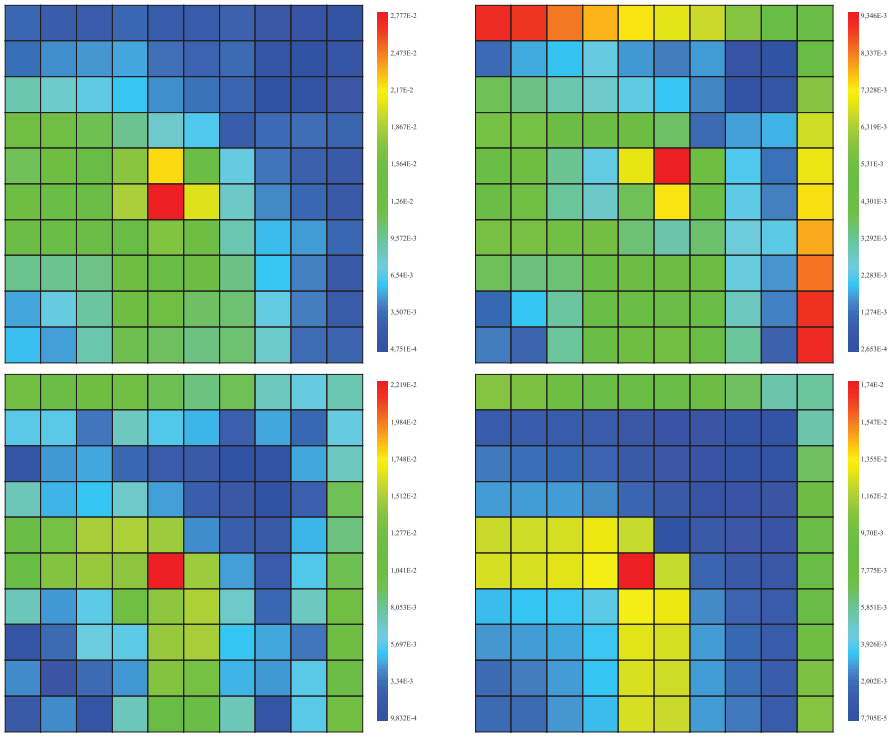


Figure 3.8: estimateur sans couplage (haut) dans le groupe 1 (gauche) et 2 (droite), erreur L^2 (en bas à gauche), et erreur estimée par Eq. 3.30 (en bas à droite) pour le groupe 2 dans le cas de protection

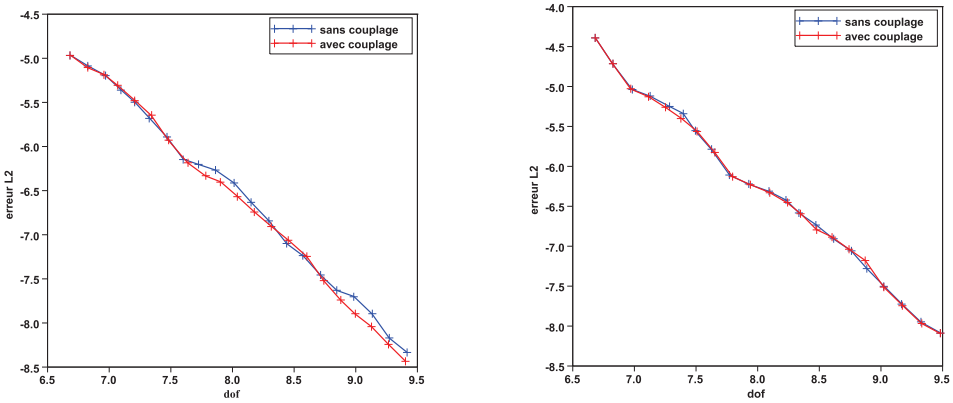


Figure 3.9: Convergence sur le cas de protection à 2 groupes avec un seul matériau (gauche) et deux matériaux différents (droite) avec et sans couplage

cher de l'erreur par rapport à une méthode où l'on ne prend pas en compte le couplage mais le résultat est encore relativement éloigné de la vraie erreur.

3.4 Adaptation de maillage dépendante de l'énergie

Après avoir vu comment estimer l'erreur dans le cas de la résolution d'un système (problème modèle 2), on cherche un moyen de mener efficacement le raffinement. Pour cela, on utilise une fonction poids qui va traduire l'influence des groupes g' sur le groupe g :

$$(\boldsymbol{W_{\xi_1}})_g = \sum_{g'} \left| \mathcal{C}_{\xi_1}^{g',g} \right| \tag{3.35}$$

où les matrices $\mathcal{C}_\xi$ sont définies Eq. 3.30.

Dans notre exemple, cette fonction poids va permettre de donner de l'importance au groupe 2 par rapport au groupe 1. Ainsi l'estimateur qui était initialement plus faible dans le groupe 2 (Figure 3.8 en haut) va devenir plus important, ce qui devrait nous permettre de raffiner plus efficacement. Le nouvel estimateur d'erreur est donné par :

$$\boldsymbol{E_h^p} = \boldsymbol{W_{\xi_1}}\boldsymbol{\beta_{\xi_1}} L_{p+1}(\xi) - \boldsymbol{W_{\xi_2}}\boldsymbol{\beta_{\xi_2}} L_p(\xi) + \boldsymbol{W_{\eta_1}}\boldsymbol{\beta_{\eta_1}} L_{p+1}(\eta) - \boldsymbol{W_{\eta_2}}\boldsymbol{\beta_{\eta_2}} L_p(\eta) \tag{3.36}$$

On trace Figure 3.9 (gauche) la norme L^2 de l'erreur sur le problème de protection à deux groupes lorsque le raffinement est mené avec l'estimateur sans couplage

ou avec l'estimateur modifié par la fonction poids (Eq. 3.36). Si les deux courbes sont relativement proches initialement, on remarque que la prise en compte du couplage à travers une fonction poids nous permet d'améliorer légèrement la convergence. Il reste maintenant à adapter ce résultat au cas réaliste ZONA2B. Cela demande de prendre en compte le fait que la matrice de couplage dépende de l'espace via les sections efficaces. On va alors rencontrer le même problème que pour le modèle 1 lorsque l'estimateur devenait moins efficace dès que le maillage devenait non conforme ou que l'ordre de la base de polynôme n'était plus uniforme. Après la cellule impactée par les modifications, il s'en suivait une zone le long des lignes caractéristiques où l'indice d'efficacité de l'estimateur s'éloignait de 1. En effet, la démonstration de l'estimateur de Radau étant faite par induction sur les cellules, toute modification en amont perturbe toutes les cellules situées après. Ainsi, dès que les sections sont spatialement dépendantes, il faudrait dériver, si possible, un nouvel estimateur qui ferait certainement intervenir toutes les matrices de couplage en amont. Pour voir ce problème, on a tout d'abord utilisé le même cas test de protection que précédemment mais en mettant la matrice de couplage à zéro dans le matériau M2. Figure 3.9 (droite) représente la norme L^2 de l'erreur dans ce cas. On remarque alors que la prise en compte du couplage ne permet pas d'améliorer la convergence. Ainsi, l'approche proposée est insuffisante pour les cas hétérogènes. On propose d'utiliser une fonction poids indépendante de l'espace.

Vu que l'on s'est affranchi des directions pour obtenir notre estimateur, la notion de cellules amonts et avals n'a plus de sens. On propose donc une fonction poids qui représente le poids global d'un groupe sur les autres sans tenir compte des différences spatiales. Pour cela, on homogénéise la matrice de couplage en faisant l'hypothèse d'un milieu infini homogène ce qui nous amène à la matrice de couplage suivante :

$$(\mathfrak{C})_{g,g'} = \delta_{g,g'} - \frac{\boldsymbol{C}_{g,g'}}{\Sigma_t^g} \tag{3.37}$$

et la fonction poids est obtenue comme précédemment en sommant sur les lignes.

Les nouvelles courbes de convergence en utilisant cette fonction poids sont représentées Figure 3.10 en terme d'erreur L^2 sur la solution et d'erreur sur la valeur propre du système. Dans les deux cas, on observe une nette amélioration de la convergence et on voit l'intérêt d'utiliser des maillages différents par groupes d'énergie. En effet, la stratégie initiale (sans couplage) amenait à une convergence équivalente au cas à un seul maillage voire pire pour le k_{eff}. Même si la méthode proposée pour prendre en compte le couplage n'est certainement pas optimale, elle permet au moins de montrer

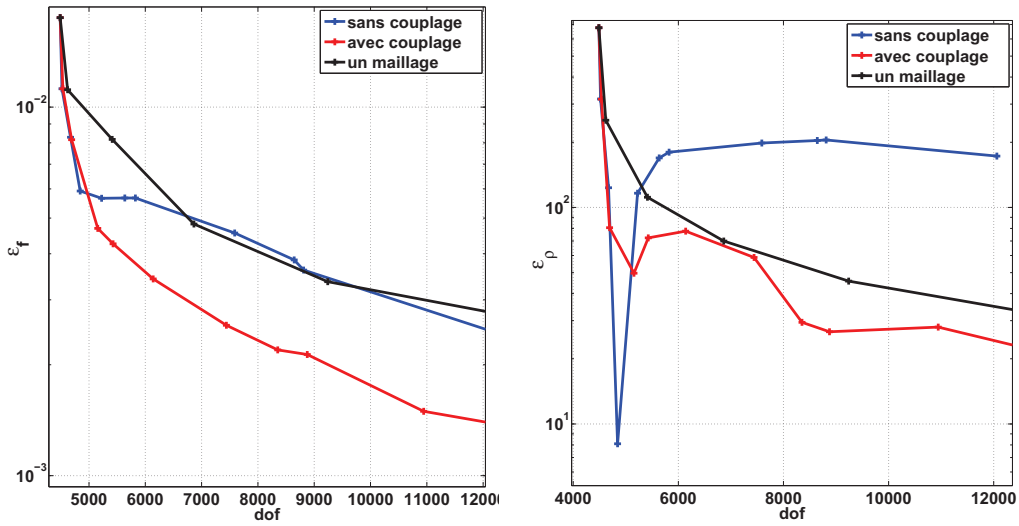


Figure 3.10: Erreur L^2 (gauche) et sur le k_{eff} en pcm (droite) avec ou sans prise en compte du couplage sur le cas ZONA2B

l'intérêt de l'approche multi-maillages pour la résolution de l'équation de transport des neutrons avec des gains importants notamment sur la convergence du flux.

3.5 Article 2 : Adaptation de maillage sur un cas réaliste

Cette partie est un proceeding de la conférence M&C qui s'est déroulé à Rio de Janeiro du 8 au 12 mai 2011 : D. Fournier, P. Archier, R. Le Tellier, C. Suteau, "Improvement of Neutronic Calculations on a MASURCA Core using Adaptive Mesh Refinement Capabilities". Il présente une analyse des différentes stratégies de raffinement sur un cas réaliste issu d'un programme réalisé sur un réacteur expérimental du CEA Cadarache. L'estimateur de Radau défini Section 2.2.1 est utilisé pour conduire le raffinement sur des cas 2D et 3D. Les enjeux liés à un raffinement spatial différent par groupe d'énergie (Section 3.2) sont également abordés.

3.5.1 Introduction

A better knowledge of neutronic parameters for core calculations is required for the design of new reactors. Improving the accuracy of the solution of the neutron transport equation in a deterministic way increases the calculation time and the memory footprint. Despite the improvements of computational resources, the accuracy is not always sufficient. In this paper, we propose to deal with this issue using Adaptive Mesh Refinement (AMR) methods. The main idea is to create an optimal mesh *i.e* to minimize the number of unknowns for a given accuracy.

To test such an approach, all numerical tests are done on the ZONA2B experimental core configuration (30) of the MASURCA mock-up based at CEA Cadarache. Comparisons are done on some important neutronic parameters such as the flux, current or multiplication factor in terms of the improvement in the number of unknowns but also the calculation time. An exhaustive analysis is performed on the 2D benchmark and its conclusions are confirmed on the 3D case.

Developments are made in the SNATCH solver (36) of the ERANOS code system (79). Within this framework, the neutron transport equation is discretized successively according to energy, angle and space. The treatment of the energy variable consisting on a multigroup approach is followed by a discretization of the angular variable using the discrete ordinates method (53). It results in a set of coupled first-order hyperbolic transport equations which can be written as

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\widetilde{\phi_n^g}(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\widetilde{\phi_n^g}(\vec{r}) = \sum_{g'}\sum_{n'} S_{n'\to n}^{g'\to g}\widetilde{\phi_{n'}^{g'}}(\vec{r}) \tag{3.38}$$

$$\Leftrightarrow \widetilde{H_n^g\phi_n^g}(\vec{r}) = \sum_{g'}\sum_{n'} S_{n'\to n}^{g'\to g}\widetilde{\phi_{n'}^{g'}}(\vec{r}) \tag{3.39}$$

where $\vec{\Omega}_n$ is the direction related to the S_N method, $\widetilde{\phi_n^g}(\vec{r})$ is the flux at position $\vec{r}$ in the direction $\vec{\Omega}_n$ and the energy group g, Σ_t^g is the total cross-section in group g and $S_{n'\to n}^{g'\to g}(\vec{r})$ contains the sources resulting from scattering and fission.

The spatial scheme has been chosen in order to solve a local problem and to make $hp-$ refinement possible. A Discontinuous Galerkin Finite Element Method (DGFEM) has been implemented. The domain is decomposed into a Cartesian grid which can be non conforming in order to perform $h-$refinement. In each cell, the solution of Eq. 3.38

is approximated on a hierarchical polynomial basis (82) allowing to perform easily $p-$refinement.

This method has also been implemented in the XUTHOS code (71, 94) for unstructured triangular meshes. It highlights the interest of AMR to improve the calculation time as well as the rate of convergence. To lead the refinement process, an error estimator is necessary to select the regions to refine. The quality of this estimator determines the performance of the AMR strategy. In this paper, a method developed in (3) and applied in our framework in (35) is used. The estimator E_n^g considers the right hand side of Eq. 3.39 as independent of the flux in other groups. It measures the distance between an exact flux $\widehat{\phi_n^g}$ and an approximate one ϕ_n^g

$$\|E_n^g\|_{L^2} = \left\|\widehat{\phi_n^g} - \phi_n^g\right\|_{L^2} \tag{3.40}$$

where $\widehat{\phi_n^g}$ and ϕ_n^g satisfy respectively

$$\widetilde{H_n^g}\widehat{\phi_n^g}(\vec{r}) = \sum_{g'}\sum_{n'} S_{n'\to n}^{g'\to g}\phi_{n'}^{g'}(\vec{r}) \tag{3.41}$$

$$H_n^g\phi_n^g(\vec{r}) = \sum_{g'}\sum_{n'} S_{n'\to n}^{g'\to g}\phi_{n'}^{g'}(\vec{r}) \tag{3.42}$$

where H_n^g is an approximate operator of $\widetilde{H_n^g}$ (defined in Eq. 3.39).

A cell κ is refined if

$$\max_{g'}\sum_n w_n E_n^{g'}(\kappa) > \alpha \max_{g'}\max_{\kappa_i}\sum_n w_n E_n^{g'}(\kappa_i) \tag{3.43}$$

where $\alpha \in [0,1]$ is fixed to 0.5 throughout this study and w_n are the weights associated to the angular discretization.

Moreover, in the present paper, we propose and test an AMR strategy depending on the energy. Indeed, the spatial behavior of the flux on the different energy ranges is different so that there is no reason to represent the solution on the same mesh in all the energy groups. In this way, a cell κ in group g is refined if

$$\sum_n w_n E_n^{g}(\kappa) > \alpha \max_{g'}\max_{\kappa_i}\sum_n w_n E_n^{g'}(\kappa_i) \tag{3.44}$$

This paper is organized as follows. The core configuration used for this study is presented in Section 3.5.2. Section 3.5.3 details the methodology used to compare the

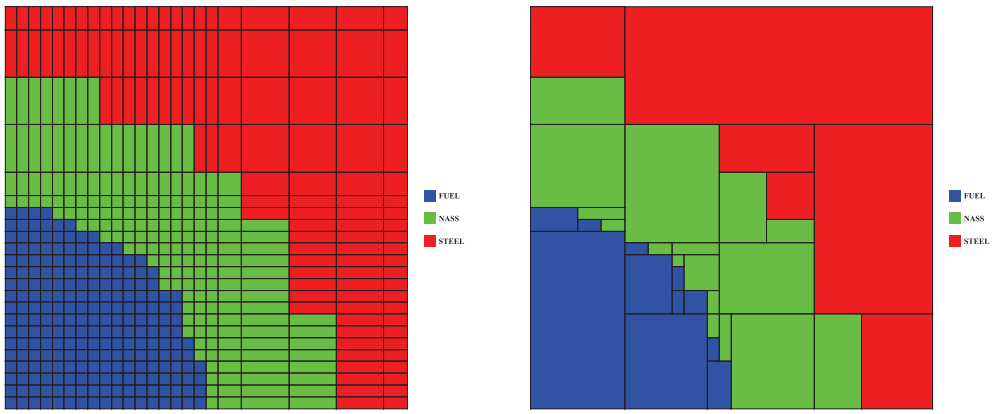


Figure 3.11: 2D conforming (left) and non conforming (right) mesh

different strategies of refinement. Results are then compared on various quantities of interest in Section 3.5.4 for the 2D case and Section 3.5.5 for the 3D one.

3.5.2 The CIRANO ZONA2B Core : Conforming and Non Conforming Description

The CIRANO experimental program was performed from 1994 to 1997 in order to investigate the performances of steel reflected plutonium burning fast reactors. Several core configurations were studied at the time (effect of fertile blankets, sodium voiding, ...). One of them, the ZONA2B configuration presented in Figure 3.11, is of particular interest for this study, as the fertile blankets have been replaced by steel reflector. In this case, the flux variations at the interfaces, especially between fuel and reflector, are more important than in fast reactor configurations with fertile blankets. Due to this large gradient term, obtaining a fine solution of Eq. 3.38 is more difficult than in benchmarks with blankets.

The CIRANO ZONA2B derived benchmarks (the 2D and 3D versions) contain three homogenized media denoted *FUEL*, *NASS* and *STEEL* in Figure 3.11. They were obtained from ECCO cell calculations, a module of the ERANOS code system (79). The *FUEL* medium is a mix of sodium and U/PuO_2 fuel. The *NASS* is composed of 3/4 of stainless steel and 1/4 of sodium. The *STEEL* is a shield made of steel.

Figure 3.11 (left) is the usual representation of the core using a conforming description of the geometry. Neutronic calculations are generally performed on this mesh containing 529 cells. A routine has been written to transform Figure 3.11 (left) into a non conforming description presented in Figure 3.11 (right). This algorithm starts from the conforming description and gathers the cells containing the same material in

a recursive way. Thus, it is possible to set the level of non-conformity (6 in Figure 3.11 (right)). Thanks to these non conforming capabilities, it requires no more than 34 cells to represent the same core. This latter description is the initial mesh used for the refinement procedures.

3.5.3 Error Calculation

The reference values *i.e* the converged quantities calculated on a fine mesh with high polynomial order are denoted with a tilde notation. The different strategies are compared in terms of the convergence on the different neutronic parameters.

The error in reactivity ϵ_ρ is given by

$$\epsilon_\rho = |\tilde{\rho} - \rho| = \frac{\left|\widetilde{k_{\text{eff}}} - k_{\text{eff}}\right|}{\widetilde{k_{\text{eff}}} \cdot k_{\text{eff}}} \tag{3.45}$$

The error on the flux is evaluated in a L^2 norm in space by

$$\epsilon_f = \max_g \sum_n w_n \left(\int_{\mathcal{D}} \left(\widetilde{\phi_n^g}(\vec{r}) - \phi_n^g(\vec{r}) \right)^2 d\vec{r} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.46}$$

The error on the current ϵ_c is calculated at the interface Γ between two media (*FUEL* and *NASS* in this study) by

$$\epsilon_c = \max_g \sum_n w_n \int_\Gamma \int_{4\pi} \left(\vec{\Omega}_n \cdot \vec{n} \right) \left| \widetilde{\phi_n^g(\vec{r})} - \phi_n^g(\vec{r}) \right| d\vec{\Omega}_n ds \tag{3.47}$$

In the following, we use superscript to denote the strategy. For instance, $\epsilon_f^{h,2}$ is the error on the flux when $h-$refinement with a polynomial basis order $p = 2$ is performed.

To compare the different strategies, we monitor the convergence of these neutronic parameters as a function of the number of degrees of freedom, denoted dof in the following, and the calculation time. dof represents the number of unknowns induced by the three discretizations

$$dof = nbGroups \times nbDirections \times nbCells \times (p+1)^d \tag{3.48}$$

where $nbGroups$, $nbDirections$, $nbCells$ represent respectively the number of energy groups, angular directions and spatial cells. $(p+1)^d$ is the cell polynomial basis size at order p in dimension d ($d = 2$ or 3).

Three different parameters have been chosen because it allows to test different aspects of the refinement process. The flux is the most natural one because it is the quantity controlled by the error estimator with Eq. 3.40. Analyzing the convergence of the reactivity is also important because this integral quantity is often the main interest of neutronic calculations. Finally, the current at the core-reflector interface is more sensitive to the local flux gradient and gives a finer analysis of the strategies.

3.5.4 Comparison of the Different Strategies on the 2D Case

3.5.4.1 Comparison of $h-$ and $p-$ Refinement Methods

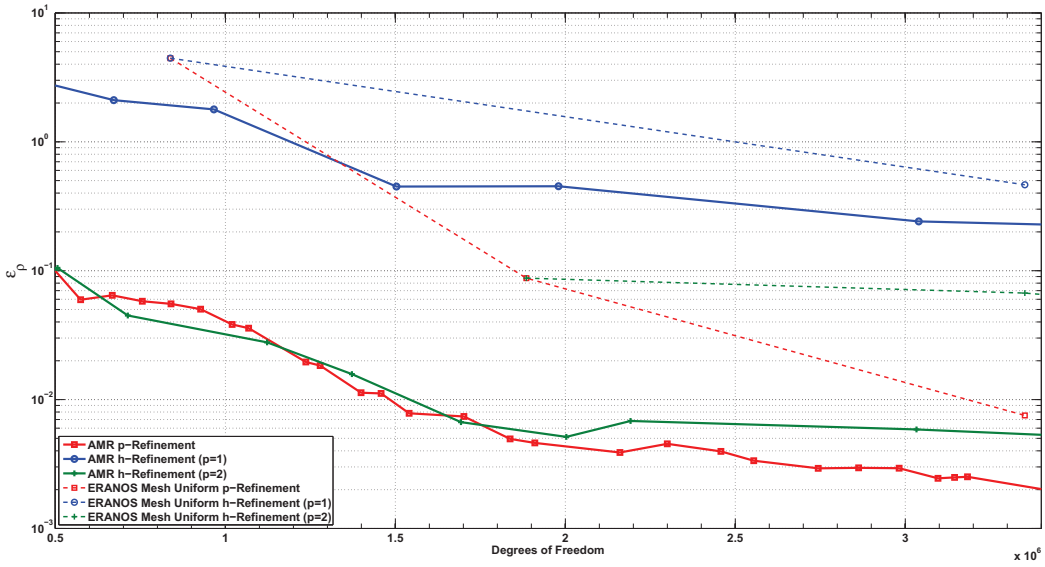


Figure 3.12: Reactivity error as a function of dof for adaptive refinement strategies and comparison with ERANOS mesh

Figure 3.12 shows the error on the reactivity as a function of the dof with different strategies. The dotted lines represent uniform refinement on conforming meshes. Starting from the discretization presented in Figure 3.11 (left), all cells are $h-$ or $p-$refined. The other strategy starts from a non conforming mesh as described in Figure 3.11 (right) and the refinement is done locally using an error estimator on each cell.

Let us firstly note the interest of the initial mesh transformation (Figure 3.11 between left and right) and of the AMR process. Obtaining an accuracy of 1 pcm with $h-$refinement and $p = 1$ requires twice more degrees of freedom with the conforming approach than the non conforming one. It is even more than three times for $\epsilon_\rho = 0.1$ pcm

with a $p-$refinement strategy.

The convergence is slower using $h-$refinement with $p = 1$ than the two other strategies. At a given number of dof, the accuracy is at least one order of magnitude worst than the same strategy with $p = 2$. $\epsilon_\rho^{h,2}$ and ϵ_ρ^p have a similar behavior.

This first analysis on the reactivity shows the importance of transforming the initial mesh of Figure 3.11 (left) into a non conforming one (Figure 3.11 (right)). In the following, adaptive and uniform strategies will be compared using the non conforming mesh described in Figure 3.11 (right) as initial mesh.

Analyzing only the convergence of ϵ_ρ is not sufficient to compare the different strategies. The analysis of the flux error convergence is presented in Figure 3.13. Concerning $h-$refinement, the interest of the AMR process is indisputable. Actually, it is clear that some cells have to be more refined than others, particularly at interfaces. Whereas finely refining the interface is easy with $h-$refinement, $p-$refinement strategy implies the increase of the polynomial basis order in large cells. Most of the cells describing the domain in the non conforming way have at least one edge located at a material interface. Thus, adaptive and uniform $p-$refinements are nearly equivalent. It shows the limitations of $p-$refinement starting from very coarse meshes.

The number of degrees of freedom represents the memory storage but is also linked to the calculation time. As the time is not directly proportional to dof, Figure 3.13 (right) represents ϵ_f as a function of the time. The additional cost related to AMR induced by the error estimation and the update of the different quantities between two refinements represents less than 0.5% of the total time and can be neglected. Consequently, AMR and uniform strategies can be compared in the same way.

Whereas, for $h-$refinement, the calculation time varies proportionally with dof, the dependency is more complicated for the $p-$refinement case. Actually, a linear system has to be solved on each cell leading to inverse square matrices of size $(p+1)^2$. As the complexity to inverse a matrix $n \times n$ is $\mathcal{O}(n^3)$, the cost is $\mathcal{O}((p+1)^6)$. With $h-$refinement, even if we have more and more cells, the size of the matrix is constant. On the opposite, when $p-$refinement is performed, the cost increases as p^6. It explains the slowing down of the convergence when p increases too much.

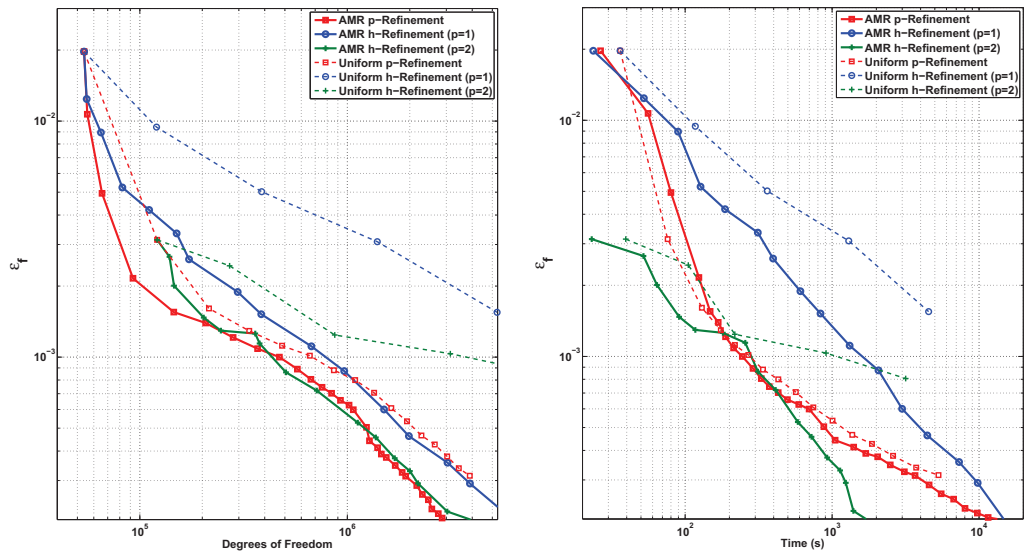


Figure 3.13: Flux error as a function of *dof* (left) and time (right) for adaptive and uniform refinement strategies

To go further, the convergence of the current at the interface between fuel and reflector is analyzed in Figure 3.14. In this region, the flux is less regular and an important gradient is observed between the two materials. The analysis is quite similar to the one performed on the reactivity but the difference between $\epsilon_c^{h,2}$ and ϵ_c^p is more pronounced. When the flux is non regular, $h-$refinement becomes more interesting than $p-$refinement. Actually, the approximation of a function with non-continuous first derivatives is better with a finer mesh than with a higher polynomial order. It should nevertheless be noted that this analysis is highly-dependent on the initial mesh. Starting from a finer mesh could improve the convergence of the $p-$refinement strategy.

The study of this 2D benchmark points out the advantage of the AMR method and particularly of the $h-$refinement with $p = 2$ which exhibits a fast convergence for various physical quantities. The $p-$refinement process seems interesting too, at least, as long as p is not too large.

3.5.4.2 The Energy-dependent AMR

The flux behavior is drastically different depending on the energy. Whereas the fast neutron flux is high in the *FUEL* and *NASS* regions, the thermal one is low. Thus, there is no reason to use the same spatial discretization to represent the solution of the transport equation. As the error estimator used to lead the refinement process is energy-group-dependent, it allows to adapt the spatial meshes differently depending on

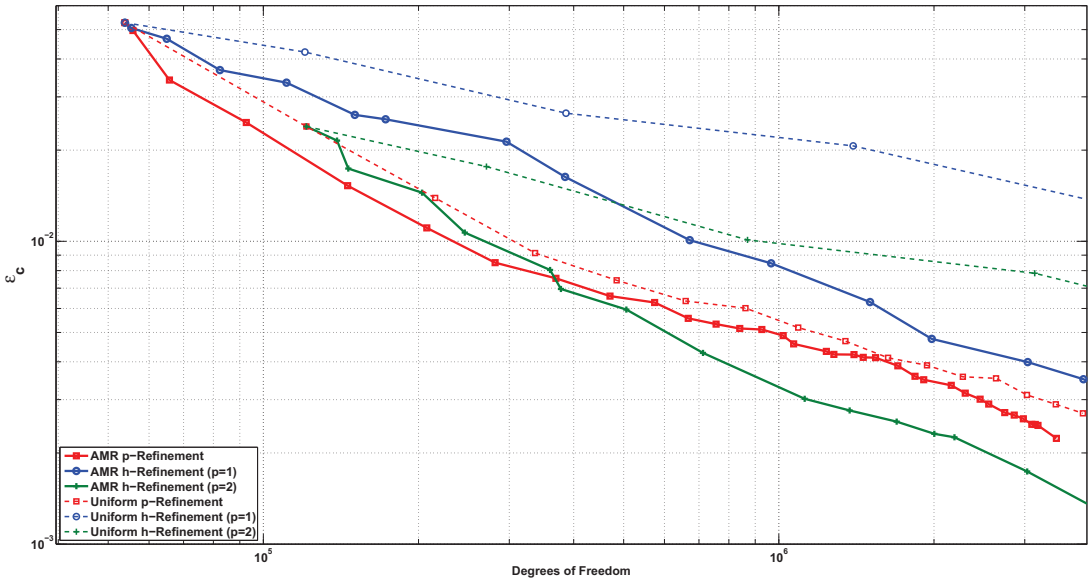


Figure 3.14: Current error as a function of *dof* for adaptive and uniform refinement strategies

the energy groups.

The basic idea is to have one spatial mesh per energy group but this strategy induces an additional cost in memory footprint and calculation time. Actually, when the meshes between groups are different, a projection of the source is necessary and the equation solved is no longer Eq. 3.42 but

$$H_n^g \phi_n^g(\vec{r}) = \sum_{g'} \Pi_{g' \to g} \sum_{n'} S_{n' \to n}^{g' \to g} \phi_{n'}^{g'}(\vec{r}) \tag{3.49}$$

where $\Pi_{g' \to g}$ represents the L^2 projector from group g' to g.

An intermediate option consists in joining some groups that will share the same spatial mesh. In the following, the convergence has been studied using 1, 2, 6, 15 and 33 different spatial meshes. The gathering of the energy groups into macro-groups is presented in Table 3.1.

The meshes obtained at the end of the refinement process with 6 different energy meshes are presented in Figure 3.15. As expected, the *FUEL* regions and the *FUEL-NASS* interface are finely discretized in macro-groups 1 and 2. For groups 3 to 5, *FUEL* is less and less refined and, on the contrary, the mesh becomes finer at the *NASS-STEEL* interface. In the last group, few neutrons are present and the final mesh is the coarsest.

2 meshes	{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16}, {17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33}
6 meshes	{1, 2, 3, 4}, {5, 6, 7}, {8, 9, 10, 11, 12}, {13, 14, 15}, {16, 17, 18, 19, 20, 21}, {22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33}
15 meshes	{1, 2}, {3, 4}, {5}, {6, 7}, {8, 9}, {10, 11}, {12, 13}, {14, 15}, {16, 17, 18}, {19, 20, 21}, {22, 23, 24, 25, 26, 27}, {28, 29, 30}, {31}, {32}, {33}

Table 3.1: Energy groups gathering

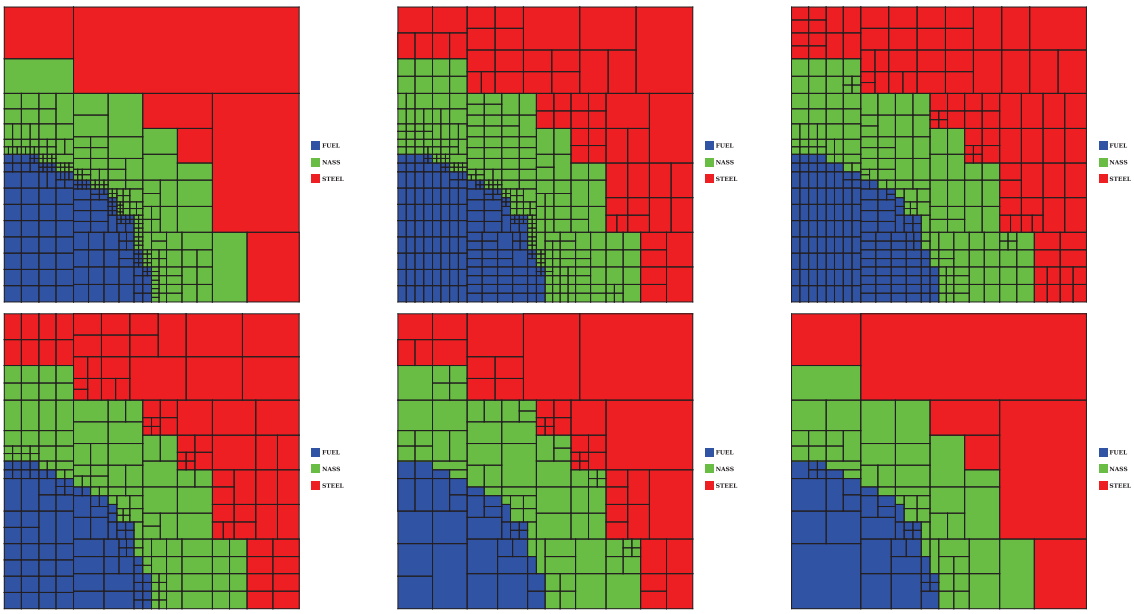


Figure 3.15: Final meshes obtained for macro-groups 1 to 6

The convergence is now compared depending on the number of different meshes used. Figure 3.16 represents ϵ_ρ as a function of the dof.

Results are far from the expected ones. At the beginning, as expected, the more energy meshes, the faster the convergence occured. But after some refinement steps, the convergence deteriorates and becomes worse than in the energy-independent case. To explain this phenomenon, we have to detail the error estimator behavior. Using the notations of Eqs. 3.39, 3.41 and 3.42, the error ϵ_n^g can be written in terms of the estimator E_n^g as

$$\epsilon_n^g = \widetilde{\phi_n^g} - \phi_n^g \tag{3.50}$$

$$= \widetilde{\phi_n^g} - \widehat{\phi_n^g} + \widehat{\phi_n^g} - \phi_n^g \tag{3.51}$$

$$= \widetilde{H_n^g}^{-1} \left(\sum_{g'} \sum_{n'} S_{n' \to n}^{g' \to g} \epsilon_{n'}^{g'} \right) + E_n^g \tag{3.52}$$

The refinement is lead using the estimator E_n^g and does not take into account the coupling terms between groups. If the meshes are the same in all the energy groups, by using a criterion on the maximum error over all the groups (Eq. 3.44), this additional error term is implicitely controlled. By considering different meshes per energy group, the convergence is deteriorated because the coupling terms are not properly controlled. To avoid this phenomenon, it would be necessary to relate the flux convergence in groups where the energy mesh is different. This issue is currently under study.

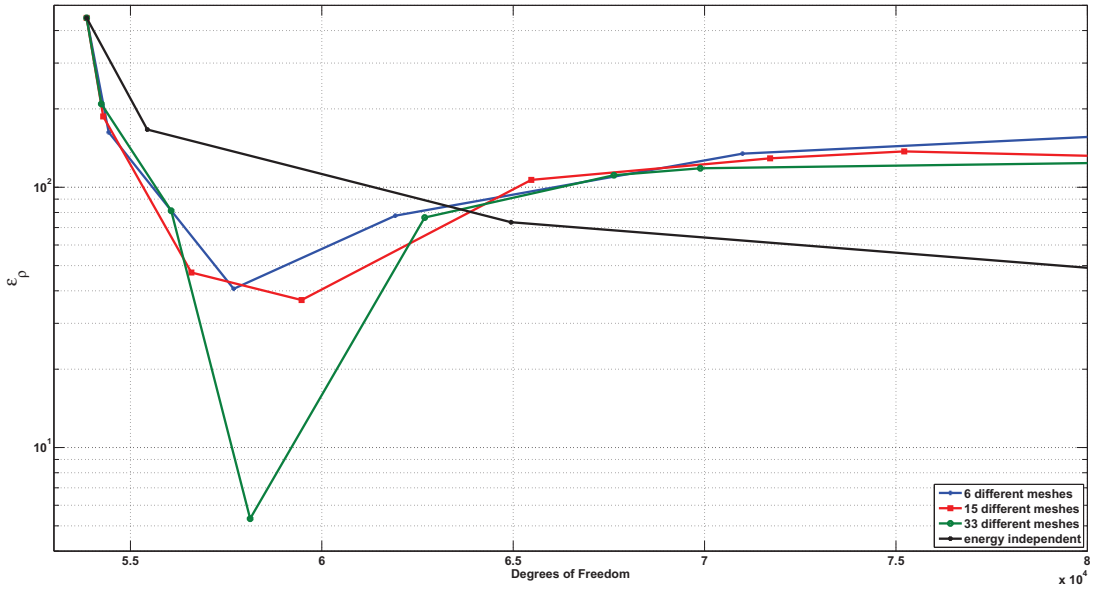


Figure 3.16: Convergence with energy-dependent or independent meshes

3.5.5 Improvements in the 3D Case

The initial mesh of the 3D benchmark is presented in Figure 3.17 (left) with the same color code as in Figure 3.11. Figure 3.17 (right) represents a mesh obtained after some refinement steps. As expected, the most refined regions are the ones located at interfaces and in particular at the *FUEL/NASS* one. In the *STEEL* regions, the mesh is relatively coarse because the neutron density is low and the associated flux is regular.

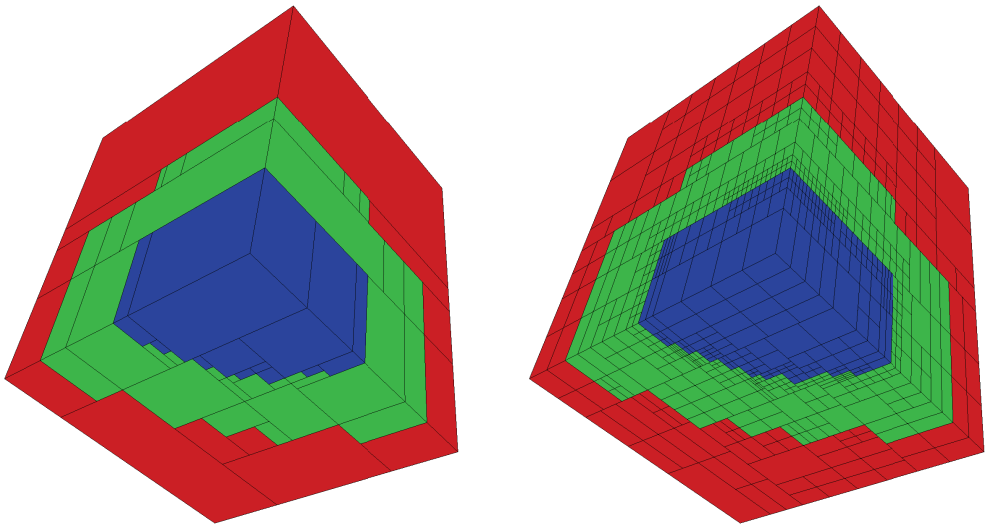


Figure 3.17: 3D initial non conforming mesh (left) and refined mesh (right)

This "visual" analysis is confirmed in Figure 3.18 comparing the convergence rate of the reactivity depending on the dof. As in the 2D case, a first comparison is given between the strategy based on the ERANOS mesh (extension of Figure 3.11 to 3D) with uniform refinement to the adaptive strategy with the initial mesh presented in Figure 3.17. Obtaining an error on the reactivity inferior to 1 pcm requires five times more degrees of freedom in the uniform case than in the adaptive one for $h-$refinement and even ten times for $p-$refinement. It highlights the importance of transforming the initial conforming mesh into a coarser non conforming one before using an AMR procedure.

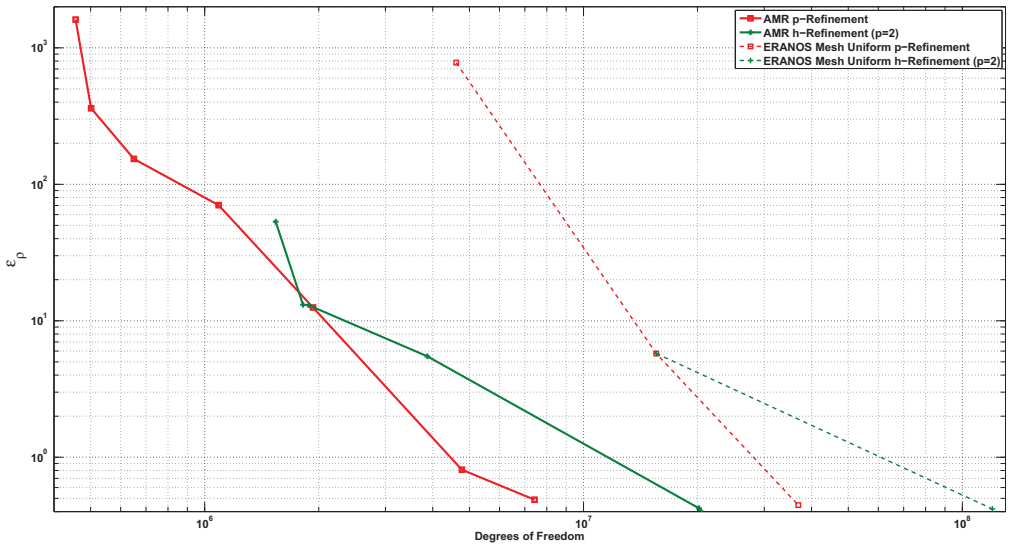


Figure 3.18: Reactivity as a function of dof for adaptive and uniform refinement strategies

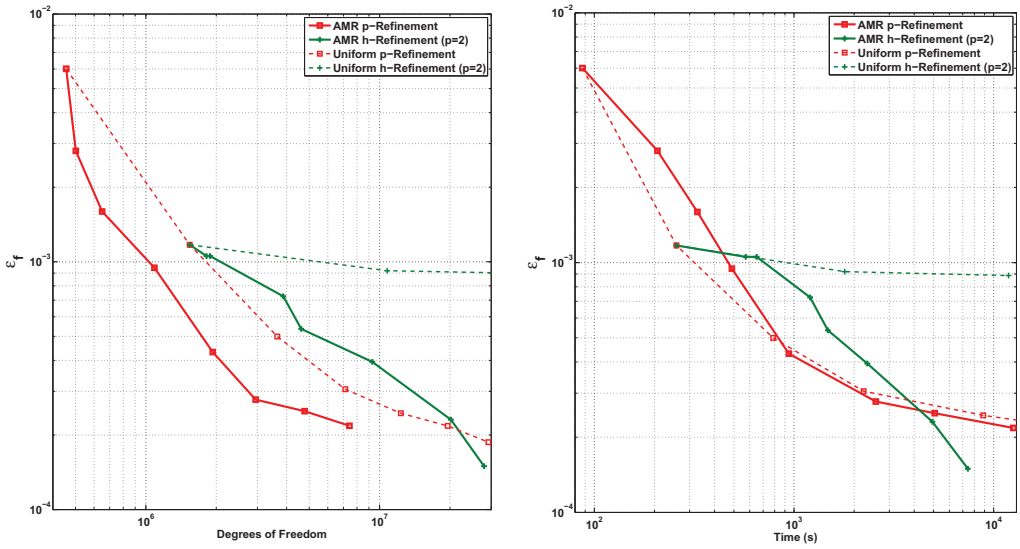


Figure 3.19: Flux error as a function of dof (left) and time (right) for adaptive and uniform refinement strategies

In the following, the initial mesh for the uniform and adaptive strategies is the non conforming one as depicted in Figure 3.17. Figure 3.19 (left) shows the convergence of the flux as a regard of dof. Adaptive strategies converge faster than uniform ones and $p-$refinement seems better than $h-$refinement with $p = 2$. This analysis has to be completed by comparing the calculation times. Actually, in the 3D case, the cell polynomial basis size is $(p+1)^3$. The same reasoning as in the 2D case leads to a $\mathcal{O}(p^9)$ complexity to inverse a matrix. It can become time consuming to increase p even if the number of dof remains reasonable.

The representation of the error on the flux as a regard of the calculation time can be seen in Figure 3.19 (right). As long as p is "small" (less than 4), the size of the problem to solve stays reasonable and the time is proportional to dof. Beyond this limit, the time increases rapidly with dof. Another aspect refers to the projections required to pass from one cell to another if the orders are different. Actually, with the upwind scheme, if a uniform polynomial basis is used, the incoming flux in a cell is a restriction of the flux in the upstream cells. With different polynomial orders, a projection is required. It explains why the uniform $p-$refinement is faster than the adaptive one for the first refinement steps.

For the $h-$refinement, the time stays proportional to dof even after several refinement steps. This strategy seems better adapted to obtain highly accurate solutions. On

the opposite, $p-$refinement can be faster to obtain a less accurate result or an integral quantity such as the reactivity.

3.5.6 Conclusions

In this paper, AMR capabilities have been presented on a benchmark derived from the CIRANO ZONA2B experimental program in the MASURCA facility. Tests have been performed in two and three dimensional cases in order to compare adaptive and uniform strategies on different neutronic quantities of interest.

Adaptive algorithms lead to a decrease of the calculation time and memory footprint compared to uniform strategies. The benefit can be extremely important : for example, at a given accuracy, the calculation time is divided by more than five on the reactivity. However, results can greatly vary depending on the adaptive strategy used.

For the energy-independent approach, the different strategies are not equivalent. Performing $h-$refinement with $p = 1$ is really inferior to the same approach with $p = 2$ in terms of the number of degrees of freedom or the calculation time. On the other hand, the comparison between $p-$ and $h-$refinement with $p = 2$ is less definitive. For relatively small p, increasing the polynomial order seems to be the best approach. It leads rapidly to accurate results, particularly for integral parameters such as the reactivity. If a higher accuracy is required, the $p-$strategy becomes less interesting than the $h-$refinement with $p = 2$. Even if dof are similar for the two strategies, increasing p to high values implies to inverse large matrices leading to important calculation time. On the opposite, the cost of $h-$refinement is proportional to dof leading to a faster convergence than for $p-$refinement.

This analysis underlines the difficulty to find the best strategy in terms of calculation time or number of degrees of freedom. It explains the interest in the research of $hp-$adaptive algorithms to optimize the number of unknowns. Such developments are in progress (34).

Concerning the energy-dependent approach, results are not as interesting as expected. The problems due to the convergence of the source term clearly inhibit the advantages of having a spatial discretization dependent on the energy. This work has to be pursued to extend the error estimation in order to take into account the source convergence.

4

Conclusions et perspectives

4.1 Conclusions

La résolution de l'équation de transport des neutrons de manière déterministe est connue pour être coûteuse en espace mémoire et en temps de calcul. Afin d'améliorer ces aspects, nous avons proposé de mettre en place des méthodes d'adaptation *hp*. L'inconnue dépendant des variables énergétiques, angulaires et spatiales, nous devions encore choisir le niveau le plus intéressant pour conduire l'adaptation. L'énergie est traitée par une approche multigroupe et l'angle discrétisé par une méthode S_N entraînant quelques dizaines à quelques centaines de groupes et de directions. Au niveau spatial, la discrétisation par éléments finis discontinus entraîne généralement de plusieurs milliers à quelques millions de degrés de liberté. Dans le cadre d'un solveur de cœur avec des assemblages partiellement homogénéisées, le maillage fin traditionnellement utilisé pour représenter la géométrie peut être simplifié. La géométrie peut ainsi initialement être représentée avec quelques centaines de cellules ce qui laisse espérer des gains importants grâce aux méthodes d'adaptation de maillage en espace.

Après discrétisations des variables énergétique et angulaire, on est ramené à une équation de transport-réaction. La modélisation du problème physique nous a permis de savoir avec quelles hypothèses nous devions résoudre cette équation et donc chercher des estimateurs d'erreur pour guider le raffinement. Afin de rester dans le cadre théorique, nous avons utilisé des cas simplifiés mais représentatifs des régularités rencontrées dans les cas réalistes. Ainsi, la théorie pouvait être directement confrontée à un cas numérique pour validation.

4. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Un premier estimateur d'erreur E^R a été dérivé et testé numériquement. Il supposait des hypothèses de régularité supérieures à celle de nos cas tests et nous avons pu constater ces limites en particulier lorsque la solution n'était pas continue. Nous avons alors chercher un nouvel estimateur E^{DG} avec des hypothèses plus faibles. Les premiers travaux en ce sens ont été faits dans le cadre des volumes finis. Dans ce contexte, nous avons prouvé un estimateur E^{FV} pour notre équation et avons utilisé des travaux plus récents pour en déduire un nouveau, E^{DG}, dans le cadre des éléments finis discontinus. Cet estimateur, avec des hypothèses minimales, a été analysé sur nos cas tests. En comparant les différents termes le composant, on a pu montrer numériquement que son terme dominant était en fait l'estimateur E^{FV}. E^{DG} a permis de mener efficacement le raffinement dans l'ensemble de nos cas entrainant des gains importants en terme de degrés de liberté. Les premiers tests montraient l'intérêt d'effectuer du $p-$raffinement ou du $h-$raffinement mais avec un ordre au moins égal à 2. Nous avons alors voulu trouver un critère pour choisir de manière systématique entre h et p.

En comparant nos estimateurs E^R et E^{DG} nous avons trouvé un critère pour choisir entre les deux types de raffinement. Un comportement similaire indiqué une zone où la solution était régulière et on effectuait du $p-$raffinement ; dans le cas contraire du $h-$raffinement était fait. Cette stratégie a été comparée à une autre trouvée dans la littérature mais aussi à une troisième méthode très simple basée sur une analyse des vitesses de convergence. On a ainsi pu montrer que pour une certaine fonction représentant le coût du raffinement en terme de degrés de liberté, le $p-$raffinement était meilleur dans un régime pré-asymptotique (valable au moins tant que $p \leq 4$) alors que le $h-$raffinement devenait plus intéressant dans la zone asymptotique. Ces 3 méthodes pour choisir entre les deux types de raffinement ont été testées sur nos cas simplifiés mais aussi sur des exemples plus réalistes. Les résultats sont supérieurs aux stratégies effectuant uniquement du $h-$ ou du $p-$raffinement mais les différentes stratégies ont un résultat équivalent. Ainsi, une méthode basique effectuant du $p-$raffinement initialement puis du $h-$raffinement paraît être suffisante dans notre cas.

Effectuer des tests sur des cas réalistes nécessitait de prendre en compte une dimension supplémentaire : le problème énergétique. Dans un premier temps, nous avons montré que si l'on voulait utiliser le même maillage pour tous les groupes, il n'était pas nécessaire de prendre en compte le couplage existant entre les différents groupes énergétiques. Cette première approche nous a permis d'utiliser tous les enseignements des cas simplifiés pour l'étude d'un cœur. On a ainsi pu montrer tout l'intérêt de cette

procédure et les gains importants engendrés tant en terme de degrés de liberté que de temps de calcul.

Cependant la solution étant très différente suivant l'énergie, nous avons voulu faire évoluer différemment le maillage selon les groupes. Dès lors, il est indispensable de prendre en compte le couplage afin de continuer à garantir la convergence du système. On a alors modifié nos estimateurs et testé différentes méthodes sur des cas simplifiés et réalistes. On montre ainsi l'intérêt d'utiliser différents maillages mais aussi les difficultés associées à cette approche. Une méthode trop approximative peut conduire à dégrader la convergence et devenir moins rapide que la solution à un seul maillage.

Cette thèse a donc permis d'établir de manière rigoureuse des estimateurs d'erreurs pour l'équation de transport en neutronique. Les estimateurs *a priori* nous ont permis de connaître les vitesses de convergence attendues alors que ceux *a posteriori* servent à guider le raffinement. On a pu montrer des gains extrêmement importants par rapport aux méthodes uniformes tant sur le flux que sur la valeur propre du système (k_{eff}).

4.2 Perspectives

Si l'utilisation des méthodes de raffinement de maillage a permis de nombreuses améliorations pour la résolution de l'équation de transport des neutrons, elle a aussi ouvert d'autres pistes constituant autant de perspectives à plus ou moins long terme. Tout d'abord, les 2 estimateurs que nous avons dérivés donnent des indications sur la direction dans laquelle l'erreur est la plus importante. Nous n'avons pas utilisé cette information mais elle pourrait permettre de dire comment découper les cellules. La solution étant relativement isotrope dans le cœur, le gain risque d'être limité.

Les estimations d'erreur pourraient également nous permettre de gagner en temps de calcul en contraignant les différents niveaux d'itérations. En effet, la résolution de l'équation de transport des neutrons requiert 3 niveaux imbriqués d'itérations. Pour l'instant, l'adaptation est déclenchée lorsque le système aux valeurs propres a convergé pour une discrétisation spatiale donnée. De la même manière que le raffinement est effectué entre les différentes itérations externes, il pourrait être intéressant de ne pas attendre la convergence complète des itérations internes avant de lancer le raffinement. En effet, il est inutile de faire trop converger les itérations internes tant que les externes n'ont pas convergé et réciproquement une mauvaise convergence en interne peut

empêcher la convergence du système global. Pour contrôler ces deux aspects, il faut effectuer une analyse d'erreur permettant de borner l'erreur globale composée des erreurs de discrétisation et des itérations à l'aide des résidus et d'un estimateur d'erreur permettant d'évaluer l'erreur de discrétisation. Cela ne modifierait en rien la convergence en terme de degrés de liberté mais pourrait occasionner des gains de temps très importants. Dans les codes de neutronique, le temps de calcul est souvent diminué à l'aide de méthodes d'accélération, comme l'accélération de la diffusion. Ce mécanisme existe avec un solveur de diffusion DG acceptant des maillages non conformes et des ordres de base de polynômes différents (59). Il serait maintenant intéressant de voir l'influence de l'adaptation sur ces méthodes tant d'un point de vue pratique que théorique.

Un autre aspect extrêmement intéressant consiste à renverser le problème et à utiliser des maillages énergétiques différents par zones d'espace. Une étude préliminaire (68) a montré l'intérêt que pouvait avoir une telle approche mais a aussi soulevé de nombreuses interrogations : types d'algorithmes (avec ou sans recouvrement), si recouvrement quelle valeur du flux utiliser dans la zone de recouvrement, comment garantir la convergence de la méthode. Le principal problème restant comment obtenir les sections efficaces du problème homogénéisé avec couplage. Autant de questions dont les réponses ouvriraient la voie vers un raffinement de maillage énergétique suivant les zones d'espace.

5

Annexe 1 : Estimateur d'erreur en discrétisation volumes finis

Dans cette annexe, on démontre le théorème d'estimation d'erreur volume fini (Theorème 3) présenté Section 2.2.2. Pour simplifier l'écriture, on se place en 2D mais ce résultat s'étend au cas tridimensionnel. On considère tout d'abord l'équation de transport résolue sur un demi-plan infini :

$$\begin{cases} \Omega \cdot \nabla u = 0 \\ u(x,0) = u_0(x) \end{cases} \tag{5.1}$$

On peut réécrire Eq. 5.1 sous la forme :

$$\begin{cases} \Omega_x u_x + \Omega_y u_y = 0 \\ u(x,0) = u_0(x) \end{cases} \tag{5.2}$$

On suppose que :

- $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap BV(\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^\star)$
- $\exists U_m, U_M \in \mathbb{R}\, t.q.\, U_m \leq u_0 \leq U_M\, p.p.$
- $u \in BV(\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^\star)$

La triangulation est notée $\mathcal{T}$ et $h = \sup\{diam(K), K \in \mathcal{T}\}$. Les arêtes sont notées h_{ij}^X (resp. h_{ij}^Y) pour les arêtes de la cellule K_i^j dans la direction X (resp. Y).

La discrétisation volumes finis (formulation upwind implicite) d'Eq. 5.2 sur la cellule $K_{i,j}$ est donnée par :

$$\begin{cases} \Omega_y \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_{i+1}^j}{h_{ij}^Y} + \Omega_x \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1}}{h_{ij}^X} = 0 \\ u_{i+1}^0 = \frac{1}{h_{i0}^X} \int_{\partial K_{i,0}^X} u_0(x) dx \end{cases} \tag{5.3}$$

La solution approchée sur la cellule K est notée u_K et définie par :

$$u_K(x,y) = u_i^j \quad \text{si } (x,y) \in K_{i,j} \tag{5.4}$$

5. ANNEXE 1 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION VOLUMES FINIS

Theorème 6. *Il existe* $\mu_\tau \in \mathcal{M}(\mathbb{R})$, $\nu_\tau \in \mathcal{M}(\mathbb{R})$ *et* $\lambda_\tau \in \mathcal{M}(\mathbb{R})$ *tel que :*

$$\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}} |u_K(x,y)-\kappa|\,\Omega\nabla\phi(x,y)dxdy + \Omega_y\int_{\mathbb{R}} |u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx \geq$$
$$-\int_{\mathbb{R}} |\Omega_y\phi(x,0)|\,d\mu_\tau(x) - \int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}} |\Omega_y\phi_y(x,y)|\,d\nu_\tau(x,y) - \int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}} |\Omega_x\phi_x(x,y)|\,d\lambda_\tau(x,y) \tag{5.5}$$

La mesure μ_τ *est la mesure de la densité* $|u_0(.)-u_{\tau,0}(.)|$ *relativement à la mesure de Lebesgue, où* $u_{\tau,0}$ *est défini par* $u_{\tau,0}(x)=u_K^0$, $x\in K$. *Si* $u_0\in BV(\mathbb{R})$, *alors il existe* D_0, *dépendant uniquement de* u_0 *tel que*

$$\mu_\tau(\mathbb{R}) \leq D_0 h \tag{5.6}$$

Pour tout $R>0$ *et* $T>0$, *il existe* C_1 *et* C_2 *ne dépendant que de* Ω, u_0 *et* R *tels que*

$$\nu_\tau(B(0,R)) \leq C_1 h^Y \tag{5.7}$$
$$\lambda_\tau(B(0,R)) \leq C_2 h^X \tag{5.8}$$

Démonstration. En multipliant Eq. 5.3 par $\phi_K = \int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}}\phi(x,y)dxdy$, on obtient :

$$\Omega_y\sum_i\sum_j \frac{u_{i+1}^{j+1}-u_{i+1}^j}{h_{ij}^Y}\iint_{K_{i,j}}\phi(x,y)dxdy + \Omega_x\frac{u_{i+1}^{j+1}-u_i^{j+1}}{h_{ij}^X}\iint_{K_{i,j}}\phi(x,y)dxdy = 0$$
$$\Omega_y T_1 + \Omega_x T_2 = 0 \tag{5.9}$$

avec

$$T_1 = \sum_i\sum_j \frac{u_{i+1}^{j+1}-u_{i+1}^j}{h_{ij}^Y}\iint_{K_{i,j}}\phi(x,y)dxdy \tag{5.10}$$
$$T_2 = \sum_i\sum_j \frac{u_{i+1}^{j+1}-u_i^{j+1}}{h_{ij}^X}\iint_{K_{i,j}}\phi(x,y)dxdy \tag{5.11}$$

Notons :

$$T_{10} = -\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}} |u_K(x,y)-\kappa|\,\phi_y(x,y)dxdy - \int_{\mathbb{R}} |u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx \tag{5.12}$$
$$= -\sum_i\sum_j\iint_{K_{i,j}}\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|\phi_y(x,y)dxdy - \sum_i\int_{\partial K_{i,0}^X}|u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx$$
$$= -\sum_i\sum_j\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|\int_{\partial K_{i,j}^X}\left(\phi(x,y^{j+1})-\phi(x,y^j)\right)dx - \sum_i\int_{\partial K_{i,0}^X}|u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx$$
$$= -\sum_i\sum_j\left(\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|\int_{\partial K_{i,j}^X}\phi(x,y^{j+1})dx - \left|u_{i+1}^{j}-\kappa\right|\int_{\partial K_{i,j}^X}\phi(x,y^{j})dx + \right.$$
$$\left.\left|u_{i+1}^{j}-\kappa\right|\int_{\partial K_{i,j}^X}\phi(x,y^{j})dx - \left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|\int_{\partial K_{i,j}^X}\phi(x,y^{j})dx\right) - \sum_i\int_{\partial K_{i,0}^X}|u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx \tag{5.13}$$

$$
\begin{aligned}
T_{10} &= \sum_i \sum_j \left(\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_{i+1}^{j} - \kappa \right| \right) \int_{\partial K_{i,j}^X} \phi(x, y^j) dx \\
&\quad + \sum_i \left| u_{i+1}^0 - \kappa \right| \int_{K_i} \phi(x,0) dx - \sum_i \int_{K_i} |u_0(x) - \kappa| \, \phi(x,0) dx \\
&= \sum_i \sum_j \frac{\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_{i+1}^{j} - \kappa \right|}{h_{i,j}^Y} \iint_{K_{i,j}} \phi(x, y^j) dx dy \qquad (5.14) \\
&+ \sum_i \int_{K_{i,j}} \left(\left| u_{i+1}^0 - \kappa \right| - |u_0 - \kappa| \right) \phi(x,0) dx \qquad (5.15)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T_{10} - T_1 &= \sum_i \sum_j \frac{\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_{i+1}^{j} - \kappa \right|}{h_{i,j}^Y} \iint_{K_{i,j}} (\phi(x, y^j) - \phi(x,y)) dx dy \\
&+ \sum_i \sum_j \frac{\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_{i+1}^{j} - \kappa \right| - u_{i+1}^{j+1} + u_{i+1}^{j}}{h_{i,j}^Y} \iint_{K_{i,j}} \phi(x,y) dx dy \\
&+ \sum_i \int_{\partial K_{i,j}^X} \left(\left| u_{i+1}^0 - \kappa \right| - |u_0(x) - \kappa| \right) \phi(x,0) dx \qquad (5.16)
\end{aligned}
$$

On réalise de même pour T_{20} défini par :

$$
\begin{aligned}
T_{20} &= - \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} |u_K(x,y) - \kappa| \, \phi_x(x,y) dx dy \qquad (5.17) \\
&= - \sum_i \sum_j \iint_{K_{i,j}} |u_K - \kappa| \, \phi_x(x,y) dx dy \\
&= - \sum_i \sum_j \int_{\partial K_{i,j}^Y} \left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| \left(\phi(x_{i+1}, y) - \phi(x_i, y) \right) dy \\
&= - \sum_i \sum_j \int_{\partial K_{i,j}^Y} \left(\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| \phi(x_{i+1}, y) - \left| u_i^{j+1} - \kappa \right| \phi(x_i, y) \right. \\
&\qquad \left. + \left| u_i^{j+1} - \kappa \right| \phi(x_i, y) - \left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| \phi(x_i, y) \right) dy \\
&= \sum_i \sum_j \iint_{K_{i,j}} \frac{1}{h_{i,j}^X} \left(\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_i^{j+1} - \kappa \right| \right) \phi(x_i, y) dx dy \qquad (5.18)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
T_{20} - T_2 &= \sum_i \sum_j \frac{\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_i^{j+1} - \kappa \right|}{h_{i,j}^X} \iint_{K_{i,j}} (\phi(x_i, y) - \phi(x,y)) dx dy \\
&+ \sum_i \sum_j \frac{\left| u_{i+1}^{j+1} - \kappa \right| - \left| u_i^{j+1} - \kappa \right| - u_{i+1}^{j+1} + u_i^{j+1}}{h_{i,j}^X} \iint_{K_{i,j}} \phi(x,y) dx dy \qquad (5.19)
\end{aligned}
$$

5. ANNEXE 1 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION VOLUMES FINIS

En additionnant Eqs. 5.16 et 5.19, on obtient à l'aide de Lemme 3 :

$$\begin{aligned}
\Omega_x(T_{10}-T_1)+\Omega_y(T_{20}-T_2) &\leq \Omega_y \sum_i \sum_j \frac{\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i+1}^{j}-\kappa\right|}{h_{i,j}^Y} \iint_{K_{i,j}} (\phi(x,y^j)-\phi(x,y))dxdy \\
&+ \Omega_y \int_{\mathbb{R}} \left(|u_{\tau,0}-\kappa|-|u_0(x)-\kappa|\right)\phi(x,0)dx \\
&+ \Omega_x \sum_i \sum_j \frac{\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i}^{j+1}-\kappa\right|}{h_{i,j}^X} \iint_{K_{i,j}} (\phi(x_i,y)-\phi(x,y))dxdy \qquad (5.20) \\
&\leq \sum_i \sum_j \frac{\left|\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i+1}^{j}-\kappa\right|\right|}{h_{i,j}^Y} \iint_{K_{i,j}} \left|\Omega_y(\phi(x,y^j)-\phi(x,y))\right| dxdy \\
&+ \int_{\mathbb{R}} \left||u_{\tau,0}-\kappa|-|u_0(x)-\kappa|\right| \left|\Omega_y\phi(x,0)\right| dx \\
&+ \sum_i \sum_j \frac{\left|\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i}^{j+1}-\kappa\right|\right|}{h_{i,j}^X} \iint_{K_{i,j}} \left|\Omega_x(\phi(x_i,y)-\phi(x,y))\right| dxdy \qquad (5.21) \\
&\leq \sum_i \sum_j \left|u_{i+1}^{j+1}-u_{i+1}^{j}\right| \iint_{K_{i,j}} \left|\Omega_y\phi_y(x,y)\right| dxdy \\
&+ \int_{\mathbb{R}} \left|u_{\tau,0}-u_0(x)\right| \left|\Omega_y\phi(x,0)\right| dx \\
&+ \sum_i \sum_j \left|u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1}\right| \iint_{K_{i,j}} \left|\Omega_x\phi_x(x,y)\right| dxdy \qquad (5.22) \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}} \left|\Omega_y\phi_y(x,y)\right| d\tilde{\nu}_\tau(x,y) + \int_{\mathbb{R}} \left|\Omega_y\phi(x,0)\right| d\mu_\tau(x) \\
&+ \int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}} \left|\Omega_x\phi_x(x,y)\right| d\tilde{\lambda}_\tau(x,y) \qquad (5.23)
\end{aligned}$$

On définit les mesures μ_τ, ν_τ et λ_τ par

$$< \mu_\tau, \psi > = \int_{\mathbb{R}} \left|u_{\tau,0}(x)-u_0(x)\right| \psi(x)dx \qquad (5.24)$$

$$< \tilde{\nu}_\tau, \psi > = \sum_i \sum_j \left|u_i^{j+1}-u_i^j\right| \iint_{K_{i,j}} \psi(x,y)dxdy \qquad (5.25)$$

$$< \tilde{\lambda}_\tau, \psi > = \sum_i \sum_j \left|u_{i+1}^{j+1}-u_i^{j+1}\right| \iint_{K_{i,j}} \psi(x,y)dxdy \qquad (5.26)$$

Eq. 5.9 implique :

$$\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} |u_K(x,y)-\kappa|\,\Omega\nabla\phi(x,y)dxdy+\Omega_y\int_{\mathbb{R}}|u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx \geq$$
$$-\int_{\mathbb{R}}|\Omega_y\phi(x,0)|\,d\mu_\tau(x)-\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}}|\Omega_y\phi_y(x,y)|\,d\nu_\tau(x,y)-\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}}|\Omega_x\phi_x(x,y)|\,d\lambda_\tau(x,y) \tag{5.27}$$

On définit T_{2R} par $T_{2R}=\{K\in\mathcal{T}, K\subset B(0,2R)\}$

$$\begin{aligned}\mu_\tau(\mathbb{R}) &= \int_{\mathbb{R}}|u_0(x)-u_{\tau,0}(x)|\,dx\\ &\leq 4\,|u|_{BV(\mathbb{R})}\,h^X \quad \text{by Lemme 1}\end{aligned} \tag{5.28}$$

$$\begin{aligned}\nu_K\left(B(0,R)\right) &= \sum_{(i,j)\in\tau_{2R}} h^X_{i,j}h^Y_{i,j}\left|u^{j+1}_{i+1}-u^j_{i+1}\right|\\ &\leq \sum_{(i,j)\in\tau_{2R}} h^Y_{i,j}\left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right|h^Y_{i,j}\left|u^{j+1}_{i+1}-u^{j+1}_i\right|\\ &\leq \left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right|\sum_{(i,j)\in\tau_{2R}}(h^Y_{i,j})^2\left|u^{j+1}_{i+1}-u^{j+1}_i\right|\\ &\leq \left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right|\sum_{(i,j)\in\tau_{2R}}(h^Y_{i,j})^2\left|u^{0}_{i+1}-u^{0}_i\right|\\ &\leq 4R\left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right||u_0|_{BV(\mathbb{R})}\,h^Y \quad \text{car} \quad \sum_{(i,j)\in\tau_{2R}}\left|u^0_{i+1}-u^0_i\right|\leq|u_0|_{BV(\mathbb{R})}\end{aligned} \tag{5.29}$$

De même,

$$\lambda_{\tau,K}\left(B(0,R)\right)\leq 4R\,|u_0|_{BV(\mathbb{R})}\,h^X \tag{5.30}$$

□

Lemme 1.

$$\|u-u_\tau\|_{L^1(\mathbb{R})}\leq 4h\,|u|_{BV(\mathbb{R})} \tag{5.31}$$

Démonstration. Voir (29) Lemme 6.8 □

5. ANNEXE 1 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION VOLUMES FINIS

Lemma 3.

$$\Omega_x \frac{\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i+1}^{j}-\kappa\right|}{h_{i,j}^{Y}}+\Omega_y \frac{\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i}^{j+1}-\kappa\right|}{h_{i,j}^{X}} \leq 0 \tag{5.32}$$

Démonstration. Par définition du schéma upwind, on peut écrire :

$$u_{i+1}^{j+1}=u_{i+1}^{j}-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\frac{h_{i,j}^{Y}}{h_{i,j}^{X}}\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1}\right) \tag{5.33}$$

Notons $a \top b$ (resp. $a \bot b$) le maximum (resp. min) entre a and b. En remarquant que Eq. 5.33 est croissante par rapport à u_{i+1}^{j} et u_{i}^{j+1}

$$u_{i+1}^{j+1} \leq u_{i+1}^{j} \top \kappa-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\frac{h_{i,j}^{Y}}{h_{i,j}^{X}}\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1} \top \kappa\right) \tag{5.34}$$

Comme $\kappa=\kappa-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\frac{h_{i,j}^{Y}}{h_{i,j}^{X}}(\kappa-\kappa)$, on obtient :

$$u_{i+1}^{j+1} \top \kappa \leq u_{i+1}^{j} \top \kappa-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\frac{h_{i,j}^{Y}}{h_{i,j}^{X}}\left(u_{i+1}^{j+1} \top \kappa-u_{i}^{j+1} \top \kappa\right) \tag{5.35}$$

On prouve de même que :

$$u_{i+1}^{j+1} \bot \kappa \geq u_{i+1}^{j} \bot \kappa-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\frac{h_{i,j}^{Y}}{h_{i,j}^{X}}\left(u_{i+1}^{j+1} \bot \kappa-u_{i}^{j+1} \bot \kappa\right) \tag{5.36}$$

En soustrayant Eq. 5.35 à Eq. 5.36, on a :

$$\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right| \leq \left|u_{i+1}^{j}-\kappa\right|-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\frac{h_{i,j}^{Y}}{h_{i,j}^{X}}\left(\left|u_{i+1}^{j+1}-\kappa\right|-\left|u_{i}^{j+1}-\kappa\right|\right) \tag{5.37}$$

ce qui termine la démonstration. □

Lemme 2.

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}}\left|u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1}\right| \leq \sum_{i \in \mathbb{Z}}\left|u_{i+1}^{j}-u_{i}^{j}\right| \tag{5.38}$$

Démonstration. Par définition du schéma :

$$\begin{gathered}
h_{i,j}^{X}\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i+1}^{j}\right)+\frac{\Omega_x}{\Omega_y}h_{i,j}^{Y}\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1}\right)=0 \\
\left(h_{i,j}^{X}+\frac{\Omega_x}{\Omega_y}h_{i,j}^{Y}\right)\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1}\right)+h_{i,j}^{X}\left(u_{i}^{j+1}-u_{i+1}^{j}\right)=0 \\
\left(h_{i,j}^{X}+\frac{\Omega_x}{\Omega_y}h_{i,j}^{Y}\right)\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j+1}\right)-\frac{\Omega_x}{\Omega_y}h_{i,j}^{Y}\left(u_{i}^{j+1}-u_{i-1}^{j+1}\right)=h_{i,j}^{X}\left(u_{i+1}^{j+1}-u_{i}^{j}\right) \text{ schéma FV d'ordre } i
\end{gathered} \tag{5.39}$$

Ainsi :

$$\left|u_{i+1}^{j+1}-u_i^{j+1}\right| \leq \frac{\left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right| h_{i,j}^Y}{h_{i,j}^X+\left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right| h_{i,j}^Y}\left|u_i^{j+1}-u_{i-1}^{j+1}\right| + \frac{h_{i,j}^X}{h_{i,j}^X+\left|\frac{\Omega_x}{\Omega_y}\right| h_{i,j}^Y}\left|u_{i+1}^{j}-u_i^{j}\right| \tag{5.40}$$

$$\leq \lambda_i^j\left|u_i^{j+1}-u_{i-1}^{j+1}\right| + (1-\lambda_i^j)\left|u_{i+1}^j-u_i^j\right| \quad \text{avec } 0<\lambda_i^j<1 \tag{5.41}$$

Comme il s'agit d'une combinaison convexe, en sommant selon i, on obtient :

$$\sum_{i\in\mathbb{Z}}\left|u_{i+1}^{j+1}-u_i^{j+1}\right| \leq \sum_{i\in\mathbb{Z}}\left|u_{i+1}^{j}-u_i^{j}\right| \tag{5.42}$$

□

Theorème 7. *Soit $\tilde{u}\in L^\infty(\mathbb{R}\times\mathbb{R}_+^\star)$ tel que $U_m\leq\tilde{u}\leq U_M$ satisfaisant Eq. 5.5. Soit u l'unique solution de Eq. 5.3. Alors, pour tout $R>0$, il existe C_e ne dépendant que de R, Ω, u_0 tel que*

$$\iint_{B(0,R)}|\tilde{u}(x,y)-u(x,y)|\,dxdy \leq C_e\left(\mu_0(S_0)+\sqrt{\nu(S)+\lambda(S)}\right) \tag{5.43}$$

Démonstration. Par hypothèses, on a les 2 inégalités suivantes :

$$\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}|\tilde{u}(x,y)-\kappa|\,\Omega\nabla\phi(x,y)dxdy+\int_{\mathbb{R}}\Omega_y\,|u_0(x)-\kappa|\,\phi(x,0)dx \geq$$
$$-\int_{\mathbb{R}}|\Omega_y\phi(x,0)|\,d\mu_\tau(x)-\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}}|\Omega_y\phi_y(x,y)|\,d\nu_\tau(x,y)-\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}}|\Omega_x\phi_x(x,y)|\,d\lambda_\tau(x,y) \tag{5.44}$$

$$\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left|u(x',y')-\kappa\right|\Omega\nabla\phi(x',y')dx'dy'+\Omega_y\int_{\mathbb{R}}\left|u_0(x')-\kappa\right|\phi(x',0)dx'\geq 0 \tag{5.45}$$

On définit alors le mollifier $\rho_r\in C_c^\infty(\mathbb{R},\mathbb{R})$ qui satisfait les propriétés suivantes :

- $\rho(x)\geq 0 \quad \forall x\in\mathbb{R}$
- $\int_{\mathbb{R}}\rho(x)dx=1$
- $\rho(x)=0 \quad \forall x\in\mathbb{R}_+$
- $r\geq 1$, $\rho_r(x)=r\rho(rx)$

Soient $\psi\in C_c^\infty(\mathbb{R}\times\mathbb{R}_+,\mathbb{R})$ et $\phi:(\mathbb{R}\times\mathbb{R}_+)^2\mapsto\mathbb{R}$ définis par :

$$\phi(x,y,x',y')=\psi(x,y)\rho_r(x-x')\rho_r(y-y') \tag{5.46}$$

5. ANNEXE 1 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION VOLUMES FINIS

On applique Eq. 5.44 avec $\phi(x,y,.,.)$ et $\kappa = u(x',y')$ et on intègre pour $(x',y') \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}_+$

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} \left|\tilde{u}(x,y)-u(x',y')\right| \left(\Omega\nabla\psi(x,y)\rho_r(x-x')\rho_r(y-y')\right.\\
&\qquad\left.+\psi(x,y)\left(\Omega_x\rho_r^{'}(x-x')\rho_r(y-y')+\Omega_y\rho_r(x-x')\rho_r^{'}(y-y')\right)\right)dxdydx'dy'\\
&+\Omega_y\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|u_0(x)-u(x',y')\right|\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(-y')dxdx'dy' \geq\\
&-\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|\Omega_y\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(-y')\right|d\mu(x)dx'dy'\\
&-\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left|\Omega_y\left(\psi_y(x,y)\rho_r(y-y')+\psi(x,y)\rho_r^{'}(y-y')\right)\rho(x-x')\right|d\nu_{\tau,\kappa}(x,y)dx'dy'\\
&-\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left|\Omega_x\left(\psi_x(x,y)\rho_r(x-x')+\psi(x,y)\rho_r^{'}(x-x')\right)\rho(y-y')\right|d\lambda_{\tau,\kappa}(x,y)dydy'
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Alors, Eq. 5.45 avec $\phi(.,.,x',y')$ et $\kappa = \tilde{u}(x,y)$ intégrée pour $(x,y) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}_+$

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} -\left|u(x',y')-\tilde{u}(x,y)\right|\psi(x,y)\\
&\qquad\left(\Omega_y\rho_r(x-x')\rho_r^{'}(y-y')+\Omega_x\rho_r(y-y')\rho_r^{'}(x-x')\right)dxdydx'dy'\\
&+\Omega_y\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|u_0(x')-\tilde{u}(x,y)\right|\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(y)dxdydx' \geq 0
\end{aligned} \tag{5.48}$$

En ajoutant Eqs. 5.47 et 5.48, on obtient :

$$E_{10}+E_{11}+E_{12} \geq -E_2 \tag{5.49}$$

avec

$$E_{10} = \Omega_y\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|u_0(x)-u(x',y')\right|\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(-y')dxdx'dy' \tag{5.50}$$

$$E_{11} = \Omega_y\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|u_0(x')-\tilde{u}(x,y)\right|\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(y)dxdydx' \tag{5.51}$$

$$\begin{aligned}
E_{12} &= \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left|\tilde{u}(x,y)-u(x',y')\right|\Omega\nabla\psi(x,y)\rho_r(y-y')\rho_r(x-x')dxdydx'dy'\\
E_2 &= -\Omega_y\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(-y')\right|d\mu(x)dx'dy'\\
&\quad-\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left|\Omega_y\left(\psi_y(x,y)\rho_r(y-y')+\psi(x,y)\rho_r^{'}(y-y')\right)\rho_r(x-x')\right|d\nu_{\tau,\kappa}(x,y)dx'dy'\\
&\quad-\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left|\Omega_x\left(\psi_x(x,y)\rho_r(x-x')+\psi(x,y)\rho_r^{'}(x-x')\right)\rho_r(y-y')\right|d\lambda_{\tau,\kappa}(x,y)dx'dy'\\
&= -E_{20}-E_{21}-E_{22}
\end{aligned} \tag{5.52}$$

On peut borner une quantité relative à E_{12}

$$\begin{aligned}
&\left|E_{12} - \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\, \Omega\nabla\psi(x,y)dxdy\right| \\
&= \left|\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} \left|\tilde{u}(x,y) - u(x',y')\right| \Omega\nabla\psi(x,y)\rho_r(y-y')\rho_r(x-x')dxdydx'dy' \right. \\
&\left. - \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\, \Omega\nabla\psi(x,y)dxdy\right| \\
&\leq \left(\|\Omega\nabla\psi\|_\infty\right) \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} \Big|\left|\tilde{u}(x,y) - u(x',y')\right| \rho_r(y-y')\rho_r(x-x') \\
&\qquad\qquad - |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\Big| dxdydx'dy' \\
&\leq \left(\|\Omega\nabla\psi\|_\infty\right) \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} \left|\tilde{u}(x,y) - u(x',y')\right| \rho_r(y-y')\rho_r(x-x')dxdydx'dy' \\
&\leq \left(\|\Omega\nabla\psi\|_\infty\right) \epsilon(r,S) \qquad (5.53)
\end{aligned}$$

avec $S = \{(x,y) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^+; \psi(x,y) \neq 0\}$ et

$$\epsilon(r,S) = \sup\left\{\|u - u(.+\eta, .+\tau)\|_{L^1(S)}, |\eta| \leq \frac{1}{r}, 0 \leq \tau \leq \frac{1}{r}\right\} \qquad (5.54)$$

et en utilisant :

$$\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+} \rho_r(x-x')\rho_r(y-y')dx'dy' = 1 \qquad (5.55)$$

Lemme 3 implique :

$$\epsilon(r,S) \leq \frac{|u|_{BV(S)}}{r} \qquad (5.56)$$

Etude des termes de E_2

– Terme E_{20}

$$E_{20} \leq |\Omega_y|\, \|\psi\|_\infty\, |S_0|\, \mu_0(S_0) \qquad (5.57)$$

avec $S_0 = \{x \in \mathbb{R}; \psi(x,0) \neq 0\}$

– Terme E_{21}

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} \left|\Omega_y\left(\psi_y(x,y)\rho_r(y-y') + \psi(x,y)\rho_r'(y-y')\right)\rho_r(x-x')\right| d\nu_{\tau,\kappa}(x,y)dx'dy' \\
&\leq |\Omega_y|\left(\|\psi_y\|_\infty |S|\, \nu_{\tau,\kappa}(S) + \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} \left|\psi(x,y)\rho_r'(y-y')\rho_r(x-x')\right| d\nu_{\tau,\kappa}(x,y)dx'dy'\right) \qquad (5.58)
\end{aligned}$$

De plus,

$$\rho_r(x) = r\rho(rx) \Longrightarrow \rho_r^{'}(x) = r^2\rho^{'}(rx) \tag{5.59}$$

Et,

$$\left|\rho^{'}(rx)\right| \leq \frac{1}{r}\rho_r(x) \tag{5.60}$$

Alors, Eq. 5.58 devient

$$E_{21} \leq |\Omega_y| \left(\|\psi_y\|_\infty |S| \nu_{\tau,\kappa}(S) + \|\psi\|_\infty r\nu_{\tau,\kappa}(S)\right) \tag{5.61}$$

– De même, E_{22} est bornée par :

$$E_{22} \leq |\Omega_y| \left(\|\psi_x\|_\infty |S| \lambda_{\tau,\kappa}(S) + \|\psi\|_\infty r\lambda_{\tau,\kappa}(S)\right) \tag{5.62}$$

Pour analyser E_{10} on considère la fonction test ϕ définie par :

$$\phi(x,x',y') = \psi(x,0)\rho_r(x-x')\int_{y'}^{\infty}\rho_r(-\tau)d\tau \tag{5.63}$$

En injectant cette fonction test dans Eq. 5.45 avec $\kappa = u_0(x)$ et en intégrant par rapport à x, on obtient :

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} -\left|u(x',y') - u_0(x)\right| \psi(x,0)\left(\Omega_y\rho_r(x-x')\rho_r(-y') + \Omega_x\rho_r^{'}(x-x')\int_{y'}^{\infty}\rho_r(-\tau)d\tau\right)dxdx'dy' \\
&+ \Omega_y\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}\left|u_0(x') - u_0(x)\right|\psi(x,0)\rho_r(x-x')\int_0^{\infty}\rho_r(-\tau)dxdx'd\tau \geq 0
\end{aligned} \tag{5.64}$$

$$\begin{aligned}
&-\Omega_x\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{y'}^{\infty}\left|u(x',y') - u_0(x)\right|\psi(x,0)\rho_r^{'}(x-x')\rho_r(-\tau)dxdx'dy'd\tau \\
&-\Omega_y\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(-y')\left|u(x',y') - u_0(x)\right|dxdx'dy' \\
&+\Omega_y\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\psi(x,0)\rho_r(x-x')\rho_r(-\tau)\left|u_0(x') - u_0(x)\right|dxdsd\tau \geq 0
\end{aligned} \tag{5.65}$$

$$E_{15} - E_{10} + E_{16} \geq 0 \tag{5.66}$$

avec

$$E_{15} = -\Omega_x\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\int_{y'}^{\infty}\left|u(x',y') - u_0(x)\right|\psi(x,0)\rho_r^{'}(x-x')\rho_r(-\tau)dxdx'dy'd\tau \tag{5.67}$$

On considère E_{15}^b défini par :

$$-E_{15}^b = \Omega_x \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}} \int_{y'}^{\infty} \left|u(x',y') - u_0(y)\right| \psi(x,0) \rho_r'(x-x') \rho_r(-\tau) dx dx' dy' d\tau \tag{5.68}$$

$$= -\Omega_x \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}} \int_{y'}^{\infty} \left|u(x',y') - u_0(x)\right| \psi_x(x,0) \rho_r(x-x') \rho_r(-\tau) dx dx' dy' d\tau \tag{5.69}$$

$$\leq \frac{|\Omega_x| \, \|\psi_x\|_\infty \, |u|_{BV}}{r} \tag{5.70}$$

En appliquant Lemme 3 avec $\text{supp}(y') = [0, 1/r]$ et $\text{supp}(x - x') = [0, 1/r]$
De plus,

$$E_{15} + E_{15}^b \leq \left| E_{15} + E_{15}^b \right| \tag{5.71}$$

$$\leq |\Omega_x| \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}} \int_{y'}^{\infty} |u_0(y) - u_0(x)| \, \psi(x,0) \rho_r'(x-x') \rho_r(-\tau) dx dx' dy' d\tau \tag{5.72}$$

$$\leq C_{15}^b \epsilon_0(r, S_0) \leq \frac{C_{15}}{r} \tag{5.73}$$

avec $\epsilon_0(r, S_0) = \sup \left\{ \int_{S_0} |u_0(x) - u_0(x+\eta)| \, dx; |\eta| \leq \frac{1}{r} \right\}$
Ainsi,

$$E_{15} \leq \frac{C_{15}}{r} + \frac{|\Omega_x| \, \|\psi_x\|_\infty \, |u|_{BV}}{r} \tag{5.74}$$

$$E_{16} = \Omega_y \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}} \psi(x,0) \rho_r(x-x') \rho_r(-\tau) \left|u_0(x') - u_0(x)\right| dx dx' d\tau \tag{5.75}$$

$$\leq \frac{|\Omega_y| \, \|\psi\|_\infty \, |u_0|_{BV(\mathbb{R})}}{r} \quad \text{by Lemme 3} \tag{5.76}$$

Eq. 5.66 avec Eqs. 5.74 et 5.76 conduit à

$$E_{10} \leq \frac{|\Omega_y| \left(\|\psi\|_\infty \, |u_0|_{BV(\mathbb{R})} + \|\psi_x\|_\infty \, \|u\|_\infty \right)}{r} = \frac{C_{10}}{r} \tag{5.77}$$

De même,

$$E_{11} \leq \frac{C_{11}}{r} \tag{5.78}$$

En combinant les bornes pour E_{11} (Eq. 5.78), E_{12} (Eq. 5.53), E_2 (Eq. 5.57) et E_{10}

(Eq. 5.77), on a :

$$\begin{aligned} &- E_2 - \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\, \Omega\nabla\psi(x,y)dxdy \leq \\ &\frac{C_{10}+C_{11}}{r} + E_{12} - \int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\, \Omega\nabla\psi(x,y)dxdy \leq \\ &\frac{C_{10}+C_{11}}{r} + E_{12} + \frac{C_4}{r} \end{aligned} \tag{5.79}$$

Il s'en suit :

$$-\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}} |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\, \Omega\nabla\psi(x,y)dxdy \leq \frac{C_r}{r} + C_{20}\mu_\tau(S_0) + C_{21}r\nu_{\tau,\kappa}(S) + C_{22}r\lambda_{\tau,\kappa}(S) \tag{5.80}$$

$$\iint_{B(0,R)} |\tilde{u}(x,y) - u(x,y)|\, dxdy \leq C_{20}\mu_0(S_0) + \frac{C_r}{r} + C_{21}r\nu_{\tau,\kappa}(S) + C_{22}r\lambda_{\tau,\kappa}(S) \tag{5.81}$$

On conclut en prenant $r = \frac{1}{\sqrt{\nu_{\tau,\kappa}(S)+\lambda_{\tau,\kappa}(S)}}$. □

Lemme 3. *Soit $u \in BV_{loc}(\mathbb{R})$, $p \in \mathbb{N}^\star$, c'est-à-dire $u \in L^1_{loc}(\mathbb{R})$ et la restriction de u à Ω appartient à $BV(\Omega)$ pour tout sous-ensemble ouvert borné Ω de $\mathbb{R}$.*
Alors, pour tout sous-ensemble borné Ω de $\mathbb{R}$ et pour tout $a > 0$

$$\|u(.,\eta) - u\|_{L^1(\Omega)} \leq |\eta|\, |u|_{BV(\Omega_a)}\ , \quad \forall \eta \in \mathbb{R}, |\eta| \leq a \tag{5.82}$$

où $\Omega_a = \{x \in \mathbb{R}; d(x,\Omega) < a\}$ et $d(x,\Omega) = \inf\{|x-y|, y \in \Omega\}$ est la distance de x à Ω

Démonstration. Voir (29) Lemme 6.9 □

Theorème 8. *Les Theorèmes 6 et 7 impliquent directement :*

$$\iint_{B(0,R)} \left|u_(x,y) - \tilde{u}(x,y)\right| \leq C_e\sqrt{h^X + h^Y} \tag{5.83}$$

Remarque 8. *Le résultat reste valide si l'on rajoute le terme de réaction dans Eq. 5.1. La démonstration est identique et l'ajout de ce terme ne pose aucun problème supplémentaire.*

Remarque 9. *Ce résultat a été démontré dans le cadre d'un milieu semi-infini. Il s'étend à un domaine rectangulaire. Il suffit pour cela d'appliquer Theorème 8 avec comme condition aux limites :*

$$\begin{aligned} u(x,0) &= u_0^Y(x - \tfrac{\Omega_y}{\Omega_x}x) \quad sur \quad]-\infty, 0] \\ u(x,0) &= u_0^X(x) \quad sur \quad [0,\infty[\end{aligned} \tag{5.84}$$

6

Annexe 2 : Estimateur d'erreur en discrétisation Galerkin discontinu

On démontre ici le résultat d'estimation d'erreur Theorème 4. On étudie l'équation de transport-réaction du problème modèle 1 (Chapitre 2) qui s'écrit dans le cas du demi-plan infini en dimension 2 :

$$\begin{cases} \nabla \cdot f(u) + cu = g \quad \text{dans } \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \\ u(x,0) = u_0(x) \quad \text{sur } \mathbb{R} \end{cases} \tag{6.1}$$

On étudie le transport linéaire donc $f = \Omega u$ et on suppose que :

- $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap W^{1,1}(\mathbb{R})$
- $\exists U_m, U_M \in \mathbb{R}\ t.q.\ U_m \leq u_0 \leq U_M\ p.p.$
- $u \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap W^{1,1}(\mathbb{R})$
- c fonction constante par morceaux
- $g \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap W^{1,1}(\mathbb{R})$

Une solution faible entropique d'Eq. 6.1 est une solution faible d'Eq. 6.1 qui vérifie pour toutes les paires entropiques (S, F_S)

$$-\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} F_S(u)\cdot\nabla\phi - \int_{\mathbb{R}} S(u_0)\phi(x,0) - \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} cuS'(u)\phi + \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} gS'(u)\phi \leq 0 \quad \forall \phi \in C_0^1(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+, \mathbb{R}^+) \tag{6.2}$$

(S, F_S) est une paire entropique pour Eq. 6.1 si et seulement si S est convexe et $F_S' = S'f'$.

Definition 3. Soit $u \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$, le résidu entropique est donné par

$$\langle R_S(u), \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} F_S(u)\cdot\nabla\phi + \int_{\mathbb{R}} S(u_0)\phi(\cdot,0) + \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} cuS'(u)\phi - \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} gS'(u)\phi$$

6. ANNEXE 2 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION GALERKIN DISCONTINU

L'entropie standard de Kruzkov S est donnée par $S(v) = S(v-k) = |v-k|$. Pour cette démonstration on a besoin d'une entropie régularisée. Soit $\overline{S} \in C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R}^+)$ définie par

$$\overline{S}(v) = \begin{cases} (6v^2 - v^4)/8 & \text{si } |v| \leq 1 \\ |v| - 3/8 & \text{sinon} \end{cases}$$

Pour tout $\delta > 0$, $v \in \mathbb{R}$ et $k \in \mathbb{R}$, S_δ et $F_{S,\delta}$ sont définis par :

$$\begin{aligned} S_\delta(v) &= \delta \overline{S}(\frac{v}{\delta}) \\ F_{S,\delta}(v,k) &= \int_k^v f^{'}(w) S_\delta^{'}(w-k) dw \end{aligned}$$

Le maillage est noté $\mathcal{T}$ avec des volumes de contrôle T_j et $h = \sup\{diam(K), K \in \mathcal{T}\}$. L'intersection entre T_j and T_l est noté S_{jl} avec une normale orientée ν_{jl}. L'ensemble des arêtes voisines de T_j est noté $N(j)$. Les arêtes entrantes (resp. sortantes) sont notées $\partial\kappa^-$ (resp. $\partial\kappa^+$).

Sur $\mathcal{T}$, l'espace des polynômes discontinus de degré inférieur ou égal à p est

$$V_h^p = \left\{ v_h \in BV(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+) \text{ s.t. } v_{h\,|\mathcal{T}_j} \in \mathbb{P}_p \,,\ \forall T_j \in \mathcal{T} \right\}$$

La discrétisation Galerkin est obtenue en multipliant Eq. 6.1 par une fonction test $v_h \in L^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+) \cap W^{1,1}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+)$ et en intégrant par parties sur chaque élément T_j

$$-\int_{T_j} u_j \Omega \cdot \nabla v_j + \sum_{l \in N(j)} \int_{S_{jl}} \nu_{jl} \cdot F(u_j, u_l) v_j + \int_{T_j} c_j u_j v_j = \int_{T_j} g_j v_j \qquad (6.3)$$

Dans la formulation upwind, F est le flux numérique défini par (cf. Section 1.2.3) :

$$F(u_j, u_l) = \begin{cases} \Omega u_0 \ \in \partial\kappa^- \cap \Gamma^- \\ \Omega u_l \ \in \partial\kappa^- \backslash \Gamma^- \\ \Omega u_j \ \in \partial\kappa^+ \end{cases}$$

où u_j est la solution à l'intérieur de la cellule T_j et u_l la valeur à l'extérieur (provenant de la cellule T_l).

Dans la suite, on note

$$\begin{aligned} f_{jl} &= \nu_{jl} \cdot F(u_j, u_l) \\ \langle u, v \rangle_{T_j} &= \int_{T_j} uv \\ \overline{u_j} &= \frac{1}{|T_j|} \int_{T_j} u_j \end{aligned}$$

Ainsi, Eq. 6.3 s'écrit :

$$\sum_{l\in N(j)} \langle f_{jl}(u_j,u_l),v_j\rangle_{S_{jl}} - \langle f(u_j),\nabla v_j\rangle_{T_j} + c\langle u_j,v_j\rangle_{T_j} = \langle g_j,v_j\rangle_{T_j} \quad \forall v_j\in\mathbb{P}_p,\ T_j\in\mathcal{T}$$

Dans cette annexe, on prouve le résultat suivant inspiré de (21) :

Theorème 9. *Soit u_h solution de Eq. 6.3 et u de Eq. 6.1. On a l'estimation d'erreur suivante :*

$$\|u_h-u\|_{L^1(B_R(x_0))} \le \eta_h = \sqrt{K_1\eta_1}+\sqrt{K_2\eta_2}$$

où $\eta_i=\sum_{j\in J}\eta_{i,j}$, $i=1,2$ et les contributions locales à l'erreur sont données par :

$$\begin{aligned}
\eta_{1,j} &= \int_{T_j} h_j\,|\Omega\cdot\nabla u_j + c_j u_j - g_j| + \sum_{l\in N(j)} h_{jl}\int_{S_{jl}} |\Omega\cdot\nu_{jl}|\,|u_j-u_l| \\
\eta_{2,j} &= \|\overline{u_j}-u_j\|_{L^\infty(T_j)}\int_{T_j}|\Omega\cdot\nabla u_j + c_j u_j - g_j| + \sum_{l\in N(j)}\|\overline{u_j}-u_j\|_{L^\infty(S_{jl})}\int_{S_{jl}}|\Omega\cdot\nu_{jl}|\,|u_j-u_l|
\end{aligned}$$

Lemme 4. *Soient (S,F_S) une paire d'entropie régulière et u_h solution de Eq. 6.3. Alors*

$$I_j = I_{1,j}+I_{2,j}+I_{3,j}+I_{4,j} = -D_j \le 0 \tag{6.4}$$

avec, pour tout $\phi\in C_0^1(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+,\mathbb{R}^+)$,

$$\begin{aligned}
I_{1,j} &= \langle \nabla\cdot f(u_j) + c_j u_j - g_j, S'(u_j)\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} \\
I_{2,j} &= \sum_{l\in N(j)} \langle F_{jl}(u_j,u_l) - F_S(u_j)\cdot\nu_{jl}, \overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} \\
I_{3,j} &= \langle \nabla\cdot f(u_j) + c_j u_j - g_j, \left(S'(\overline{u_j})-S'(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} \\
I_{4,j} &= \sum_{l\in N(j)} \langle f_{jl}(u_j,u_l) - f(u_j)\cdot\nu_{jl}, \left(S'(\overline{u_j})-S'(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}}
\end{aligned}$$

où l'on a noté $\nu_{jl}\cdot F_{jl}(\alpha,\beta) = \int_\alpha^\beta \partial_s f_{jl}(\alpha,s)S'(s)ds + \nu_{jl}\cdot F_S(\alpha)$ un flux entropique discret consistant avec F_S.

Démonstration. On applique Eq. 6.3 avec $v_h = S'(\overline{u_h})\overline{\phi_h}$ et on intègre par parties :

$$\begin{aligned}
0 = {} & \langle \nabla\cdot f(u_j), S'(\overline{u_j})\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} + c_j\langle u_j, S'(\overline{u_j})\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} - \langle g_j, S'(\overline{u_j})\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} \\
& + \sum_{l\in N(j)} \langle f_{jl}(u_j,u_l), S'(\overline{u_j})\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} - \sum_{l\in N(j)} \langle f(u_j)\cdot\nu_{jl}, S'(\overline{u_j})\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}}
\end{aligned} \tag{6.5}$$

6. ANNEXE 2 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION GALERKIN DISCONTINU

En réorganisant les termes d'Eq. 6.5 en ajoutant et soustrayant les mêmes quantités, on a :

$$
\begin{aligned}
0 = & \overbrace{\sum_{l\in N(j)} \langle f_{jl}(u_j,u_l) - f(u_j)\cdot\nu_{jl}, \left(S^{'}(\overline{u_j}) - S^{'}(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}}}^{\mathbf{I_{4,j}}} \\
& + \sum_{l\in N(j)} \langle f_{jl}(u_j,u_l) - f(u_j)\cdot\nu_{jl}, S^{'}(u_j)\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} \\
& + \underbrace{\langle \nabla\cdot f(u_j) + c_j u_j - g_j, S^{'}(u_j)\overline{\phi_j}\rangle_{T_j}}_{\mathbf{I_{1,j}}} + \underbrace{\langle \nabla\cdot f(u_j) + c_j u_j - g_j, \left(S^{'}(\overline{u_j}) - S^{'}(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{T_j}}_{\mathbf{I_{3,j}}}
\end{aligned}
\tag{6.6}
$$

De plus,

$$
\begin{aligned}
\left(f_{jl}(u_j,u_l) - f(u_j)\cdot\nu_{jl}\right) S^{'}(u_j) &= \int_{u_j}^{u_l} \partial_w f_{jl}(u_j,w)dw S^{'}(u_j) \\
&= \int_{u_j}^{u_l} \partial_w f_{jl}(u_j,w) S^{'}(w)dw + \int_{u_j}^{u_l} \partial_w f_{jl}(u_j,w)\left(S^{'}(u_j) - S^{'}(w)\right)dw \\
&= \left(F_{jl}(u_j,u_l) - F_S(u_j,u_j)\right)\cdot\nu_{jl} + \int_{u_j}^{u_l} \partial_w f_{jl}(u_j,w)\int_w^{u_j} S^{''}(s)dsdw
\end{aligned}
\tag{6.7}
$$

En notant :

$$
D_j = \sum_{l\in N(j)} \langle \int_{u_j}^{u_l} \partial_w f_{jl}(u_j,w)\int_w^{u_j} S^{''}(s)dsdw, \overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} \tag{6.8}
$$

$$
I_{2,j} = \sum_{l\in N(j)} \langle \left(F_{jl}(u_j,u_l) - F_S(u_j,u_j)\right)\cdot\nu_{jl}, \overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} \tag{6.9}
$$

on obtient Eq. 6.4 en remarquant que $D_j > 0$ car S est convexe et le flux numérique est monotone. □

Lemme 5. *Soient u_h solution d'Eq. 6.3 et u d'Eq. 6.1. Alors, pour tout $\phi \in C_0^1(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+,\mathbb{R}^+)$,*

$$
\langle R_S(u_h),\phi\rangle \geq T_1 + T_2 + T_3 + T_4 \tag{6.10}
$$

avec

$$
T_1 = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} \left(\nabla\cdot f(u_h) + cu_h - g\right) S^{'}(u_h)\left(\overline{\phi_h} - \phi\right) \tag{6.11}
$$

$$
T_2 = \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} \langle F_{jl}(u_j,u_l) - F_S(u_j,u_j)\cdot\nu_{jl}, \overline{\phi_h} - \phi\rangle_{S_{jl}} \tag{6.12}
$$

$$
T_3 = \sum_{j\in J} \langle \nabla\cdot f(u_j) + c_j u_j - g_j, \left(S^{'}(\overline{u_j}) - S^{'}(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} \tag{6.13}
$$

$$
T_4 = \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} \langle f_{jl}(u_j,u_l) - f(u_j)\cdot\nu_{jl}, \left(S^{'}(\overline{u_j}) - S^{'}(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} \tag{6.14}
$$

Démonstration.

$$\begin{aligned}
\langle R_S(u_h),\phi\rangle &\geq \langle R_S(u_h),\phi\rangle + \sum_{j\in J} I_j \quad \text{par le Lemme 4}\\
&\geq -\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} \left(\nabla\cdot f(u_h) + cu_h - g\right) S^{'}(u_h)\cdot\phi \\
&\qquad + \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} \langle F_S(u_j,u_j)\cdot\nu_{jl},\phi\rangle + \sum_{j\in J} I_j \quad \text{en intégrant par parties}\\
&\geq T_1 + T_2 + T_3 + T_4 \quad \text{en utilisant les notations de Lemme 4}
\end{aligned}$$

□

Lemme 6. *On a les estimations sur le résidu suivantes :*

$$|T_1+T_2| \leq \left\|S^{'}\right\|_{L^\infty} \|\nabla\phi\|_{L^\infty} \sum_{j\in J}\eta_{1,j} \tag{6.15}$$

$$|T_3+T_4| \leq \left\|S^{''}\right\|_{L^\infty} \|\phi\|_{L^\infty} \sum_{j\in J}\eta_{2,j} \tag{6.16}$$

$$\tag{6.17}$$

où les $\eta_{i,j}$ sont definis au Theorème 9.

Démonstration. On analyse les T_i, $i=[1,4]$ permettant de borner le résidu

– Terme T_1

Comme $\phi\in C_0^1(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+,\mathbb{R}^+)$, on a

$$\left|\langle\overline{\phi}-\phi\rangle_{T_j}\right| \leq h_j \|\nabla\phi\|_{L^\infty}(T_j) \tag{6.18}$$

Donc

$$|T_1| \leq \left\|S^{'}\right\|_{L^\infty} \|\nabla\phi\|_{L^\infty} \sum_{j\in J} h_j \int_{T_j} |\nabla f(u_j) + c_j u_j - g_j| \tag{6.19}$$

– Terme T_2

$$\begin{aligned}
T_2 &= \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} \langle F_{jl}(u_j,u_l) - F_S(u_j,u_j)\cdot\nu_{jl}, \overline{\phi_h}-\phi\rangle_{S_{jl}}\\
|T_2| &= \left|\sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} \int_{S_{jl}}\int_{u_j}^{u_l} \partial_s f_{jl}(u_j,s) S^{'}(s) ds (\overline{\phi_j}-\phi)\right|\\
&\leq \left\|S^{'}\right\|_{L^\infty}\|\nabla\phi\|_{L^\infty} \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} h_{jl}\int_{S_{jl}} |f_{jl}(u_j,u_l) - f_{jl}(u_j,u_j)|\\
&\leq \left\|S^{'}\right\|_{L^\infty}\|\nabla\phi\|_{L^\infty} \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)} h_{jl}\int_{S_{jl}} |\Omega\cdot\nu_{jl}|\,|u_j-u_l| \qquad (6.20)
\end{aligned}$$

– Terme T_3

$$\begin{aligned} T_3 &= \sum_{j\in J}\langle \nabla\cdot f(u_j)+c_j u_j-g_j, \left(S^{'}(\overline{u_j})-S^{'}(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{T_j} \\ &= \sum_{j\in J}\int_{T_j}(\nabla\cdot f(u_j)+c_j u_j-g_j)\,\overline{\phi_j}\int_{u_j}^{\overline{u_j}} S^{''}(w)dw \\ |T_3| &\leq \left\|S^{''}\right\|_{L^\infty}\|\phi\|_{L^\infty}\sum_{j\in J}\|\overline{u_j}-u_j\|_{L^\infty}\int_{T_j}|\nabla\cdot f(u_j)+c_j u_j-g_j| \quad (6.21) \end{aligned}$$

– Terme T_4

$$\begin{aligned} T_4 &= \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)}\langle f_{jl}(u_j,u_l)-f(u_j)\cdot\nu_{jl}, \left(S^{'}(\overline{u_j})-S^{'}(u_j)\right)\overline{\phi_j}\rangle_{S_{jl}} \\ &= \sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)}\int_{S_{jl}}(f_{jl}(u_j,u_l)-f(u_j)\cdot\nu_{jl})\,\overline{\phi_j}\int_{u_j}^{\overline{u_j}} S^{''}(w)dw \\ &\leq \left\|S^{''}\right\|_{L^\infty}\|\phi\|_{L^\infty}\sum_{j\in J}\sum_{l\in N(j)}\|\overline{u_j}-u_j\|_{L^\infty}\int_{S_{jl}}|\Omega\cdot\nu_{jl}|\,|u_j-u_l| \quad (6.22) \end{aligned}$$

On conclut en combinant les 4 bornes sur les T_i.

□

Lemma 4. *Soient $u\in L^1_{loc}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+)$ solution de Eq. 6.1 et $u_h\in L^1_{loc}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+)$. Soient $S(v)=S(v-k)=S_\delta(v-k)$ l'entropie $\delta-$régularisée et $F_S(v)=F_S(v-k)=F_{S,\delta}(v-k)$ le flux entropique correspondant. Soit Ψ une fonction test non-négative appartenant à $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ et supposons que u_h satisfait :*

$$\begin{aligned} -\langle R_S(u_h),\Psi\rangle &= -\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}F_S(u_h,k)\cdot\nabla\Psi dx-\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}(cu_h-g)S^{'}(u_h,k)\Psi dx \\ &\leq \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\left(\beta_0(x)B_0(\Psi)+\sum_j\beta_H^j(x)B_H^j\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x_j}\right)\right)dx, \quad \forall\, k\in\mathbb{R} \quad (6.23) \end{aligned}$$

où β_0, β_H^j sont des fonctions dans $L^1_{loc}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+)$ non-négatives, $k-$indépendante mais éventuellement $\delta-$dépendante.
Soit $\Delta>0$ fixé, et $\mathfrak{T}_h=\bigcup_j T_j$ une décomposition donnée de $\mathbb{R}^d$ en éléments T_j tels que diam$(T_j)\leq\Delta$ et pour tout $x\in\mathbb{R}^d$

$$|B_0(\Psi)(x)|\leq C\sup_{x^{'}\in\mathfrak{T}_h}\left|\Psi(x^{'})\right|, \quad \left|B_H^j(\frac{\partial\Psi}{\partial x_j})(x)\right|\leq C\sup_{x^{'}\in\mathfrak{T}_h}\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x_j}(x^{'})\right| \quad (6.24)$$

où C est une constante indépendante de Ψ et de $\mathfrak{T}_h$.

On a alors l'estimation suivante : pour tout $x_0 \in \mathbb{R}^d$, $R > 0$, avec $M = Lip(f)$, on a :

$$\int_{|x-x_0|<R} |u_h(x) - u(x)| \leq CMTV(u_0)\Delta + Ck_1 TV(u_0)\delta + C \int_{x\in B_\Delta} \left(\beta_0(x) + \frac{1}{\Delta} \sum_{j=1}^{d} \beta_H^j(x) \right) dx \tag{6.25}$$

avec $B_\Delta = B(x_0, R + 2\Delta)$.

Démonstration. Soient Φ, $\zeta \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ deux fonctions non-négatives et on définit :

$$\phi(x, y) = \Phi(x)\zeta(x - y) \tag{6.26}$$

On choisit Φ de sorte que toutes les composantes du gradient soient positives.
En appliquant Eq. 6.23 pour $\phi(\cdot, y)$ avec $y \in \mathbb{R}^d$ fixé et $k = u(y)$, on obtient :

$$-\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} F_S(u_h(x), u(y)) \cdot \nabla\phi(x, y) dy dx - \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} (cu_h - g) S'(u_h, k)\phi dx \leq \underbrace{\iint \left(\beta_0(x) B_0(\phi(x, y)) + \sum_j \beta_H^j B_H^j(x) \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_j}(x, y) \right) \right) dy dx}_{R^\beta}$$

De plus, en utilisant Eq. 6.26 pour ϕ :

$$\begin{aligned}
&F_S(u_h(x), u(y)) \cdot \nabla\phi(x, y) + (c(x)u_h(x) - g(x))S'(u_h(x), u(y))\phi(x, y) \\
&\quad = F_S(u_h(x), u(y)) \cdot (\nabla_x\Phi(x)\zeta(x - y) + \Phi(x)\nabla_x\zeta(x - y)) \\
&\qquad + (c(x)u_h(x) - g(x))S'(u_h(x), u(y))\Phi(x)\zeta(x - y) \\
&\quad = -(F_S(u_h(x), u(y)) - F_S(u(y), u_h(x))) \cdot \nabla_y\zeta(x - y)\Phi(x) \\
&\quad + F_S(u_h(x), u(y)) \cdot \nabla_x\Phi(x)\zeta(x - y) \\
&\quad + (c(x)u_h(x) - g(x)) \left(S'(u_h(x), u(y)) + S'(u(y), u_h(x)) \right) \Phi(x)\zeta(x - y) \\
&\quad - F_S(u(y), u_h(x)) \cdot \nabla_y\zeta(x - y)\Phi(x) \\
&\quad - (c(x)u_h(x) - g(x))S'(u(y), u_h(x))\Phi(x)\zeta(x - y)
\end{aligned} \tag{6.27}$$

La somme des 2 dernières lignes est positive car u est solution entropique. Alors, Eq. 6.27 devient :

$$-\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} F_S(u_h(x), u(y)) \cdot \nabla_x\Phi(x)\zeta(x - y) dy dx \leq R^\beta + R^s + R^\sigma \tag{6.28}$$

avec

$$R^s = -\iint (F_S(u_h(x), u(y)) - F_S(u(y), u_h(x))) \cdot \nabla_y\zeta(x - y)\Phi(x) dy dx \tag{6.29}$$

$$R^\sigma = \iint \left(S'(u_h(x), u(y)) + S'(u(y), u_h(x)) \right) (c(x)u_h(x) - g(x))\Phi(x)\zeta(x - y) \tag{6.30}$$

$$= 0 \quad \text{car } S' \text{ est une fonction paire} \tag{6.31}$$

Et,

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} F_S(u_h(x),u(y))\cdot\nabla_x\Phi(x)\zeta(x-y)dydx \\
&\quad\leq -\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} |F_S(u_h(x),u(y))|\cdot\nabla_x\Phi(x)\zeta(x-y)dydx \qquad (6.32)\\
&\quad\leq -M\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} S(u_h(x)-u(y))\cdot\nabla_x\Phi(x)\zeta(x-y)dydx \\
&\quad\leq -M\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\left(\int_{u_h(x)-u(x)}^{u_h(x)-u(y)} S^{'}(w)dw + S(u_h(x)-u(x))\right)\cdot\nabla_x\Phi(x)\zeta(x-y)dydx \qquad (6.33)
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$|F_S(v,w)| = \left|\int_w^v f^{'}(s)S^{'}(v-w)ds\right| \leq M\int_w^v S^{'}(v-w)ds = MS(v-w) \qquad (6.34)$$

Comme S est lipschitzien de constante 1, on obtient :

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} F_S(u_h(x),u(y))\cdot\nabla_x\Phi(x)\zeta(x-y)dydx \leq -M\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} |u_h(x)-u(x)|\,div(\Phi(x))\zeta(x-y)dydx \\
\underbrace{-M\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} |u(x)-u(y)|\,div(\Phi(x))\zeta(x-y)dydx}_{R^x} \qquad (6.35)
\end{aligned}$$

En combinant Eq. 6.28 et Eq. 6.35 on trouve :

$$\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^+} |u_h(x)-u(x)|\,div(\Phi(x))\zeta(x-y)dydx \leq R^\beta + R^s + R^x \qquad (6.36)$$

Les bornes pour les termes R^x, R^β et R^s sont données dans (14, 20) :

$$|R^s| \leq C\left\|F^{''}\right\|_\infty k_1 TV(u_0)\delta \qquad (6.37)$$

$$|R^x| \leq CMTV(u_0)\Delta \qquad (6.38)$$

ce qui termine la démonstration. □

Démonstration du Theorème 9. Les Lemmes 5 et 6 montrent que u_h satisfait les hypothèses du Lemme 4 avec

$$\beta_0|_{T_j} = \frac{1}{|T_j|}\left\|S^{''}\right\|_{L^\infty}\eta_{2,j} \qquad (6.39)$$

$$\sum_k \beta_H^k|_{T_j} = \frac{1}{|T_j|}\eta_{1,j} \qquad (6.40)$$

La définition de l'entropie $S = S_\delta$ donne $\left\|S''\right\| \leq \frac{K_S}{\delta}$. Alors, Theorème 9 se déduit du Lemme 4 avec les paramètres

$$\Delta = \sqrt{\frac{\sum_{j\in J}\eta_{1,j}}{K_1}} \quad \delta = \sqrt{\frac{\sum_{j\in J}\eta_{2,j}}{K_2}} \tag{6.41}$$

avec $K_1 = MTV(u_0)$ et $K_2 = K_S^{-1}k_1TV(u_0)$.

□

6. ANNEXE 2 : ESTIMATEUR D'ERREUR EN DISCRÉTISATION GALERKIN DISCONTINU

7

Annexe 3 : Proceeding M&C, méthodes de raffinement hp

Cette partie est un proceeding de la conférence M&C qui s'est déroulé à Rio de Janeiro du 8 au 12 mai 2011 : D. Fournier, R. Le Tellier, R. Herbin, C. Suteau, "Analysis of a hp-Refinement Method for Solving the Neutron Transport Equation using Two Error Estimators". On présente ici des éléments afin de choisir entre le raffinement en espace et en ordre. Une analyse plus complète est à lire dans (33).

7.1 Introduction

Adaptive Mesh Refinement (AMR) method is increasingly used in various fields (67) in order to improve convergence and/or reduce the computational efforts. This is of particular interest for the simulation of cores with homogenized assemblies in transport theory due to the dimensionality of the problem and embedded iterations required to solve it. Actually, once this equation has been discretized according to the energy with a multigroup approach and to the angle by a discrete ordinate method, a set of coupled transport equations has to be solved. The flux ϕ_n^g in the group g and direction $\vec{\Omega}_n$ satisfies (52)

$$\vec{\Omega}_n \cdot \vec{\nabla}\phi_n^g(\vec{r}) + \Sigma_t^g(\vec{r})\phi_n^g(\vec{r}) = \sum_{g'}\sum_{n'} Q_{n'\to n}^{g'\to g}(\vec{r}) \tag{7.1}$$

where Σ_t^g is the total cross-section in group g and $Q_{n'\to n}^{g'\to g}(\vec{r})$ is the neutron source containing the sources resulting from scattering and fission. In the following, the energy g and angular n indices are omitted unless necessary for the sake of clarity.

To enable $hp-$ refinement process, a Discontinuous Galerkin Finite Element Method (DGFEM) is implemented. The domain is decomposed into a Cartesian grid which can be non-conforming, *i.e.* a node can be located on an edge (or a face in 3D), in order to perform $h-$refinement. In each cell, the solution of Eq. 7.1 is approximated on a hierarchical polynomial basis (82) allowing to easily implement $p-$refinement. A criterion for the choice between the two types of refinement has to be addressed.

An approach has been proposed in (91) for the multigroup diffusion equations. Wang and coworkers compared the flux $\phi_{h,p}$ with the flux $\phi_{\frac{h}{2},p+1}$ obtained by increasing the polynomial basis order and dividing the mesh size. This method leads to an exponential rate of convergence but requires the computation of two numerical solutions. Prior to this work, Bey proposed $hp-$methods based on mesh-dependent norms (13) and Houston used the dual problem in order to perform $hp-$refinement to minimize a given functional (41).

In this work, we want to avoid the calculation of additional numerical solutions and to use the regularity of the solution in order to choose between $h-$ and $p-$refinement. In (19), Cockburn shows that the L^2-norm of the error converges as $\mathcal{O}\left(h^{\min(p+1,s)}\right)$, where h is related to the mesh size, p is the polynomial basis order and s the regularity

of the solution ($\phi \in H^s$). An illustration of this theoretical bound is discussed in Section 7.2 in order to study the impact of both types of refinements on the convergence for analytically discontinuous solutions and continuous solutions with non-continuous first derivatives. These two cases encompasses the regularity conditions encountered in real core calculations. As regularity seems important to control the rate of convergence, two estimators are used in the following. The first one (3), presented in Section 7.3, requires high regularity hypotheses whereas the finite volume inspired estimator described in Section 7.4 is derived without any regularity assumptions. Their comparison is done in Section 7.5 leading to strategies to choose between $h-$ and $p-$refinement which are then tested and compared in Section 7.6.

7.2 Analysis of Refinement Strategies

Considering a given group g and angular direction n, the spatial error $e_{p,h}$ is defined as the difference between the exact solution Φ and the computed one ϕ_h in the V_h^p-space

$$e_{p,h} = \Phi - \phi_h \quad \text{with } \phi_h \in V_h^p = \left\{ v \in L^2(\mathcal{D}) \text{ s.t. } \forall \kappa,\ v_{|\kappa} \in \mathbb{Q}_p \right\} \tag{7.2}$$

where $\mathbb{Q}_p$ denotes the space of polynomial of degree at most p.

The convergence analysis is performed as a function of the number of degrees of freedom dof. If the spatial mesh is decomposed into parallelograms κ and $\phi_{h|\kappa} \in \mathbb{Q}_p$, dof is defined by

$$dof = \sum_{\kappa \in \mathcal{D}} (p_\kappa + 1)^d \tag{7.3}$$

where p_κ represents the polynomial basis order on cell κ and $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ $(d = 2, 3)$ is the complete spatial mesh. We shall also analyze the influence of the refinement strategy on the computational time for some numerical cases. The relationship between dof and time is generally not possible to establish in a general framework.

We denote by $\epsilon_{p,h}$ the L^2-norm of $e_{p,h}$ and analyze its convergence versus dof when $h-$ or $p-$refinements are performed. The comparison is done on benchmarks with solutions of escalating degrees of smoothness obtained in the framework of the Method of Manufactured Solutions (MMS) (54). The domain contains only one medium with $\Sigma_t = 1$ and $\Sigma_s = 0$. Two configurations are of particular interest :

- The MMS0 benchmark generates non continuous solutions. It corresponds to the regularity obtained for cores with embedded void regions. It is obtained by imposing a discontinuous flux at incoming boundaries, leading to a discontinuous

solution along the characteristic lines. As an S_2 quadrature is used, the characteristics are the two diagonal lines.

– The MMS1 benchmark generates continuous solutions but with discontinuous first derivatives by imposing a constant incoming flux. As for the MMS0, the non-regularity is located on the characteristic lines. This case is of particular interest because the regularity of the solution is near from the one observed in real core configurations.

As mentionned in the introduction, assuming that Φ belongs to H^s, Richter (77) and more recently Cockburn (19) proved that

$$\epsilon_{p,h} = \mathcal{O}\left(h^{\min(p+1,s)}\right) \tag{7.4}$$

This result was verified in (93) for variants of Larsen's test case. They showed that the rate of convergence is limited by the regularity except if the mesh is aligned with singularities. In this last case, a h^{p+1} convergence is observed. In this section, an analysis of the behavior of the error depending on h and p is performed to understand the results of $hp-$methods.

In the MMS0 or MMS1 context, as s is respectively equal to 1/2 and 3/2, Eq. 7.4 implies, in the 2D case, that there exists C_p independent of the mesh size such that

$$\epsilon_{p,h} = C_p h^s = \frac{C_p'}{dof^{s/2}} \tag{7.5}$$

Thus,

$$\log(\epsilon_{p,h}) = \log(C_p') - \frac{s}{2}\log(dof) \tag{7.6}$$

This result can be verified numerically on the MMS0 and MMS1 benchmarks by representing $\epsilon_{p,h}(\kappa)$ on one diagonal cell as a function of the dof as shown in Figure 7.1. As the flux minimum regularity is located on the diagonals, it is equivalent to study this cell or the whole domain. The slope is independent of p and is equal to $\frac{1}{4}$ (resp. $\frac{3}{4}$) for the MMS0 (resp. MMS1) case as expected by Eq. 7.6. As the power of h is limited by s, one may consider that increasing the polynomial basis order is useless to improve the accuracy of the solution. However, as the value of the parameter C_p strongly depends on p, this previous assumption has to be adapted.

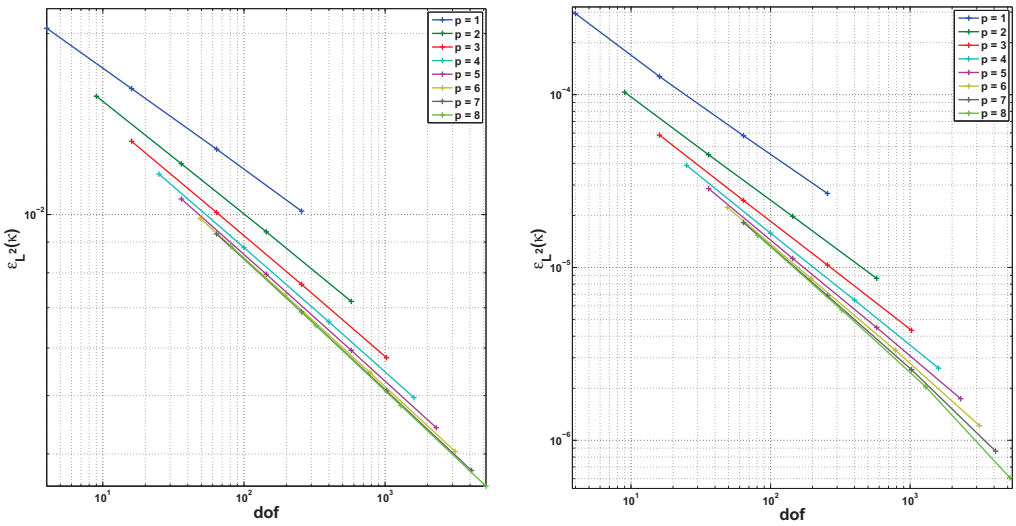


Figure 7.1: L^2-error for the MMS0 (left) and MMS1 (right) benchmark with uniform refinement

To compare the different strategies, we use a quantity of interest representing the variation of the logarithm of the error over the variation of the logarithm of dof *i.e.*

$$\begin{cases} J_{p\to p+1,h} = \frac{\left|\log(\epsilon_{p+1,h})-\log(\epsilon_{p,h})\right|}{\log(dof_{p+1,h})-\log(dof_{p,h})} & \text{for p-refinement} \\ \\ J_{p,h\to h/2} = \frac{\left|\log(\epsilon_{p,h/2})-\log(\epsilon_{p,h})\right|}{\log(dof_{p,h/2})-\log(dof_{p,h})} & \text{for h-refinement} \end{cases} \tag{7.7}$$

The larger this quantity is, the better the strategy. In particular, $p-$refinement is better than $h-$refinement according to this quantity if

$$J_{p\to p+1,h} > J_{p,h\to h/2} \tag{7.8}$$

Inserting Eq. 7.5 in Eq. 7.8 leads to

$$\frac{|\log(C_{p+1}h^s) - \log(C_p h^s)|}{\log(h^{-d}(p+2)^d) - \log(h^{-d}(p+1)^d)} > \frac{\left|\log\left(C_p\left(\frac{h}{2}\right)^s\right) - \log\left(C_p h^s\right)\right|}{\log((p+1)^d h^{-d} 2^d) - \log((p+1)^d h^{-d})} \tag{7.9}$$

$$\frac{|\log(C_{p+1}) - \log(C_p)|}{d\log\left(\frac{p+2}{p+1}\right)} > \left|\frac{s\log(2)}{-d\log(2)}\right| \tag{7.10}$$

$$C_{p+1} < C_p\left(\frac{p+1}{p+2}\right)^s = C_p\gamma_{p,s} \tag{7.11}$$

The left and right side of Eq. 7.11 for the MMS0 and MMS1 benchmarks in the 2D-case are represented in Figure 7.2. While $p \leq 4$, $p-$refinement is the best strategy. Beyond this value, performing $h-$ or $p-$refinement is quite equivalent. Thus, if the quality of the strategy is only analysed in terms of dof, $p-$refinement may always be selected.

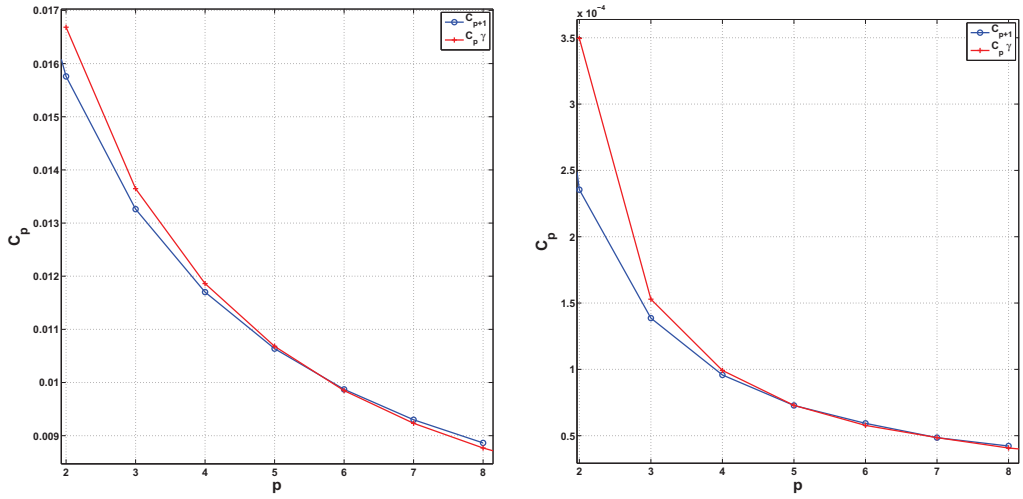


Figure 7.2: C_{p+1} and $C_p\gamma_{p,s}$ coefficients as a function of p for the MMS0 (left) and MMS1 (right) benchmarks

A finer analysis is performed to analyse the relationship between C_p and p. In Figure 7.3, the logarithm of C_p is plotted against the logarithm of p for the MMS0 and MMS1 benchmarks and a straight line with a slope close to the regularity s is observed. It implies

$$C_p = \beta p^{-s} \tag{7.12}$$

where β is an h and p independent constant.

Introducing Eq. 7.12 into Eq. 7.5 leads to

$$\epsilon_{p,h} = \beta \left(\frac{h}{p}\right)^s \tag{7.13}$$

Using this form, Eq. 7.11 can be rewritten as

$$1 > \frac{\log\left(\frac{p+2}{p+1}\right)}{\log\left(\frac{p+1}{p}\right)} = f(p) \tag{7.14}$$

f is an increasing function which rapidly tends to its asymptotic value of 1 ($f(5) \approx 0.85$). This is consistent with Figure 7.2.

This analysis, performed for uniform refinements, gives a first interesting conclusion for selecting between $h-$ and $p-$refinements. Despite the lack of regularity of the solution, performing $p-$refinement seems to be a better strategy for small p values. When p becomes larger (≥ 4), $h-$refinement may be preferred in regions where the flux is less regular in particular to limit the increase of the computational cost. To choose the best strategy, two estimators with a different behavior regarding the solution regularity are now presented and compared.

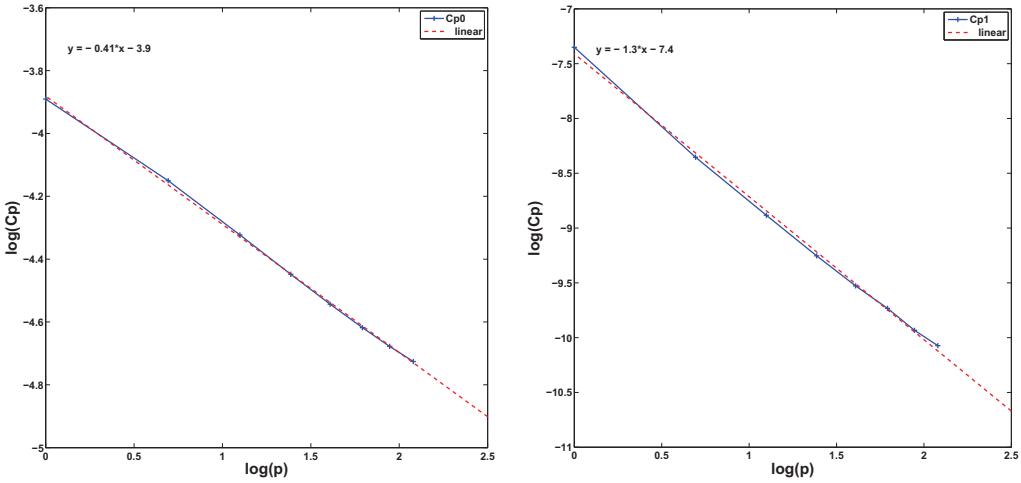


Figure 7.3: C_p versus p curvefitting in the MMS0 benchmark

7.3 Radau Estimator

This estimator was derived in (3) for a conforming mesh with a uniform polynomial basis order. The proof requires the decomposition of the flux in a Taylor-serie which implies that the flux is analytical (and in particular belongs to $\mathcal{C}^\infty$). This estimator is based on the Radau polynomials R_{p+1} defined by

$$R_{p+1}(s) = L_{p+1}(s) - \text{sgn}(\Omega_s) L_p(s) \tag{7.15}$$

where L_p is the Legendre polynomial of order p and sgn is the sign function.

If Φ is the exact solution of Eq. 7.1 and ϕ the approximate one, then the local error e is given by

$$e(x,y) = \sum_{k=p+1}^{\infty} h^k Q_k(x,y) \quad \text{with} \quad Q_{p+1}(x,y) = \beta_x R_{p+1}(x) + \beta_y R_{p+1}(y) \tag{7.16}$$

The estimator E^r is obtained by neglecting the terms of order greater than $(p+1)$ *i.e.*

$$E^r = \beta_x R_{p+1}(x) + \beta_y R_{p+1}(y) \tag{7.17}$$

where β_x and β_y are the solutions of

$$\begin{cases} \left(4\Omega_x + 2\Sigma_t \left\|R_{p+1}\right\|^2\right) \beta_x = \int_\kappa \left(Q_n^g - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi - \Sigma_t \phi\right) R_{p+1}(x) dxdy \\ \left(4\Omega_y + 2\Sigma_t \left\|R_{p+1}\right\|^2\right) \beta_y = \int_\kappa \left(Q_n^g - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi - \Sigma_t \phi\right) R_{p+1}(y) dxdy \end{cases} \tag{7.18}$$

Computing such an estimator only requires to project the residual on a given polynomial basis. The calculation is done locally (cell by cell) for each energy group and

each direction. Thereby, it is easy and fast to compute. Besides, it is efficient, *i.e.* its behavior is close to the real error, when the solution is regular (35). This latter reference also contains an analysis of the impact of non-conformities, non uniform polynomial basis order and regularity on this estimator.

7.4 Finite Volume Inspired Estimator

Eymard and coworkers (28) proved the existence and uniqueness of the approximate finite volume solution and derived an error estimate for a general transport equation. This estimate which only depends on the approximate solution was used to drive a refinement process in (47) and extended to a Finite Element Method in (62).

It assumes a low regularity on the flux which should only belong to the space of functions with bounded variation (BV). In our context, the estimator is the overall jump in the inflow cell boundaries

$$E_\kappa^{FV} = |\Omega_y| \int_{\partial\kappa_x} |\phi_\kappa - \phi_{\text{bottom}}|\, dx + |\Omega_x| \int_{\partial\kappa_y} |\phi_\kappa - \phi_{\text{left}}|\, dy \tag{7.19}$$

The notations are given in Figure 7.4.

This estimator is also easy and fast to compute and gives a good indication on the regularity of the solution by measuring the jump of the solution between two cells.

Finally, note that the extension of the two estimators to the three dimensional case is straightforward.

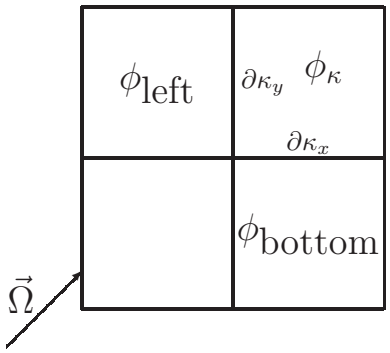


Figure 7.4: Notations in the FV context

7.5 Comparison of the Two Estimators

The main goal of this paper is to find a way to combine the two estimators in order to choose between $h-$ and $p-$refinement. If the solution is regular, the two estimators should exhibit the same behavior and $p-$refinement is preferred. On the opposite, when the regularity hypotheses required by E^r are not satisfied, differences should appear and $h-$refinement has certainly to be performed, at least for large values of p in order to reduce the computational cost as explained in Section 7.2. To validate these ideas and to find a strategy to choose between the two types of refinement, the estimators are compared on the MMS0 and MMS1 benchmarks.

To make possible the comparison, the two error estimators E^r and E^{FV} are normalized to their maximum. In the following, tilde-notation is used for normalized quantities. Their behaviors are compared with a local L^1-error norm between the calculated solution ϕ and the reference Φ. On a given element κ,

$$\epsilon_{L^1}^{\kappa} = \int_{\kappa} |\Phi - \phi| \tag{7.20}$$

In the following, the different directional errors are combined as

$$E_{\kappa} = \sum_{n} w_n E_{\kappa}^{n} \tag{7.21}$$

where w_n are the angular quadrature weights. The refinement process is then driven by such a quantity in order to keep the same spatial mesh for all directions.

Starting from a uniform mesh with a constant polynomial basis order equal to 1, the adaptive refinement process is performed with the FV inspired estimator. A cell κ is refined if

$$E_{\kappa}^{FV} > \alpha \max_{i} E_{i}^{FV} \quad \text{with } \alpha \in [0,1] \tag{7.22}$$

For this study, we choose $\alpha = 0.9$ in order to slowly refine the mesh. In this section, the polynomial order is fixed to 1. Modifying this order does not change the conclusions presented in the following. At each step, the estimators and the real error are compared.

7.5.1 Comparison on the MMS0 Benchmark

The behavior of the two estimators and the real error is presented in Figure 7.5 for the initial mesh and after 6 refinement steps.

As the solution is discontinuous accross the diagonals, its representation is more difficult in this region. It explains why the error ϵ_{L^1} is located along the characteristic lines. The estimators are expected to have the same behavior and locate the discontinuities in order to refine these parts.

E^{FV} locates the error on the characteristic lines. It begins by refining the corners (cells with the larger error in Figure 7.5 (top right)) and then progresses along the diagonals (Figure 7.5 (bottom right)). On the opposite, the behavior of E^r is not correct. Figure 7.5 for E^r (middle) show that the most important errors are located just above and below the characteristics but not along these lines. Leading the refinement with such an estimator for a discontinuous solution gives an unadapted final mesh as shown in Figure 7.6 (right) contrary to the one obtained with E^{FV} (Figure 7.6 (left)).

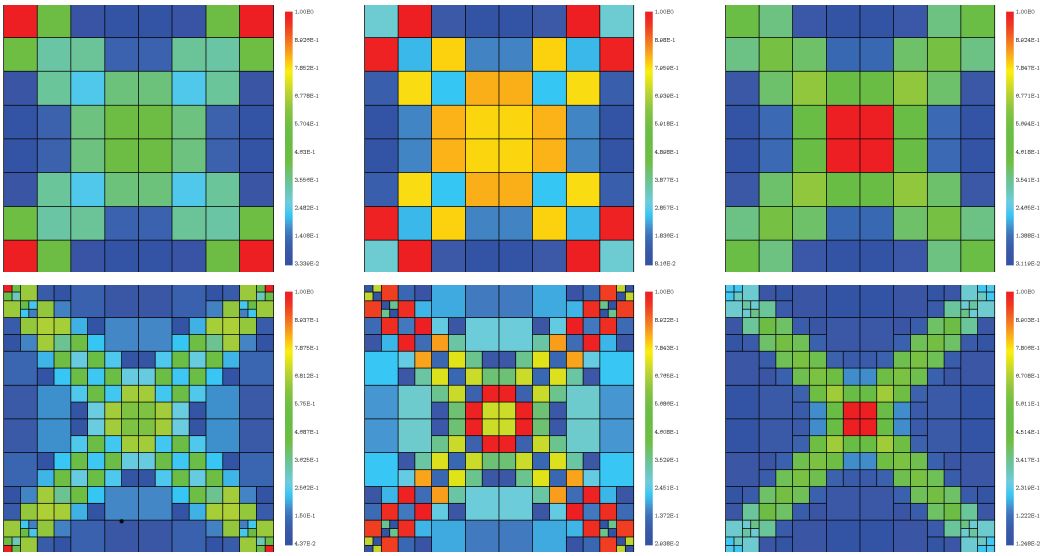


Figure 7.5: Comparaison de $\tilde{E}^{DG}$ (gauche), E^R (milieu) et ϵ_{L^1} (droite) sur le cas MMS0 avec 64 (haut) et 832 (bas) cellules

This first benchmark gives us some indications in order to perform $hp-$refinement. In the cells where the solution is discontinuous, cells are tagged to be refined by E^{FV} but not by E^r. In this case, $h-$refinement has to be done. If cells are only tagged by E^r, e.g. the cells located above and below the diagonals, the relative error (normalized by the maximum) is probably made high by the maximum that is poorly approximated. In this case, the cell is not modified at this step.

7.5.2 Comparison on the MMS1 Benchmark

The estimators and the real error are compared in Figure 7.7 for this benchmark with a non-continuous first derivative solution.

Even if it is only the first derivative of the solution that is discontinuous, the maximum error is still located along the characteristic lines (Figure 7.7 (right)). The behaviors of the two estimators are closer than in the MMS0 benchmark. Particularly for the conforming mesh, it is difficult to distinguish between the two estimators (Figure 7.7 left and middle). It means that the solution is sufficiently regular to make E^r and E^{FV} equivalent. In this case, $p-$refinement could be performed.

Figure 7.7 (middle) lead to the same conclusion than MMS0. As E^r underestimates the error in some parts, it could lead to refine some cells where the real error is not important. Actually, due to non-conformities, the error on the diagonal cells is underestimated, as the error is normalized by the poorly approximated maximum, it leads

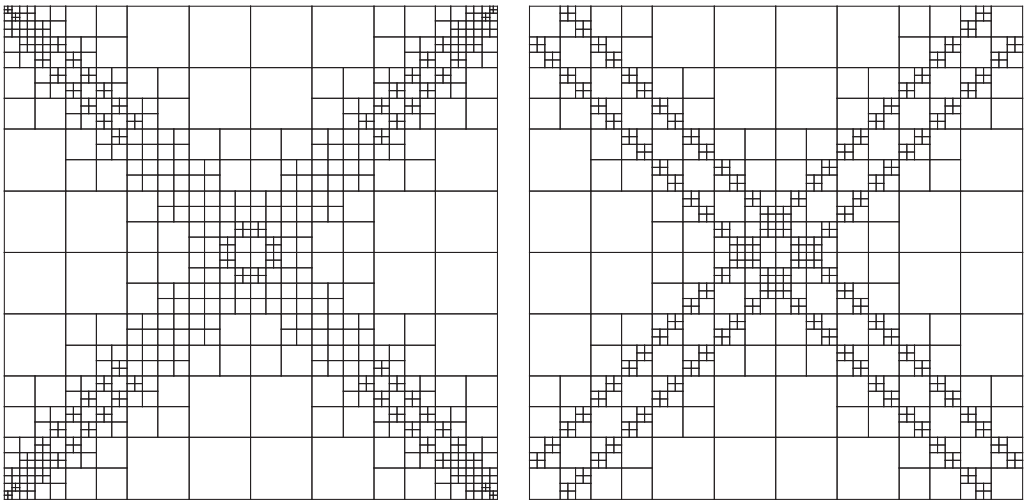


Figure 7.6: Mesh obtained when refining with E^{FV} (left) and E^r (right) (724 cells)

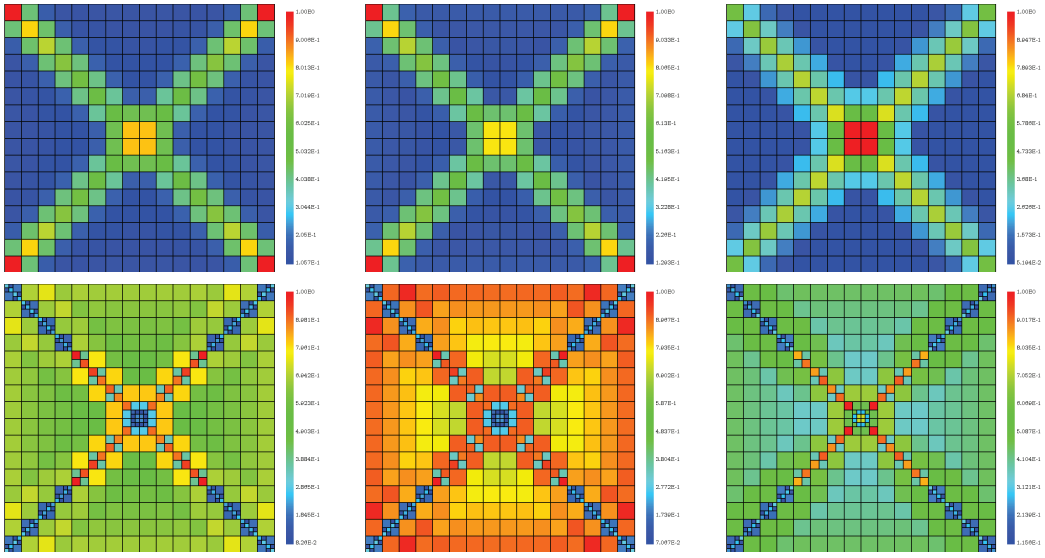


Figure 7.7: $\tilde{E}^r$, $\tilde{E}^r$ and $\tilde{\epsilon}_{L^1}$ with 256 cells and 460 cells

to an artificial increase of the error in regions where the flux is regular. If the mesh presented in Figure 7.7 (middle) is refined according to E^r, it leads to select many cells outside the diagonal lines where the real error ϵ_{L^1} is low. On the opposite, a refinement according to E^{FV} chooses the cells on the characteristic lines where ϵ_{L^1} is the most important.

The analysis of these two benchmarks confirms the choice of E^{FV} to lead the refinement process. The estimator E^r can be used to give additional information about the regularity of the solution in a given region when compared to E^{FV}. It leads to two strategies for the $hp-$refinement summarized in Table 7.1 and 7.2. The first one is only based on the analysis of the two estimators, the second one takes into account the remarks made in Section 7.2, that is, to perform $p-$refinement for $p \leq 4$.

	$E^r >$ criterion	$E^r <$ criterion
$E^{FV} >$ criterion	$p-$refinement	$h-$refinement
$E^{FV} <$ criterion	wait	no refinement required

Table 7.1: First refinement strategy (hp_1-strategy)

	$E^r >$ criterion	$E^r <$ criterion & $p \leq 4$	$E^r <$ criterion & $p > 4$
$E^{FV} >$ criterion	$p-$refinement	$p-$refinement	$h-$refinement
$E^{FV} <$ criterion	wait	no refinement required	no refinement required

Table 7.2: Second refinement strategy (hp_2-strategy)

7.6 HP-Refinement Strategy

The strategies presented in Table 7.1 and 7.2 are implemented and tested on the MMS0 and MMS1 benchmarks. The representation of $\epsilon_{p,h}$ as a function of dof for the different refinement strategies on the MMS0 (resp. MMS1) benchmark is given in Figure 7.8 (resp. Figure 7.9). Two regions can be distinguished in these Figures.

While $dof \leq 2000$, $p-$refinement is the best strategy. As explained in Section 7.2, it is more efficient to increase p and therefore decrease C_p at the beginning than to split the mesh. Surprisingly, both proposed $hp-$strategies are less efficient. With the hp_1-strategy, as the solution is discontinuous, $h-$refinement is often performed. For the MMS0 benchmark, it is the case from the points 0 to 1 (referring to the numbered points in Figure 7.8) and beyond point 2 ; $p-$refinement is done only between points 1 and 2.

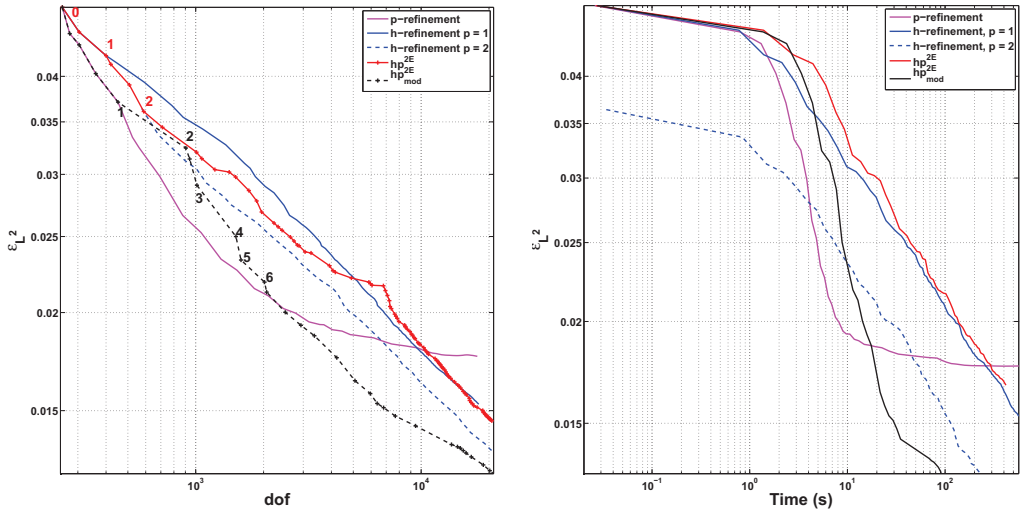


Figure 7.8: L^2-error versus dof (left) and time (right) for the MMS0 benchmark with different refinement strategies

As detailed in Section 7.2, even if the solution is non-regular, $p-$refinement converges faster for small values of p. The improvement obtained with the hp_2-algorithm is clear. Up to point 1, only $p-$refinement is performed, leading to the best convergence rate. Then the refinement progresses by alternating $h-$refinement (from 1 to 2, 3 to 4, 5 to 6 with the same convergence slope than the exclusive $h-$methods) and $p-$refinement (from 2 to 3 and 4 to 5), leading to the same accuracy as the exclusive $p-$refinement method for $dof \approx 2000$. Thus, the order of the polynomial basis and therefore the computational cost has been limited without damaging the convergence.

The analysis becomes different for dof larger than 2000. $p-$refinement converges more slowly, becoming less interesting than all the other strategies. This result is surprising as a regard of Eq. 7.13. For uniform refinement, the logarithm of the error converges proportionnaly to the logarithm of p and it is no more the case in the adaptation process. Actually, the estimator tends to refine more than expected the corner cells (Figure 7.9 (left)) and not enough the central ones where the error is underestimated. For large values of p, this phenomenon is more important and, at each step, only corner cells are refined. The choice of α close to 1 exacerbates the effect as only few cells are selected to be refined : a bad estimation of the maximum error location can lead to a very poor adaptive process. It is still an open problem to understand the bad behavior of the estimator for large values of p.

On the opposite of $p-$methods, $h-$refinement has a constant convergence rate which is equal to the regularity of the solution. If such strategies are less interesting for a

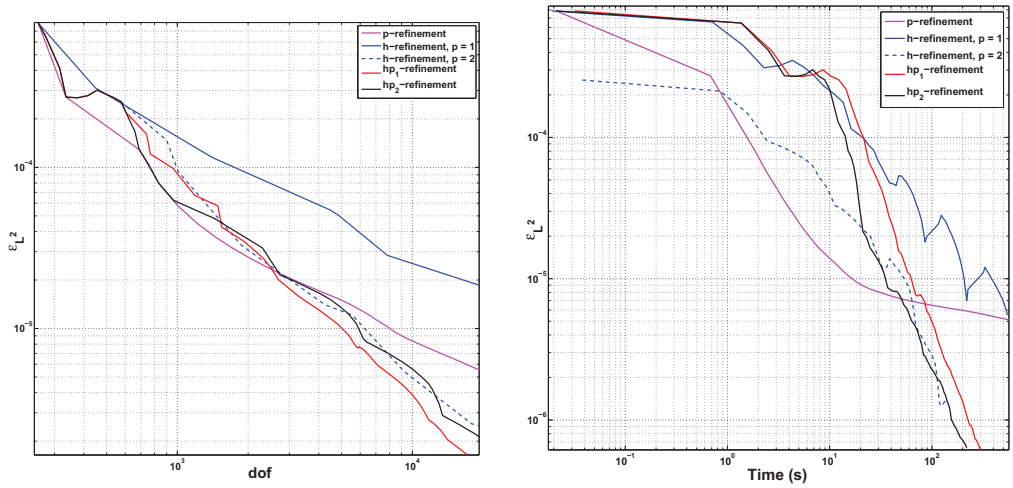


Figure 7.9: L^2-error versus dof (left) and time (right) for the MMS1 benchmark with different refinement strategies

small number of dof because of the decay of C_p with p, they unconditionally ensure the convergence. A combination of the h and p strategies in the hp_2-method is really efficient. Actually, we combine the advantages of $p-$refinement at the beginning to decrease the value of C_p and then ensure a constant rate of decay. This analysis remains valid regarding the calculation time (Figure 7.8 (left)). Therefore, problems due to large values of p are enhanced and the performance of hp_2 method is confirmed. The interested reader is referred to (32) for further illustrations of the relationship between time and dof.

The conclusions are quite similar for the MMS1 benchmark. The behavior of $p-$refinement is the same and $h-$refinement with $p = 1$ is less efficient compared to other strategies than for the MMS0 benchmark. The two $hp-$strategies and the $h-$refinement with $p = 2$ are equivalent. An other interesting aspect is the oscillation in the convergence of the $h-$refinement with $p = 1$ observed in Figure 7.9 (right). This phenomenon is related to the choice of the constant α in Eq. 7.22. To compare more precisely the different strategies, α is chosen close to 1 which can cause instabilities. The proper choice of α is still an open problem not only from the spatial AMR point of view but also in a larger perspective. Indeed, Eq. 7.1 has to be solved for each energy group and each direction and the source-flux coupling implies embedded iterations. The choice of α may be linked to the global convergence of the transport solution and related to the convergence reached by the different iteration loops.

7.7 Conclusions

We have presented different ways to perform $hp-$adaptive refinement for the neutron transport equation. The first one is solely based on the comparison of the two error estimators, E^{FV} and E^r, in order to choose between $h-$ or $p-$strategy. This approach relies on the theoretical order of convergence of the computed solution which is limited by the regularity of the solution. However, this analysis is partial because it considers only the asymptotic convergence rate and not the behavior for a small number of dof which is highly dependent on the polynomial basis order (through the C_p parameter in $C_p h^s$, the *a priori* convergence rate). The convergence behavior has been studied leading to the conclusion that $p-$refinement is always the best strategy for small values of p. Taking into account this observation, a second strategy favouring $p-$refinement while p is smaller than 4 has been proposed. This strategy has been tested and compared to other methods on the MMS0 and MMS1 benchmarks giving good convergence results both in terms of dof and calculation time. Tests on real core configurations have to be performed.

Bibliographie

[1] J. R. Ackew. A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries. Technical report, Report AAEW-M 1108, Winfrith : United Kingdom Atomic Energy Establishment, 1972. 13

[2] S. Adjerid, M. Aiffa, and J. E. Flaherty. *Computational Methods for Singularly Perturbated Systems*. AMS, Providence, 1998. 24

[3] S. Adjerid and T. C. Massey. A posteriori discontinuous finite element error estimation for two-dimensional hyperbolic problems. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 191 :5877–5897, 2002. 48, 54, 83, 123, 127

[4] M. Ainsworth and J. Oden. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. John Wiley & Sons, New York, 2000. 21

[5] M. Ainsworth and B. Senior. An adaptive refinement strategy for *hp*-finite element computations. *Applied Numerical Mathematics*, 26 :165–178, 1998. 25

[6] C. Aussourd. Styx : A multidimensional AMR Sn scheme. *Nuclear Science and Engineering*, 143(3) :281–290, 2003. 20, 47

[7] Y. Y. Azmy. The weighted diamond difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering*, 98 :29–40, 1988. 13

[8] Y. Y. Azmy. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equations. *Annals of Nuclear Energy*, 19 :593–606, 1992. 13

[9] I. Babuška and B. Q. Guo. Approximation properties of the hp version of the finite element method. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng, Special Issue on p and hp-Methods*, 133 :319–346, 1996. 23

[10] I. Babuška and M. Suri. The optimal convergence rate of the p-version of the finite element method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24(4) :750–776, 1987. 33

[11] R. S. Baker. A block adaptive mesh refinement algorithm for the neutral particle transport equation. *Nuclear Science and Engineering*, 141(1) :1–12, 2002. 47

[12] R ; Becker and R. Rannacher. An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods. *Acta Numerica*, 10 :1–102, 2001. 22

[13] K. S. Bey and J. T. Oden. hp-version discontinuous Galerkin method for hyperbolic conservation laws. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 133 :259–286, 1996. 30, 48, 122

[14] F. Bouchut and B. Perthame. Kruzkov's estimates for scalar conservation laws revisited. *Trans. Am. Math. Soc.*, 350(7) :2847–2870, 1998. 118

[15] F. Brezzi, L. D. Marini, and E. Süli. Discontinuous galerkin methods for first-order hyperbolic problems. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14 :1893–1903, 2004. 16

[16] A. G. Buchan, C. C. Pain, M. D. Eaton, R. P. Smedley-Stevenson, and A. J. H. Goddard. Self-adaptive spherical wavelets for angular discretizations of the Boltzmann transport equation. *Nuclear Science and Engineering*, 158 :244–263, 2008. 20

[17] L. Castellano, S. Pasini, and E. Sani. Comparison of numerical models for combined convection and radiation in three-dimensional complex enclosures containing participating gases. *Development in Radiation Heat Transfer*, 203 :245–251, 1992. 8

[18] J. C. Chai, H. S. Lee, and S. V. Patankar. Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method. Technical report, University of Minnesota Supercomputer Institute Research Report, 1993. 8

[19] B. Cockburn, B. Dong, and J. Guzman. Optimal convergence of the original DG method for the transport-reaction equation on special meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 46(3) :1250–1265, 2008. 30, 48, 122, 124

[20] B. Cockburn and P. A. Gremaud. A priori error estimates for numerical methods for scalar conservation laws. part I : The general approach. *Math. Comp.*, 65 :533–573, 1996. 118

[21] A. Dedner, C. Makridakis, and M. Ohlberger. Error control for a class of Runge Kutta discontinuous Galerkin methods for nonlinear conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(2) :514–538, 2007. 113

[22] A. Dedner and M. Ohlberger. *A New hp-Adaptive DG Scheme for Conservation Laws Based on Error Control.* Hyperbolic Problems ; Theory, Numerics, Applications, 2008. 38

[23] L. Demkowicz, W. Rachowicz, and P. Devloo. A fully automatic hp-adaptivity. *Journal of Scientific Computing*, 17 :117–142, 2002. 21, 23, 45

[24] J. I. Duo. *Error Estimates for Nodal and Short Characteristics Spatial Approximations of Two-Dimensional Discrete Ordinate Method*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, The Graduate School, Department of Mechanical and Nuclear Engineering, 2008. 11

[25] J. I. Duo and Y. Y. Azmy. Error comparison of diamond difference, nodal, and characteristic methods for solving multidimensional transport problems with the discrete ordinates approximation. *Nuclear Science and Engineering*, 156 :139–153, 2007. 57

[26] J. I. Duo, Y. Y. Azmy, and L. T. Zikatanov. A posteriori error estimator and amr for discrete ordinates nodal transport methods. *Annals of Nuclear Energy*, 36 :268–273, 2009. 11, 48, 63

[27] G. Palmiotti et al. BISTRO optimized two dimensional Sn transport code. In *Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Mathematics and Computation, April 1987, Paris, France*, 1987. 6

[28] R. Eymard, T. Gallouët, M. Ghilani, and R. Herbin. Error estimates for the approximate solutions of a nonlinear hyperbolic equation given by finite volume schemes. *Journal of Numerical Analysis*, 18(4) :563–594, 1998. 37, 38, 128

[29] Robert Eymard, Thierry Gallouët, and Raphaele Herbin. *Finite Volume Methods*, volume 7. Handbook of Numerical Analysis, 1998. 103, 110

[30] P. J. Finck et al. The CIRANO experimental program in support of advanced fast reactor physics. In *Proc. Int. Conf. PHYSOR'96, Mito, Ibaraki, Japan*, volume 2, pages E66–E75, Sept. 16-20, 1996. 11, 82

[31] J. E. Flaherty, L. Krivodonova, J-F. Remacle, and M. S. Shephard. Aspects of discontinuous galerkin methods for hyperbolic conservation laws. *Finite Elements in Analysis and Design*, 38 :889–908, 2002. 24

[32] D. Fournier, P. Archier, R. Le Tellier, and C. Suteau. Improvement of neutronic calculations on a MASURCA core using adaptive mesh refinement capabilities. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil*, 2011. 134

[33] D. Fournier, R. Herbin, and R. Le Tellier. Analysis of hp-refinement methods for the resolution of the neutron transport equation. submitted, 2011. 29, 39, 42, 121

[34] D. Fournier, R. Le Tellier, R. Herbin, and C. Suteau. Analysis of a hp-refinement method for solving the neutron transport equation using two error estimators. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil*, 2011. 94

[35] D. Fournier, R. Le Tellier, and C. Suteau. Analysis of an a posteriori error estimator for the transport equation with Sn and discontinuous Galerkin discretizations. *Annals of Nuclear Energy*, 38(2-3) :221–231, 2011. 34, 83, 128

[36] L. Gastaldo, R. Le Tellier, C. Suteau, D. Fournier, and J. M. Ruggieri. High-order discrete ordinate transport in non-conforming 2D Cartesian meshes. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, M&C 2009, Saratoga Springs, New York*, 2009. 6, 13, 48, 82

[37] W. Gui and I. Babuška. The h, p and h-p versions of the finite element method in 1 dimension. part III. the adaptive h-p version. *Numer. Math.*, 49 :659–683, 1986. 24

[38] P. Houston, C. Schwab, and E. Süli. Stabilized hp-finite element method for first-order hyperbolic problems. Technical Report NA-98/14, Oxford University Computing Laboratory, 1998. 31

[39] P. Houston, C. Schwab, and E. Süli. Discontinous *hp*-finite element methods for advection-diffusion problems. Technical Report NA-00/15, Oxford University Computing Laboratory, 2000. 32, 48

[40] P. Houston, B. Senior, and E. Süli. hp-discontinuous galerkin finite element methods for hyperbolic problems : Error analysis and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40 :153–169, 2002. 25

[41] P. Houston and E. Süli. hp-adaptive discontinuous Galerkin finite element methods for first order hyperbolic problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 23(4) :1226–1252, 2001. 25, 122

[42] A. Hébert. High order diamond differencing schemes. *Annals of Nuclear Energy*, 33 :1479–1488, 2006. 13

[43] J. P. Jessee, W. A. Fiveland, L. H. Howell, P. Colella, and R. B. Pember. An adaptive mesh refinement algorithm for the discrete ordinates method. In *National Heat Transfert Conference, Houston, TX*, 1996, August 3-6. 21, 47

[44] C. Johnson and J. Pitkaranta. Convergence of a fully discrete scheme for two-dimensional neutron transport. *SIAM J. Numer. Anal.*, 20(5) :951, 1983. 10

[45] C. Johnson and J. Pitkäranta. An analysis of the discontinuous Galerkin method for a scalar hyperbolic equation. *Math. Comp.*, 46 :1–26, 1986. 30, 48

[46] W. F. Miller Jr. and Wm. R. Reed. Ray-effect mitigation methods for two-dimensional neutron transport theory. *Nuclear Science and Engineering*, 62 :391–411, 1977. 8

[47] D. Kroner and M. Ohlberger. A posteriori error estimates for upwind finite volume schemes for nonlinear conservation laws in multidimensions. *Mathematics of Computation*, 69 :25–39, 1999. 128

[48] D. Lathouwers. Goal-oriented spatial adaptivity for the sn equations on unstructured triangular meshes. *Annals of Nuclear Energy*, Article On press, 2011. 22

[49] D. Lathouwers. Spatially adaptive eigenvalue estimation for the Sn equations on unstructured triangular meshes. *Annals of Nuclear Energy*, in press, 2011. 22

[50] K. D. Lathrop. Ray effects in discrete ordinates equation. *Nuclear Science and Engineering*, 32 :357–369, 1968. 8

[51] R. Le Tellier, C. Suteau, D. Fournier, and J. M. Ruggieri. High-order discrete ordinate transport in hexagonal geometry : A new capability in ERANOS. In *IL NUOVO CIMENTO, 33C*, pages 121–128, 2010. 48, 64, 65

[52] P. Lesaint and P. A. Raviart. *On a Finite Element Method for Solving the Neutron Transport Equation.* Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations, C.A. deBoor, ed., Academic Press, New York, 1974. 13, 30, 33, 47, 48, 51, 122

[53] E. E. Lewis and F. Miller, Jr. *Computational Methods of Neutron Transport.* John Wiley and Sons, Inc.,New York, NY, 1984. 4, 8, 13, 47, 82

[54] C. Lingus. Analytical test cases for neutron and radiation transport codes. In *Proc. Second Conference on Transport Theory.* Los Alamos, New Mexico, US Atomic Energy Commission, CONF-710017, 1971, January 26-29. 11, 123

[55] R. .E. MacFarlane and R. M. Boicourt. NJOY : A neutron and photon processing system. *Trans. Am. Math. Soc.*, 22 :720, 1975. 7

[56] C. Mavriplis. Adaptive mesh strategies for the spectral element method. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng*, 116 :77–86, 1994. 25

[57] J. M. Melenk. On the robust exponential convergence of hp finite element methods for problems with boundary layers. *IMA J. Numeric. Anal.*, 17 :577–601, 1997. 23

[58] S. P. Monahan and W. L. Filippone. An integral sn method for large-memory supercomputers. *Nuclear Science and Engineering*, 107 :201–216, 1991. 8

[59] L. Naymeh. Accélération de l'équation de transport neutronique discrétisée par éléments finis discontinus. Master's thesis, rapport de stage d'ingénieur PHELMA, CEA Cadarache, 2010. 98

[60] J. T. Oden and A. Patra. A parallel adaptive strategy for hp finite elements. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng*, 121 :449–470, 1995. 24

[61] J. T. Oden, A. Patra, and Y. Feng. *An hp Adaptive Strategy*, volume 157. Noor, A. K. (ed.), 1992. 24

[62] M. Ohlberger. A posteriori error estimates for the heterogenoeous mulitscale finite element method for elliptic homogenization problems. *SIAM Multiscale Mod. Simul.*, 4(1) :88–114, 2005. 128

[63] G. Palmiotti, E. Lewis, and C. Carrico. Variant : Variational anisotropic nodal transport for multidimensional cartesian and hexagonal geometry calculations. Technical report, Technical Report ANL-95/40, Argonne National Laboratory, 1995. 8

[64] H. Park and C. De Oliveira. Coupled space-angle adaptivity for radiation transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 161 :216–234, 2009. 20

[65] B. Petrovic and A. Haghighat. New directional theta-weighted sn differencing scheme and its application to pressure vessel fluence calculations. In *Proc 1996 Radiation Protection and Shielding Topical Meeting, Falmouth, MA, Vol I, 3-10*, 1996. 13

[66] J. Pitkäranta. Estimates for the derivatives of the solution to the weakly singular fredholm integral equations. *J. Math. Anal.*, 11(6) :952–968, 1980. 57

[67] T. Plewa, T. Linde, and V. G. Weirs. *Adaptive Mesh Refinement - Theory and Applications*. Proceedings of the Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods, Sept. 3-5, 2003, Springer. 1, 122

[68] G. Porcellana. Domain decomposition techniques for core/steel reflector interface for sodium cooled fast reactors. Master's thesis, rapport de stage de Master Politecnico di Torino, CEA Cadarache, 2011, à venir. 98

[69] W. Rachowicz, L. Demkowitcz, and J. T. Oden. Towards a universal h-p adaptive finite element strategy, part 3. design of h-p meshes. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng*, 77 :181–212, 1989. 21

[70] J. Ragusa, D. Lebrun-Grandie, P. Solin, and B. Turcksin. Adaptive multimesh hp-FEM for a coupled neutronics and nonlinear heat conduction problem. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil*, 2011. 21

[71] J. Ragusa and Y. Wang. Adaptive mesh refinement techniques for diffusion-synthetic-accelerated discrete-ordinates neutral particle transport. In *Nuovo Cimento C*, volume 33, pages 215–222, 2010. 21, 41, 83

[72] W. H. Reed and T. R. Hill. Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, 1973. 47

[73] W. Rhoades and W. Engle. A new weighted difference formulation for discrete ordinates calculations. *Transactions of the American Nuclear Society*, 27 :776–777, 1977. 13

[74] W. A. Rhoades and R. L. Childs. The DORT two-dimensional discrete ordinates transport code. *Nuclear Science and Engineering*, 99 :88–89, 1988. 19

[75] W. A. Rhoades and D. B. Simpson. The TORT three-dimensional discrete ordinates neutron/photon (tort version 3) transport code,". Technical report, Report ORNL/TM 13221, Oak Ridge National Laboratory, 1997. 19

[76] S. Richling, E. Meinkohn, N. Kryzhevoi, and G ; Kanschat. Radiative transfer with finite elements. *Astronomy and Astrophysics*, 380 :776–788, 2001. 22

[77] G. R. Richter. An optimal-order error estimate for the discontinuous Galerkin method. *Math. Comp.*, 50 :75–88, 1988. 30, 48, 124

[78] G. Rimpault. Physics documentation of ERANOS and the ECCO cell code. Technical report, Rapport Technique RT/SPRC/LEPh 97-001, 1997. 7

[79] J. M. Ruggieri, J. Tommasi, J. F. Lebrat, C. Suteau, D. Plisson-Rieunier, and C. De Saint Jean. ERANOS-2.1 : The international code system for GEN-IV fast reactor analysis. In *Proceedings of International Congress on Advances in Nuclear Power Plants, USA, June 4-8*, 2006. 1, 48, 82, 84

[80] S. Schunert, D. Fournier, Y. Y. Azmy, and R. Le Tellier. Comparison of the accuracy of various spatial discretization scheme of the discrete ordinates equations in 2d cartesian geometry. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil*, 2011. 13

[81] C. Schwab. *p and hp-Finite Element Methods*. Clarendon Press, Oxford, 1998. 23

[82] M. Shephard, S. Dey, and J. Flaherty. A straightforward structure to construct shape functions for variable p-order meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 147 :209–233, 1997. 14, 19, 83, 122

[83] G. Sjoden and A. Haghighat. The exponential directional weighted (EDW) differencing scheme in 3-d cartesian geometry. In *Proceedings of the Joint International Conference on Mathematics and Supercomputing for Nuclear Applications, Saratoga Springs, New York, Vol II : 1267-1276*, October 1997. 13

[84] E. Splinder. A posteriori error estimates for hp-fem : Comparison and implementation. Master's thesis, ETH Zurich, 2010. 25

[85] J. .C. Stone and M. L. Adams. Progress on adaptive discrete-ordinates algorithms and strategies. In *Nuclear Mathematical and Computational Sciences : A Century in Review, A Century Anew Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL*, 2003. 8, 19

[86] J. C. Stone and M. L. Adams. Adaptive discrete-ordinates algorithms and strategies. In *Proc. Conf. Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, Avignon, France, September 11-15 (2005)*, 2005. 19

[87] R. Le Tellier, G. Marleau, M. Dahmani, and A. Hébert. Improvements of the reactivity devices modeling for the advanced candu reactor. *Annals of Nuclear Energy*, 35 :868–876, 2007. 13

[88] B. Turcksin, J. Ragusa, and W. Bangerth. Goal-oriented h-adaptivity for the multigroup SPN equations. *Nuclear Science and Engineering*, 165 :305–319, 2010. 22

[89] J. Valenciano and R. G. Owens. An h-p adaptive spectral method for Stokes flow. *Appl. Numer. Math.*, 33 :365–371, 2000. 23

[90] Y. Wang, W. Bangerth, and J. Ragusa. Three-dimensional h-adaptivity for the multigroup neutron diffusion equations. *Progress in Nuclear Energy*, 51 :543–555, 2009. 21

[91] Y. Wang and J. Ragusa. Application of hp adaptivity to the multigroup diffusion equations. *Nuclear Science and Engineering*, 161 :22–48, 2009. 21, 122

[92] Y. Wang and J. Ragusa. Goal-oriented h-type adaptive mesh refinement for the Sn neutron transport equation solved with DGFEM. In *Proceedings of the ANS Winter Meeting. American Nuclear Society, Pittsburgh, Pennsylvania, USA.*, 2009. 22

[93] Y. Wang and J. Ragusa. On the convergence of DGFEM applied to the discrete ordinates transport equation for structured and unstructured triangular meshes. *Nuclear Science and Engineering*, 163 :56–72, 2009. 23, 30, 124

[94] Y. Wang and J. Ragusa. A two-mesh adaptive mesh refinement technique for Sn neutral-particle transport using a higher-order DGFEM. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 233 :3178–3188, 2010. 21, 48, 83

[95] Y. Wang, J. Ragusa, and M. DeHart. Xuthos : A discontinuous Galerkin transport solver for newt based on unstructured triangular meshes. In *International Conference on the Physics of Reactors "Nuclear Power : A Sustainable Resource", Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, PHYSOR 08*, 2008. 48

[96] J. Warsa and A. Prinja. p-adaptive numerical methods for particle transport. *Transport Theory and Statistical Physics*, 28(3) :229–270, 1999. 20

[97] H. Zhang and E. Lewis. Spatial adaptivity applied to the variational nodal Pn equations. *Nuclear Science and Engineering*, 142 :57–63, 2002. 22