Travaux Pratiques : développement d'un solveur neutronique

AMS302 : Modélisation et simulation du transport de particules neutres

Conditions d'évaluation

Les travaux réalisés durant ce TP peuvent faire l'objet d'un travail collectif (en binôme ; la possibilité de faire des trinômes sera peut-être ouverte en fonction des effectifs du cours). Ils seront évalués sur la base de :

Documents à rendre (à envoyer à l'adresse `francois.fevotte@ensta.org`) :

— Compte-rendu de TP, au format `pdf` : incluant *a minima* les réponses aux questions du présent énoncé, assorties de tous les commentaires que vous pourriez vouloir faire sur votre code et d'éventuels tests supplémentaires réalisés.

— Code source développé pendant le TP, dans une archive `tgz` ou `zip`.

— Date limite de remise :

19/10/2017 : partie Monte-Carlo,

16/11/2017 : partie déterministe.

Soutenance le 20/11/2017, selon des modalités qui seront précisées ultérieurement :

— une présentation, durant laquelle tous les membres du groupe doivent intervenir. La présentation doit reprendre les points-clés des travaux présentés dans le compte-rendu ;

— une phase des questions, pouvant porter sur les travaux du TP proprement dit ou plus généralement sur le cours.

— La note attribuée à la suite de la soutenance peut varier entre élèves d'un même groupe.

Critères d'évaluation

Les travaux seront évalués selon différents critères. En particulier, on portera une grande attention aux points suivants :

— La rigueur de la vérification du solveur, étayée par des expériences numériques adéquates.

— La qualité de la programmation. En particulier, on s'attachera à ce que les différentes questions, qui demandent de résoudre des problèmes similaires, ne donnent pas lieu à trop de copier/coller. Le document "Conseils pour le développement en C++", disponible sur la page web du cours, donne quelques techniques permettant d'éviter la duplication de code.

Surprenez-nous !

Le présent énoncé de TP donne une trame pour appréhender différents aspects liés au développement de solveurs pour l'équation de transport. Nous vous encourageons cependant à sortir du cadre strict de l'énoncé en effectuant tous les tests complémentaires que vous pourriez imaginer.

Voici à titre d'exemple quelques pistes qu'il est possible de suivre :

— comparaison (précision, performances, cadre d'applicabilité) des solveurs Monte-Carlo et déterministe développés dans les deux parties de ce TP ;

— évaluation et étude des erreurs statistiques du solveur Monte-Carlo :

— étude des propriétés de convergence spatiale du solveur ;

— test de différentes formules de quadrature angulaires.

Préambule

Nous nous proposons ici de résoudre un problème de transport neutronique stationnaire à source, monocinétique, en géométrie 1D. Dans ces conditions, l'équation du transport neutronique peut s'écrire de la façon suivante :

$$\begin{aligned} &\forall x \in [0,1], \forall \mu \in [-1,1], \\ &\qquad \mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma_t(x)\, \phi(x,\mu) = \frac{1}{2}\, \Sigma_s(x) \int_{-1}^{1} \phi(x,\mu)\, d\mu + S(x,\mu), \end{aligned} \tag{1}$$

assortie de conditions aux limites de flux entrant imposé :

$$\begin{aligned} &\forall x \in \{0,1\}, \forall \mu \in [-1,1] \text{ t.q. } \mu\, n(x) < 0, \\ &\qquad \phi(x,\mu) = \phi^-(x,\mu), \end{aligned}$$

où l'on a noté :
- $\phi(x,\mu)$: flux angulaire,
- $S(x,\mu)$: source externe,
- $\Sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$: section efficace totale,
- Σ_a : section efficace macroscopique d'absorption,
- Σ_s : section efficace de *scattering*,
- $n(x)$: direction sortante à la frontière du domaine spatial : $n(0) = -1$ et $n(1) = 1$.

On considérera dans la suite deux types de conditions aux limites : flux entrant nul (vide)

$$\begin{aligned} &\forall x \in \{0,1\}, \forall \mu \in [-1,1] \text{ t.q. } \mu\, n(x) < 0, \\ &\qquad \phi^-(x,\mu) = 0, \end{aligned} \tag{2}$$

ou courant entrant unitaire à gauche

$$\begin{cases} \phi^-(0,\mu) = \dfrac{1}{\mu}, & \forall \mu \in [0,1] \\ \phi^-(1,\mu) = 0, & \forall \mu \in [-1,0] \end{cases}. \tag{3}$$

De même, on sera amené à considérer le cas d'une source externe nulle

$$\forall x \in [0,1], \qquad S(x) = 0, \tag{4}$$

ou unitaire

$$\forall x \in [0,1], \qquad S(x) = 1. \tag{5}$$

L'objectif de ce TP consiste à développer un solveur pour l'équation (1). Afin de tester et déboguer progressivement le solveur, nous procéderons par étapes en introduisant les difficultés une à une.

1 Solveur Monte-Carlo

Dans cette partie, nous nous proposons de développer un solveur utilisant la méthode de Monte-Carlo.

Question 1 :
Quelle est la densité de probabilité du libre parcours d'un neutron dans un matériau de section efficace totale Σ ? Comment échantillonner une variable aléatoire suivant cette loi ?

Question 2 :
Connaissant les trajectoires (marches aléatoires) d'une population neutronique, comment construire un estimateur du flux neutronique ?

1.1 Matériau purement absorbant

Nous nous intéressons dans un premier temps au cas simplifié d'un matériau purement absorbant :

$$\Sigma_s = 0,$$
$$\Sigma_t(x) = \Sigma_a(x).$$

1.1.1 Matériau homogène – source ponctuelle

On suppose ici de plus que le matériau est homogène :

$$\forall x \in [0,1], \qquad \Sigma_t(x) = \Sigma_t \in \mathbb{R}^+, \tag{6}$$

et que la source est ponctuelle, située à une extrémité de la géométrie :

$$S(x,\mu) = \delta(x), \qquad \forall x \in [0,1],\ \forall \mu \in [-1,1]. \tag{7}$$

Question 3 :
Quelle est la solution analytique à ce problème ?

Question 4 :
Implémenter un solveur utilisant la méthode de Monte-Carlo pour évaluer :

1. *le flux neutronique sortant en $x = 1$;*
2. *le flux neutronique en chaque point de la géométrie.*

On s'attachera à comparer ces résultats aux valeurs de référence.

1.1.2 Matériau homogène – source uniforme

En gardant le matériau homogène décrit par (6), on considère maintenant une source uniforme :

$$S(x,\mu) = 1, \qquad \forall x \in [0,1],\ \forall \mu \in [-1,1]. \tag{8}$$

Question 5 :
Quelle est la solution analytique à ce problème ? Comparer les résultats du solveur Monte-Carlo à cette référence.

1.1.3 Matériau non homogène – source ponctuelle

On se place maintenant dans le cas d'un matériau non homogène :

$$\Sigma_t(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [0, 0.3], \\ 3 & \text{si } x \in [0.3, 0.7], \\ 1 & \text{si } x \in [0.7, 1], \end{cases}$$

assorti d'une source ponctuelle telle que décrite par l'équation (7).

Question 6 :
Quelle est la solution analytique à ce problème ?

Question 7 :
Implémenter un solveur Monte-Carlo utilisant la méthode de Woodcock pour échantillonner le libre parcours de neutrons dans un tel matériau. On fournira les mêmes résultats que pour la question 4.

1.2 Matériau diffusant

Nous nous intéressons maintenant au cas plus général de matériaux diffusants ($\Sigma_s \neq 0$). On pourra s'intéresser à titre d'exemple au problème suivant :

$$\begin{aligned}\Sigma_a(x) &= 0,\\ \Sigma_s(x) &= \Sigma_t(x) = 1,\end{aligned}$$

assorti d'une source uniforme (8).

Question 8 :
Modifier le solveur pour prendre en compte les phénomènes de diffusion.

2 Solveur déterministe

Nous nous proposons ici de développer pas à pas un solveur déterministe permettant de résoudre l'équation du transport (1) grâce à une méthode déterministe fondée sur la discrétisation angulaire S_N.

2.1 Matériau purement absorbant

Nous nous intéressons dans un premier temps au cas simplifié d'un matériau purement absorbant :

$$\begin{aligned}\forall x \in [0,1],&\\ &\Sigma_s(x) = 0,\\ &\Sigma_t(x) = \Sigma_a(x).\end{aligned}$$

Dans toute cette partie, les équations pour des μ différents étant découplées les unes des autres, on s'attachera à développer des méthodes permettant de résoudre l'équation (1) pour une valeur de μ fixée arbitrairement à l'avance.

2.1.1 Matériau homogène – courant entrant unitaire

On impose dans un premier temps des conditions de courant entrant unitaire (3), une source nulle (4), et on suppose de plus que le matériau est homogène (6).

Question 9 :

1. *Rappeler la solution analytique à ce problème.*
2. *Implémenter un solveur déterministe permettant d'évaluer le flux neutronique en chaque point de la géométrie. Ce solveur sera basé sur la méthode "diamant" pour la discrétisation spatiale.*

On s'attachera à comparer les résultats du solveur déterministe aux valeurs de référence données par la solution analytique ainsi qu'aux résultats du solveur Monte-Carlo développé au TP1.

2.1.2 Matériau homogène – source uniforme

On considère dans cette partie un matériau homogène décrit par (6), les conditions aux limites de flux entrant nul (2), ainsi qu'une source unitaire uniforme (5).

Question 10 :
Reprendre la démarche de la question 9 pour ces nouvelles conditions. On veillera à ce que les fonctionnalités ajoutées dans le solveur pour le traitement du terme source restent compatibles avec le traitement du flux entrant imposé nécessaire pour la question 9.

2.1.3 Matériau non homogène – courant entrant unitaire

On se place maintenant dans le cas d'une source nulle (4) et de conditions de flux entrant imposé (3), pour un matériau non homogène :

$$\Sigma_t(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [0, 0.3], \\ 3 & \text{si } x \in [0.3, 0.7], \\ 1 & \text{si } x \in [0.7, 1]. \end{cases}$$

Question 11 :

Reprendre la démarche de la question 9 pour ces nouvelles conditions. On s'attachera à ce que les fonctionnalités ajoutées pour le traitement de sections efficaces variables restent compatibles avec le reste du solveur tel que développé dans les questions précédentes.

2.2 Matériau diffusant

Nous nous intéressons maintenant au cas plus général de matériaux diffusants ($\Sigma_s \neq 0$). On pourra s'intéresser à titre d'exemple au problème suivant :

$$\begin{aligned} &\forall x \in [0,1], \\ &\qquad \Sigma_a(x) = 0, \\ &\qquad \Sigma_s(x) = \Sigma_t(x) = 1, \end{aligned}$$

assorti d'une source uniforme (5) et de conditions aux limites de flux entrant nul (2).

Dans toute la suite, les équations correspondant aux directions données par des μ différents sont couplées entre elles. Plutôt que de déterminer le flux angulaire pour chaque direction possible, on cherchera à calculer le flux scalaire :

$$\begin{aligned} &\forall x \in [0,1], \\ &\qquad \tilde{\phi}(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \phi(x, \mu)\, d\mu. \end{aligned}$$

Question 12 :

Reprendre la démarche de la question 9 pour traiter ce problème de diffusion. Le solveur utilisera la méthode des ordonnées discrètes (S_N) pour traiter la variable angulaire μ.

Il n'y a pas de solution analytique dans ce cas ; on s'attachera donc tout particulièrement à la vérification du solveur déterministe par comparaison aux résultats donnés par le solveur Monte Carlo développé au TP1.

2.3 Limite de diffusion

Nous nous intéressons maintenant au cas de matériaux très diffusants et peu absorbants, correspondants au problème suivant, caractérisé par un paramètre ϵ :

$$\begin{aligned} \Sigma_a(x) &= \epsilon \sigma_a, \\ \Sigma_t(x) &= \frac{\sigma_t}{\epsilon}, \\ \Sigma_s(x) &= \frac{\sigma_t}{\epsilon} - \epsilon \sigma_a, \end{aligned}$$

assorti d'une source uniforme $S = \epsilon$ et des conditions aux limites de flux entrant nul (2). On note ϕ_ϵ la solution du problème (1) dans ces conditions, et $\tilde{\phi}_\epsilon$ le flux scalaire associé :

$$\begin{aligned} &\forall x \in [0,1], \\ &\qquad \tilde{\phi}_\epsilon(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \phi_\epsilon(x, \mu)\, d\mu. \end{aligned}$$

Question 13 :

1. *Trouver l'équation vérifiée par* ϕ_ϵ *lorsque* ϵ *tend vers 0.*
2. *Dans le cas où on prend* $\sigma_a = 0$ *et* $\sigma_t = 1$*, trouver la limite de* ϕ_ϵ *lorsque* ϵ *tend vers 0.*

Question 14 :

1. *Dans ce dernier cas, trouver la solution* $\tilde{\phi}_\epsilon$ *avec votre code pour* $\epsilon = 1, 0.1, 0.01$*. Que peut-on constater ?*
2. *Donner le nombre d'itérations de la source itérée pour chaque valeur de* ϵ*, que peut-on constater ?*

Question 15 :

1. *En quoi la discrétisation en* μ *influence t-elle les résultats ?*
2. *En quoi la discrétisation en espace influence t-elle les résultats ?*

Question 16 :

1. *Implémenter dans le code l'accélération par diffusion synthétique.*
2. *Répéter l'expérience de la question 14 ; que peut-on constater ?*

Question 17 :

1. *Remplacer le schéma "diamant" par un schéma "upwind".*
2. *Reprendre la question 14 ; que peut-on constater ?*