

Rapport de TP
AMS302

Solveur Déterministe
pour le transport de particules neutres

Benoît Sohet
&
Aurélien Valade

Introduction

Dans ce TP on cherche à résoudre le problème différentiel suivant

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t(x) \Phi(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_s(x) \int_1^{-1} \Phi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu) & \forall (x, \mu) \in [0, 1] \times [-1, 1] \\ \mu n(x) < 0 & \forall (x, \mu) \in \{0, 1\} \times [-1, 1] \end{cases} \quad (1)$$

- $\Phi(x, \mu)$ le flux neutronique
- Σ_t la section efficace totale
- $n(x)$ la normale sortante : $n(0) = -1$, $n(1) = 1$

On fixe pour cela deux types de conditions aux limites

- Flux entrant à gauche

$$\begin{cases} \Phi^-(0, \mu) = \frac{1}{\mu} & \forall \mu \in [0, 1] \\ \Phi^-(1, \mu) = 0 & \forall \mu \in [-1, 0] \end{cases} \quad (2)$$

- Source nulle ou unitaire

$$S(x) = 0 \quad \forall x \in [0, 1] \quad (3)$$

$$S(x) = 1 \quad \forall x \in [0, 1] \quad (4)$$

On utilisera dans la suite l'erreur pour une fonction f et son approximation \tilde{f} :

$$e_{L^2}(f, \tilde{f}) = \frac{\|f - \tilde{f}\|_{L^2}}{\|f\|_{L^2}} \quad (5)$$

L'utilisation des codes nécessite gnuplot ainsi qu'un système d'exploitation respectant la norme POSIX.

1 Matériau purement absorbant

1.1 Matériau homogène - courant entrant unitaire

Question 9.1 – *Rappeler la solution analytique à ce problème avec source nulle et flux entrant à gauche, et un matériau purement absorbant et homogène.*

L'équation à résoudre s'écrit alors :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_a \Phi(x, \mu) = 0 & \forall (x, \mu) \in [0, 1] \times [-1, 1] \\ \Phi(0, \mu) = \frac{1}{\mu} & \forall \mu \in [0, 1] \\ \Phi(1, \mu) = 0 & \forall \mu \in [-1, 0] \end{cases} \quad (6)$$

La solution est donc :

$$\Phi(x, \mu) = A(\mu) e^{-\frac{\Sigma_a}{\mu} x}, \quad (7)$$

avec $A(\mu)$ qui vérifie les conditions initiales :

$$A(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{\mu} & \text{si } \mu \in [0, 1] \\ 0 & \text{si } \mu \in [-1, 0]. \end{cases} \quad (8)$$

On peut remarquer que l'on retrouve exactement la même solution que si l'on avait imposé un flux entrant nul des deux côtés, et une source sous forme de dirac en 0 lorsque $\mu > 0$.

Question 9.2 – 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.

Notations : On note par (x_i) la segmentation choisie pour $[0, 1]$, $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ et $\delta_i = x_{i+1} - x_i$. On peut alors écrire $\phi_i(\mu) = \phi(x_i, \mu)$. La méthode "diamant" fait l'hypothèse suivante :

$$\forall(\mu, x) \in [-1, 1] \times I_i, \quad \phi(x, \mu) \simeq \frac{\phi_i(\mu) + \phi_{i+1}(\mu)}{2}. \quad (9)$$

Pour simplifier les expressions suivantes, on se fixe un $\mu \in [-1, 1]$ et on écrit directement $\phi_i(\mu) = \phi_i$. De là, l'équation 6 devient (on rajoute un terme source S pour ne pas avoir à refaire les calculs pour la prochaine question) :

$$\mu \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta_i} + \Sigma_t \frac{\phi_{i+1} + \phi_i}{2} = S \quad (10)$$

$$\Leftrightarrow 2\mu(\phi_{i+1} - \phi_i) + \Delta_i \Sigma_t (\phi_{i+1} + \phi_i) = 2\Delta_i S \quad (11)$$

$$\Leftrightarrow \eta^+ \phi_{i+1} - \eta^- \phi_i = 2\Delta_i S \quad \text{avec } \eta^\pm = 2\mu \pm \Delta_i \Sigma_t. \quad (12)$$

Or, suivant le signe de μ , on n'isolera pas le même terme dans cette équation. En effet, si $\mu > 0$, les conditions de flux entrant ne donnent une information qu'en $x = 0$: il faut donc utiliser cette relation récurrente afin d'avoir ϕ_{i+1} à partir de ϕ_i , ce qui donne :

$$\phi_{i+1} = \frac{\eta^- \phi_i + 2\Delta_i S}{\eta^+} \quad (13)$$

Et inversement lorsque $\mu < 0$. De plus on remarque que :

$$\frac{\eta^+}{\eta^-} = \frac{-\eta^+}{-\eta^-} = \frac{-2\mu - \Delta_i \Sigma_t}{-2\mu + \Delta_i \Sigma_t} = \frac{2|\mu| - \Delta_i \Sigma_t}{2|\mu| + \Delta_i \Sigma_t}, \quad (14)$$

donc si l'on change la définition des η en $\eta^\pm = 2|\mu| \pm \Delta_i \Sigma_t$, on retrouve pour $\mu < 0$ la même formulation 13 que pour $\mu > 0$:

$$\phi_i = \frac{\eta^- \phi_{i+1} + 2\Delta_i S}{\eta^+}. \quad (15)$$

Il faut simplement faire attention à bien retourner le vecteur (ϕ_i) .

1.2 Matériau homogène - source uniforme

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.

1.3 Matériau non homogène - courant entrant unitaire

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

$$\Sigma_a = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0.3 \\ 3 & \text{si } 0.3 < x < 0.7 \\ 1 & \text{si } 0.7 < x \end{cases} \quad (16)$$

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 Matériau diffusant

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.

Voici la structure générale du code (prenant en compte la diffusion aussi, présentée pour $\mu > 0$), pour une discrétisation en N_x points en espace et N_μ en direction.

- Récupération et vérification des arguments
- Allocation de la mémoire
- $Q_1 = S, \quad Q_0 = Q + \varepsilon_s + 1$
- Tant que $||Q_1 - Q_0|| > \varepsilon_s$
 - $\tilde{\Phi} = 0 \ [N_x]$
 - Pour $k \in [1, N_\mu]$
 - $\Phi^- = 0$
 - Pour $i \in [1, N_x - 1]$
 - $\Phi^+ = \frac{\eta^- \Phi^- + 2\Delta_i S}{\eta^+}$
 - $\tilde{\Phi}_i = \tilde{\Phi}_i + \frac{1}{2} w_k (\Phi^+ + \Phi^-)$
 - $\Phi^- = \Phi^+$
 - Fin pour i
- Fin pour k
- $Q_0 = Q_1$
- $Q_1 = S + \frac{\Sigma_s}{2} \tilde{\Phi}$
- Fin tant que

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 :

$$\Sigma_a(x) = \epsilon \sigma_a \quad (17)$$

$$\Sigma_t(x) = \frac{\sigma_t}{\epsilon} \quad (18)$$

$$\Sigma_s(x) = \frac{\sigma_t}{\epsilon} - \epsilon \sigma_a \quad (19)$$

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

$$\forall x \in [0, 1], \quad \tilde{\Phi}_\epsilon = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Phi_\epsilon(x, \mu) d\mu. \quad (20)$$

Question 13.1 – Trouver l'équation vérifiée par Φ_ϵ lorsque ϵ tend vers 0.

Selon ces hypothèses, l'équation se réécrit alors :

$$\mu \frac{\partial \Phi_\epsilon}{\partial x} + \frac{\sigma_t}{\epsilon} \Phi_\epsilon = \epsilon + \left(\frac{\sigma_t}{\epsilon} - \epsilon \sigma_a \right) \tilde{\Phi}_\epsilon. \quad (21)$$

La présence du $\frac{1}{\epsilon}$ nous invite à supposer que l'on peut écrire :

$$\Phi_\epsilon = \Phi_0 + \epsilon \Phi_1 + \epsilon^2 \Phi_2 + \dots, \quad (22)$$

et de même pour $\tilde{\Phi}_\epsilon$. Puis, on pourra ensuite dissocier les termes de l'équation 21 selon devant quelle puissance de ϵ ils se trouvent : chacun devra être nul. Le terme en facteur de $\frac{1}{\epsilon}$ est :

$$\sigma_t(\Phi_0(x, \mu) - \tilde{\Phi}_0(x)) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \Phi_0(x, \mu) = \tilde{\Phi}_0(x) \quad \forall \mu \in [-1, 1] \quad (23)$$

Nous n'utiliserons donc plus que $\Phi_0(x)$.

Regardons ensuite tout d'abord le terme devant la puissance ϵ^1 , divisé par 2, et que l'on intègre sur μ entre -1 et 1 :

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left[\mu \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} + \sigma_t(\Phi_2(x, \mu) - \tilde{\Phi}_2(x)) + \sigma_a \tilde{\Phi}_0(x) - 1 \right] d\mu = \sigma_a \Phi_0(x) - 1 + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} d\mu = 0. \quad (24)$$

Le dernier terme de droite donne l'idée d'intégrer le terme devant le facteur ϵ^0 en premier lieu multiplié par μ :

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu^2 \frac{d\Phi_0}{dx} d\mu + \sigma_t \times \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu \Phi_1 d\mu - 0 = \frac{1}{3} \frac{d\Phi_0}{dx} + \sigma_t \times \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu \Phi_1 d\mu = 0 \quad (25)$$

On voit qu'il reste une chose supplémentaire à faire, à savoir dériver la dernière équation par rapport à x , ce qui nous laisse :

$$-\frac{1}{3\sigma_t} \frac{d^2\Phi_0}{dx^2}(x) + \sigma_a \Phi_0(x) = 1. \quad (26)$$

C'est cette équation que vérifie Φ_ϵ lorsque ϵ tend vers 0, car $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Phi_\epsilon = \Phi_0$.

Question 13.2 – Dans le cas où on prend $\sigma_a = 0$ et $\sigma_t = 1$, trouver la limite de Φ_ϵ lorsque ϵ tend vers 0.

D'après la question précédente, dans ce cas l'équation vérifiée est :

$$-\frac{1}{3} \frac{d^2\Phi_0}{dx^2}(x) = 1. \quad (27)$$

Les solutions de cette équation sont de la forme $\Phi_0(x) = -\frac{3}{2}x^2 + ax + b$, avec a et b des constantes à déterminer avec les conditions aux limites : on sait que $\Phi_0(0, \mu > 0) = \Phi_0(1, \mu < 0) = 0$. Or, $\Phi_0(x, \mu) = \Phi_0(x) \quad \forall \mu \in [-1, 1]$, donc cela nous permet de conclure sur $\Phi_0(x) = \frac{3}{2}x(1-x)$.

Questions 14 et 16 – Dans ce dernier cas, trouver la solution $\tilde{\Phi}_\epsilon$ avec votre code pour $\epsilon = 1, 0.1, 0.01$. Donner le nombre d'itérations de la source itérée pour chaque valeur de ϵ . Que peut-on constater ?

Ci-dessous se trouve un tableau donnant le nombre d'itérations nécessaires à la convergence ($\|Q_1 - Q_0\| > 10^{-3}$, voir l'algorithme de la question 12), pour chaque valeur de ϵ , et avec ou sans accélération par diffusion synthétique. Une expérience n'aura pas convergé si la condition de convergence n'est toujours pas remplie au bout de 10000 itérations (équivalent à environ 40s). Dans ce cas, ce ne sera pas le nombre d'itérations mais la valeur de $\|Q_1 - Q_0\|$ qui sera présentée dans le tableau.

	$\epsilon = 1$	$\epsilon = 0.1$	$\epsilon = 0.01$
sans DSA	1.1	1.2	1.3
avec DSA	2.1	2.2	2.3

Question 15.1 – *En quoi la discrétisation en μ influence t-elle les résultats ?*

Question 15.2 – *En quoi la discrétisation en espace influence t-elle les résultats ?*

Question 16.1 – *Implémenter dans le code l'accélération par diffusion synthétique.*

Question 16.2 – *Répéter l'expérience de la question 14 ; que peut-on constater ?*

Question 17.1 – *Remplacer le schéma “diamant” par un schéma “upwind”.*

Question 17.2 – *Reprendre la question 14 ; que peut-on constater ?*