

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) .

Pour les courbes, se reporter à la question 10.

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.

Les deux fonctionnalités du code sont compatibles, le cas général d'une source sous forme d'une fonction de x ayant été mis en place¹. Il faut cependant veiller aux conditions initiales qui ne sont pas forcément les mêmes. Cette méthode de résolution nous a fournis les résultats que l'on peut voir en Figure 1, Figure 2 et Figure 3. Dans tous ces exemples on a $N_x = 10^3$ et une erreur relative de l'ordre de 10^{-3} . On peut en effet noter que les deux courbes tracées dans chaque figures sont complètement confondues.

1. De même pour les différents coefficients de diffusion bien que la méthode de résolution ne soit pas systématiquement adaptée!!!

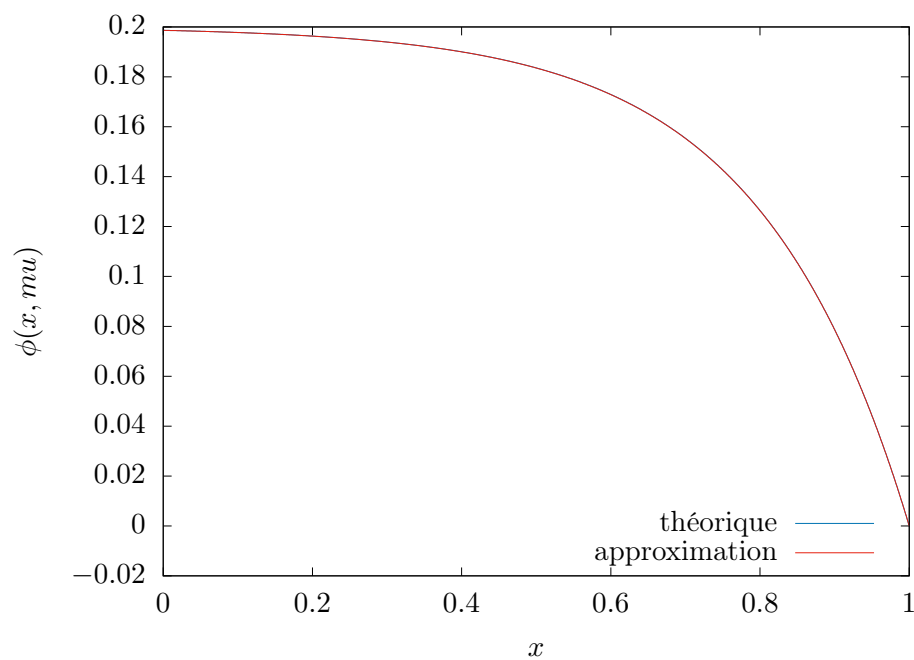


FIGURE 1 – Exemple de résultat du solveur “diamant” pour un cas sans diffusion, $\mu = -1$, $\sigma = 5$ et un source constante sur $[0, 1]$.

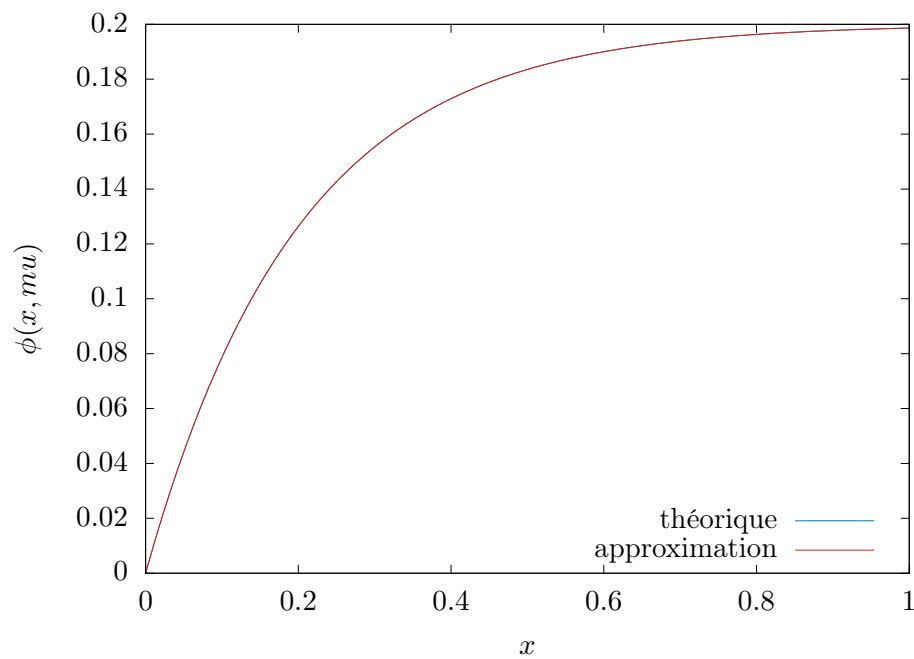


FIGURE 2 – Exemple de résultat du solveur “diamant” pour un cas sans diffusion, $\mu = 1$, $\sigma = 5$ et un source constante sur $[0, 1]$.

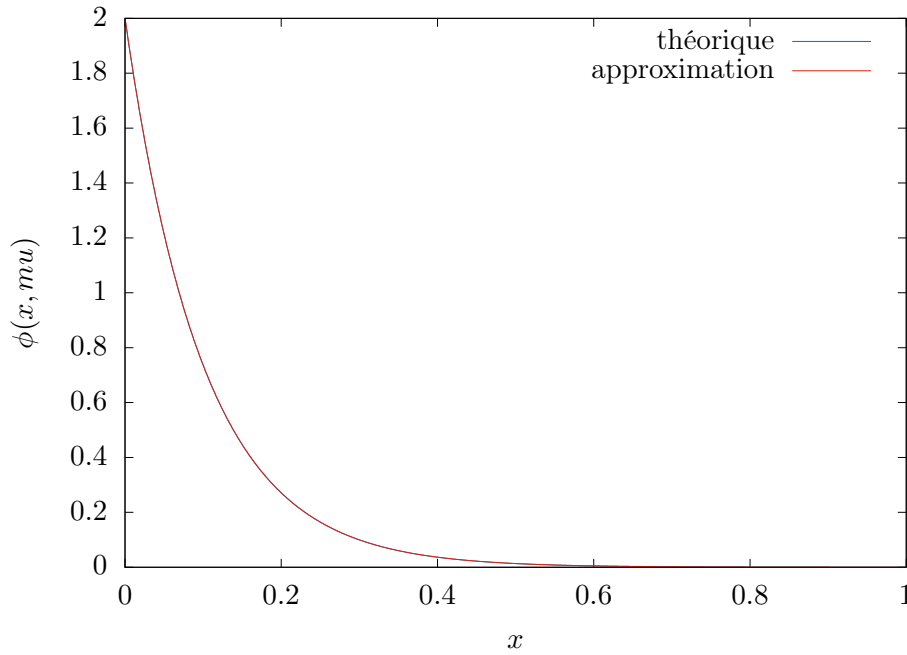


FIGURE 3 – Exemple de résultat du solveur “diamant” pour un cas sans diffusion, $\mu = 0.5$, $\sigma = 5$ et un source de la forme $\delta(0)$.

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.

Encore une fois, la partie principale du code déterministe ne fait pas de différence entre ce nouveau cas et les anciens puisque les coefficients sont représentés comme des fonctions². Le solveur permet ainsi de dépasser la formulation exacte que nous avons précédemment calculée car celle ci considère le cas strict de $\Sigma_t = 1, 3, 1$ alors que l’on peut aisément changer ces valeurs (en gardant le rapport multiplicatif $\times 3$ de la marche) dans le code, et c’est ce que l’on montre en Figure 6. On peut aussi changer de type de source et utiliser une source constante sur $[0, 1]$ ainsi que toute valeur positive ou négative de μ . Dans les Figure 4 et Figure 5 on se restreint à changer $\mu > 0$. Dans tous ces cas on reste à $N_x = 10^3$ et on a une erreur de l’ordre de 10^{-3} .

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.

2. Et sont en réalité des functor je crois...

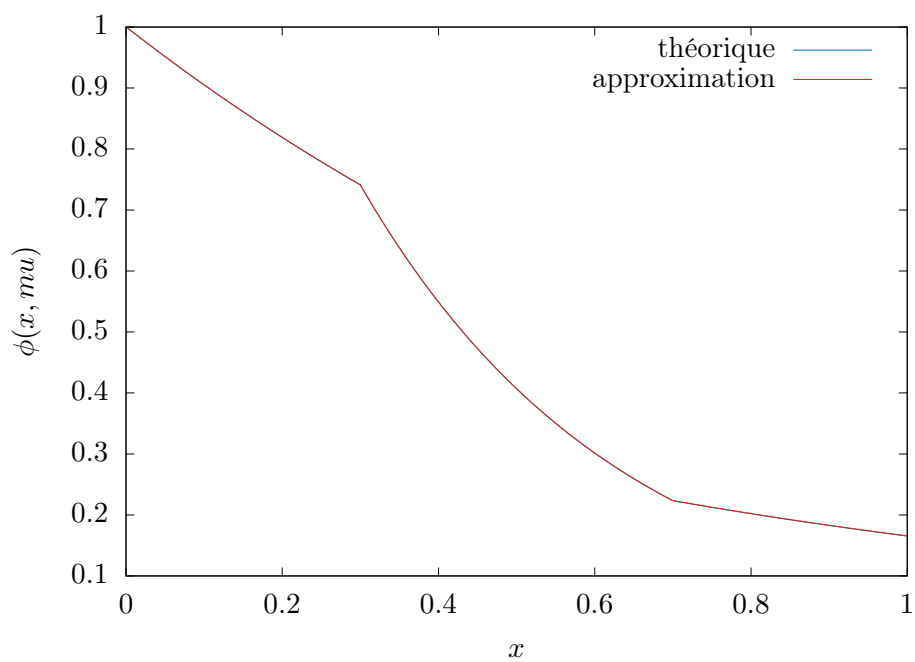


FIGURE 4 – Courbes théorique et expérimentale pour $\sigma_t(x)$ avec une marche. On prend ici $\mu = 1$.

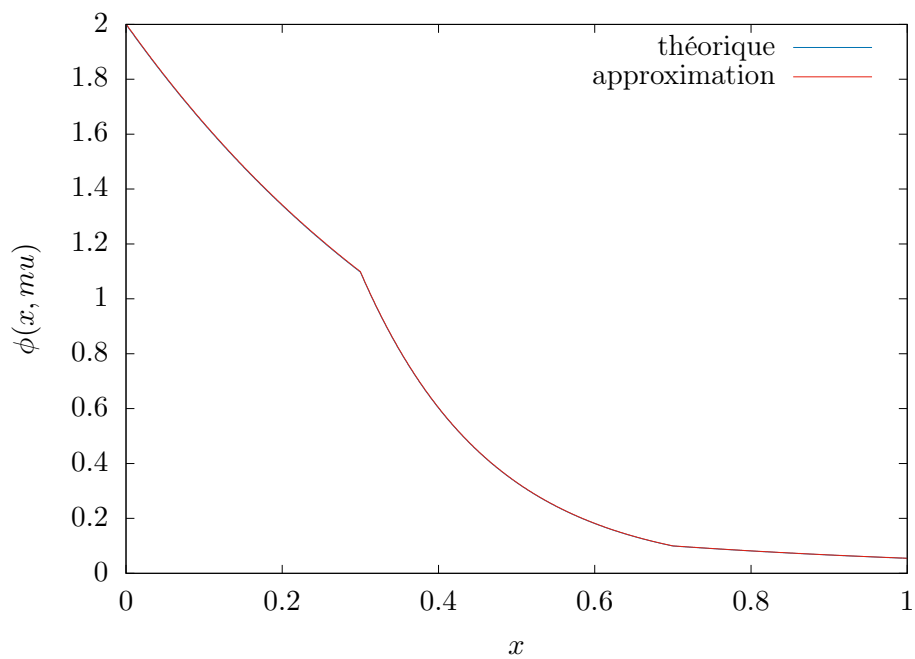


FIGURE 5 – Courbes théorique et expérimentale pour $\sigma_t(x)$ avec une marche. On prend ici $\mu = .5$.

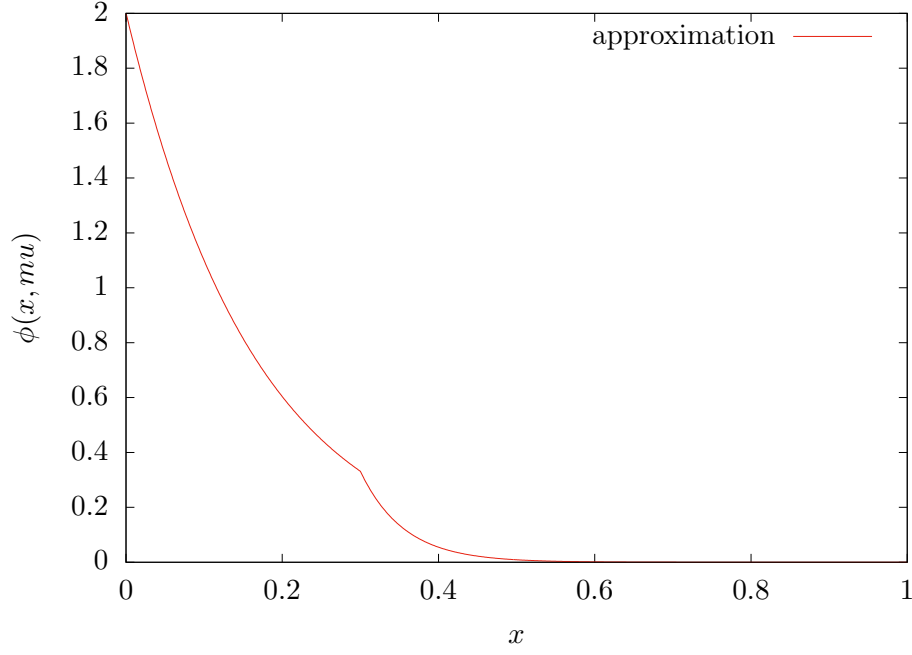


FIGURE 6 – Courbes théorique et expérimentale pour $\sigma_t(x)$ avec une marche. On prend ici $\mu = .5$, mais on prend aussi un coefficient multiplicatif sur Σ_t d'un facteur 3.

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 problème1 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'équation21 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 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Phi_\epsilon = \Phi_0$.

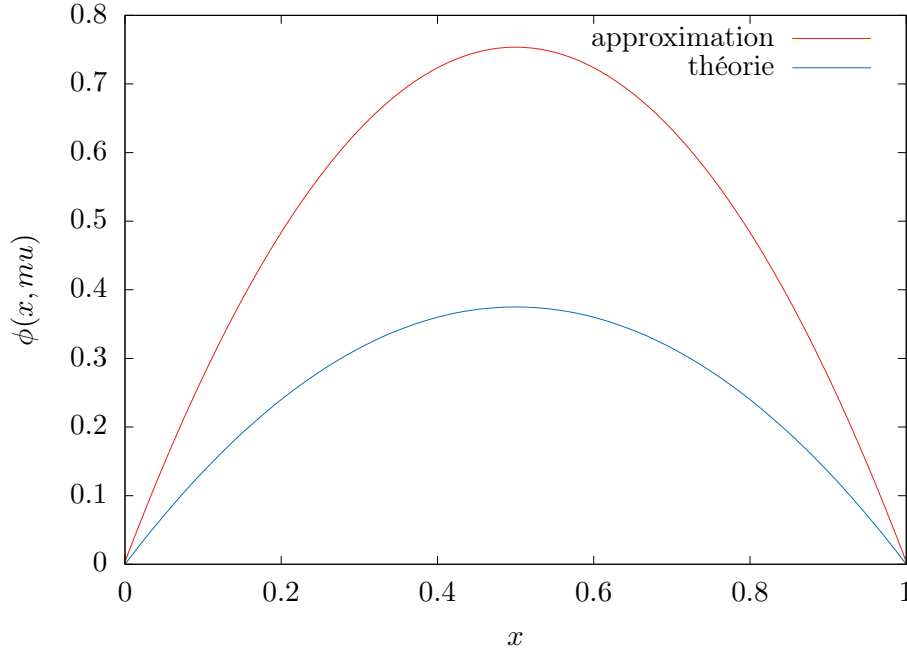


FIGURE 7 – Courbes théorique pour le cas limite $\epsilon = 0$ et expérimentale pour $\sigma_a = 0$ et $\epsilon = 0.001$.

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 $\Phi_0(x) = \frac{3}{2}x(1-x)$. Nous avons donc essayé d'atteindre cette limite avec notre programme, le résultat est présenté en Figure 7 où l'on peut voir que notre courbe est *exactement* deux fois plus grande...

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 ? (16.1) Implémenter dans le code l'accélération par diffusion synthétique. (16.2) Répéter l'expérience de la question 14 ; que peut-on constater ?

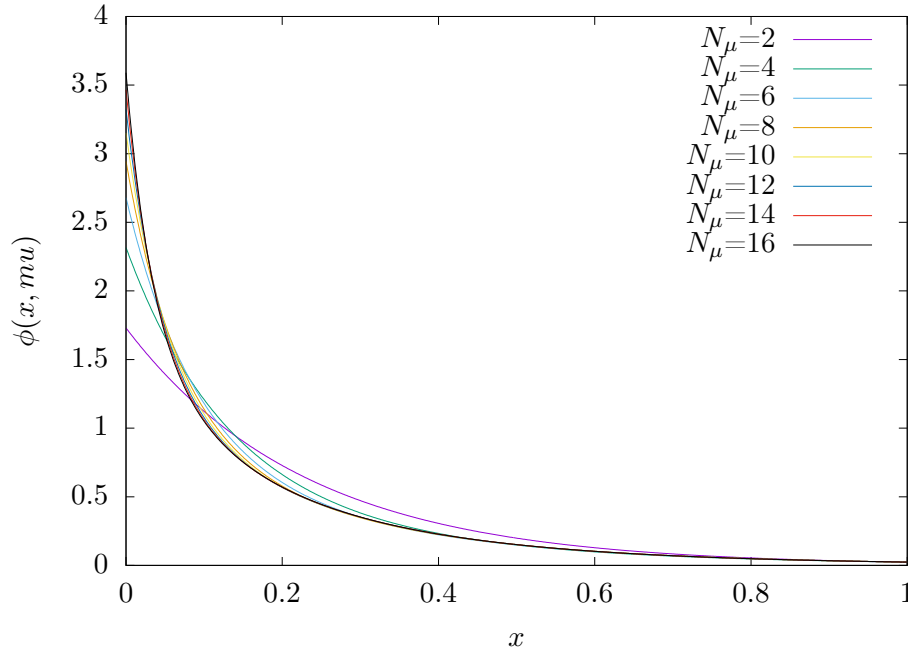
Nous avons mis en place la méthode DSA comme indiquée dans le cours. Pour cela nous avons codé un solveur d'éléments fini en 1D avec des conditions de Dirichlet aux bords. On peut trouver le détail du solveur générique dans le fichier `fe1D_solver.hpp`. Il est intéressant de noter que pour l'inversion du système, deux solveurs de la librairie **Eigen** ont été utilisés

1. le gradient conjugué ;
2. une méthode de Cholesky dite LLTD ;

le choix s'étant porté sur le solveur direct 2, environ dix fois plus rapide. L'utilisation de la méthode DSA permet en effet de bien meilleurs résultats : le nombre d'itérations et donc le temps de calcul sont fortement réduits comme on peut le voir dans les valeurs reportées dans le Tableau 1.

ε	.1	0.01	0.001	ε	.1	0.01	0.001
Boucles <i>sans</i> DSA	761	$> 10^5$	$> 10^5$	Tps calcul <i>sans</i> DSA	2.9	40	40
Boucles <i>avec</i> DSA	32	46	313	Tps calcul <i>avec</i> DSA	0.15	0.22	1.5

TABLE 1 – Vitesses de convergence pour les schémas avec ou sans DSA.

FIGURE 8 – Courbes pour différents niveaux de discrétisation de N_μ dans le cas d'une expérience à source en $\delta(0)$.

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

La discrétisation de μ s'est faite dans notre cas avec une quadrature de Gauss-Legendre. Une discrétisation à N_μ points est donc censée pouvoir intégrer exactement un polynôme de degré $2N_\mu + 1$. Or, vu la continuité des fonctions en présence, l'intégration est donc rapidement exacte. C'est en effet ce que l'on peut observer dans les Figure 8 et Figure 9 où les courbes sont les mêmes quand N_μ dépasse la dizaine. On observe cependant que la convergence se fait plus vite pour une source constante que pour une source de la forme $\delta(0)$.

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

Plutôt que de montrer que les courbes des expériences avec diffusion convergent quand N_x tend vers de grandes valeurs, nous avons choisi de tracer l'erreur en fonction du pas spatiale dans un cas où la solution exacte était bien définie. C'est ce que nous avons fait dans les Figure 10 et Figure 11. Grâce à une régression linéaire on voit rapidement que la distance relative de l'approximation à la solution exacte décroît en N_x^{-1} .

4 Commentaires

Les questions non présentées ici, à savoir 17.1 et 17.2 sur le schém upwind n'ont pas pu être traitées faute de temps. De même peu³ de comparaisons ont été faites entre les codes déterministe et stochastiques, mais ce sera fait pendant la présentation (on l'espère...).

3. Erratum : lire *aucune*.

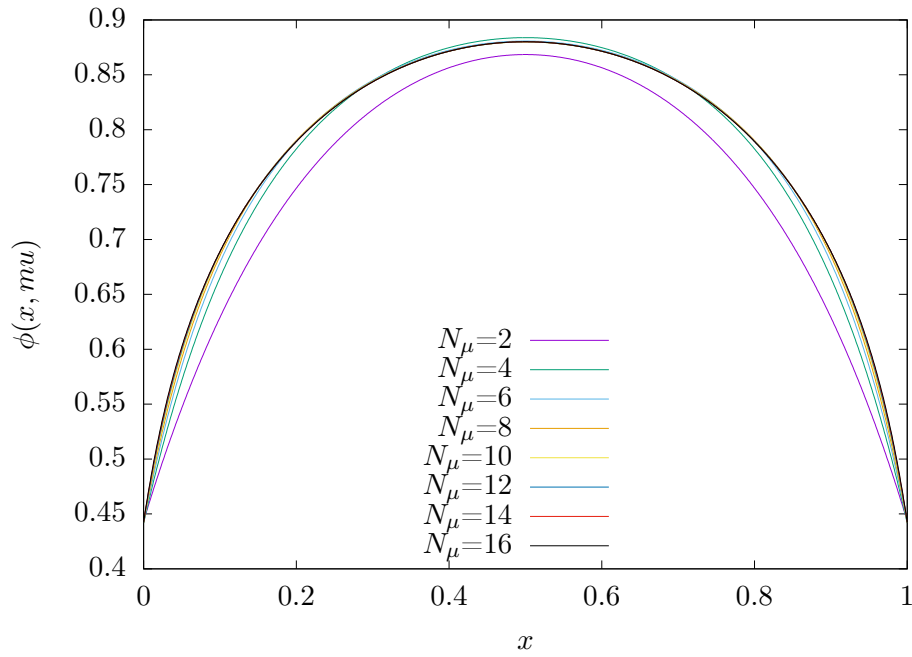


FIGURE 9 – Courbes pour différents niveaux de discrétisation de N_μ dans le cas d’une expérience à source constante unitaire sur $[0, 1]$.

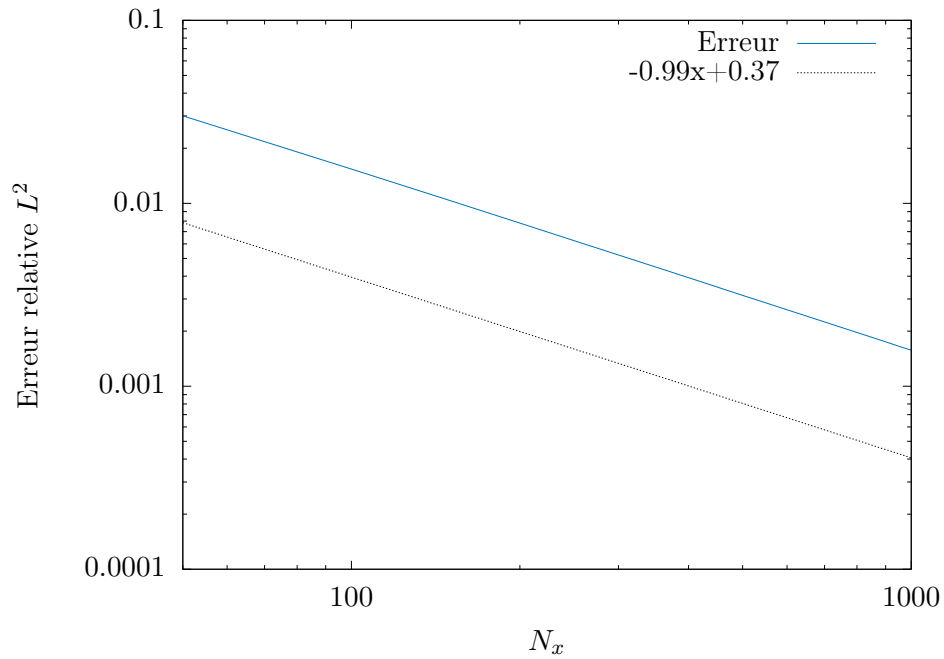


FIGURE 10 – Courbe de la distance relative de l’approximation à la solution exacte en fonction du nombre de pas de la discrétisation spatiale. Le cas présenté ici est celui d’une source ponctuelle en 0.

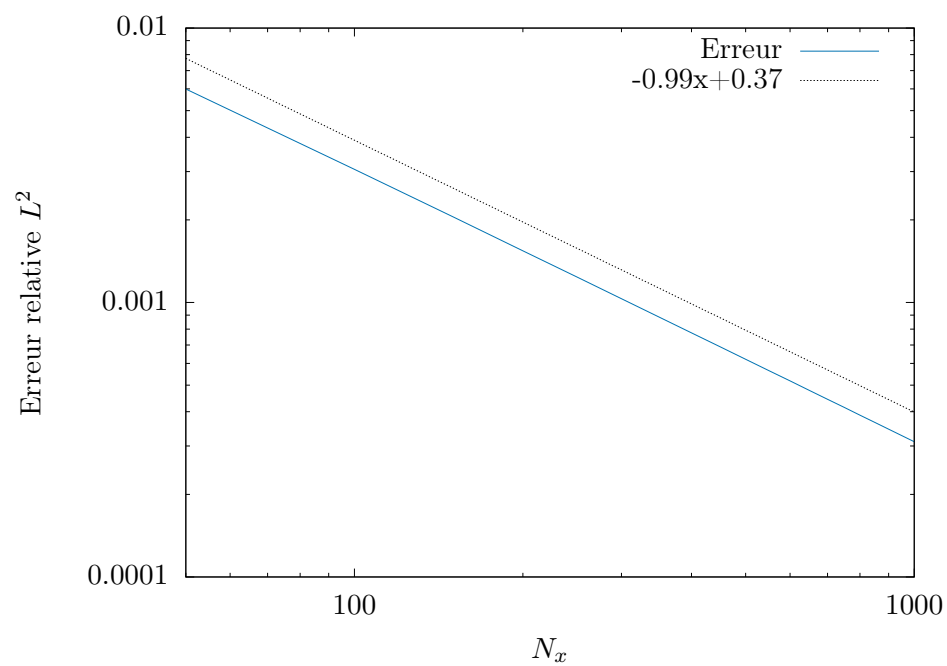


FIGURE 11 – Courbe de la distance relative de l'approximation à la solution exacte en fonction du nombre de pas de la discrétisation spatiale. Le cas présenté ici est celui d'une source constante unitaire sur le segment $[0, 1]$.