Résolution numérique de l'équation de la diffusion neutronique

Véronique Duwig (veronique.duwig@edf.fr)

Les réponses aux questions seront mises sous la forme d'un rapport illustré par des résultats numériques. Les programmes seront mis en annexe.

1 Présentation du problème

On se propose de modéliser l'évolution de la population neutronique. Pour un réacteur nucléaire, la désintégration artificielle de l'uranium par fission, sous l'impact d'un neutron, s'accompagne de l'émission de plusieurs neutrons de haute énergie et d'un dégagement de chaleur. Les neutrons voyagent dans le coeur et peuvent créer à leur tour de nouvelles fissions et ainsi de suite (c'est la réaction en chaîne). Pour que cette énergie soit expoitable industriellement, la réaction en chaîne doit être stable, c'est-à-dire ne pas s'éteindre et surtout ne pas s'emballer. On voit donc l'intérêt de la modélisation de la population neutronique.

Le problème neutronique considéré dans l'industrie a été simplifié pour être mis sous la forme d'un problème académique constituant un sujet de projet "faisable". On modélise un coeur par un carré (travail en dimension 2) et on travaille avec des grandeurs non physiques.

2 Les équations de neutronique

2.1 Les équations sous forme forte

On considère un domaine Ω et on s'intéresse à l'évolution de la population des neutrons dans ce dernier. On note Σ la section efficace macroscopique (elle s'exprime en cm^{-1}). Son inverse peut-être interprété comme un libre parcours moyen du neutron dans la matière. On appelle *flux neutronique*, noté ϕ, le produit de la densité de neutrons par la section efficace. On note J le vecteur *courant* tel que $J.nds$ correspond au nombre de neutrons traversant la surface ds de normale n. Le scalaire D est le coefficient de diffusion (exprimé en cm). En première approche, il est égal à $\dfrac{1}{3\Sigma}$.

On choisit de travailler en formulation mixte exprimée en flux-courant. Les équations sont

$$div(J) + \Sigma\phi = f \quad \text{dans } \Omega\,, \tag{1}$$

$$\nabla\phi + \frac{1}{D}J = 0 \quad \text{dans } \Omega\,. \tag{2}$$

f représente le terme source, c'est une donnée du problème.

On prend des conditions aux limites, sur le bord $\partial\Omega$, de type Dirichlet homogène pour le flux, soit

$$\phi = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega\,. \tag{3}$$

Cette condition matérialise le bord d'un matériau très absorbant.

Les équations (1), (2) associée à la condition aux limites (3) constituent notre problème noté $\mathcal{P}$. Nous allons chercher une solution approchée de $\mathcal{P}$.

2.2 Les équations sous forme faible

On suppose dans la suite que $f \in L^2(\Omega)$. Σ et D sont des fonctions continues par morceaux et strictement positives.

Question 1 *Écrire la formulation variationnelle (FV) associée à $\mathcal{P}$, en prenant comme espace de travail pour le flux-courant $V = L^2(\Omega) \times H_{div}(\Omega)$, sous la forme*
Trouver $(\phi, J) \in V \,/\, \forall (\psi, K) \in V$

$$\begin{aligned} a_1(\phi,\psi) + b(J,\psi) &= l(\psi) \\ a_2(J,K) - b(K,\phi) &= 0 \end{aligned}$$

Expliciter a_1,a_2, b et l.

On rappelle que

$$H_{div}(\Omega) = \left\{ J \in (L^2(\Omega))^2 \,/\, div(J) \in L^2(\Omega) \right\},$$

et

$$||J||^2_{H_{div}(\Omega)} = ||J||^2_{(L^2(\Omega))^2} + ||div(J)||^2_{L^2(\Omega)}\,.$$

On admet que (FV) admet une unique solution $(\phi, J) \in V$.

Question 2 *Montrer que l'unique solution $(\phi, J) \in V$ de (FV) est solution de (P).*
On utilisera les propriétés suivantes : pour $J \in H_{div}(\Omega)$, $J.n \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \supset H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ et $H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ est dense dans $L^2(\partial\Omega)$.

3 Discrétisation en espace

3.1 Le problème matriciel

On discrétise la formulation variationnelle précédente par éléments finis. On note $V_h \in V$ l'espace de travail pour la solution approchée. On note $\{\phi_j^{\phi}\}_{j=1,N_\phi}$, $\{\phi_j^{Jx}\}_{j=1,N_{Jx}}$ et $\{\phi_j^{Jy}\}_{j=1,N_{Jy}}$ les fonctions de base pour approcher le flux et le courant (composantes x et y)

$$V_h = \{\phi_j^{\phi}\}_{j=1,N_\phi} \otimes (\{\phi_j^{Jx}\}_{j=1,N_{Jx}} \otimes \{\phi_j^{Jy}\}_{j=1,N_{Jy}})\,.$$

Question 3 *Écrire le problème discrétisé sous la forme matricielle suivante*

$$M_\phi \phi + Rx^T Jx + Ry^T Jy = F \quad (4)$$
$$M_{Jx} Jx - Rx\phi = 0 \quad (5)$$
$$M_{Jy} Jy - Ry\phi = 0\,. \quad (6)$$

Expliciter les coefficients des matrices M_ϕ, Rx, Ry, M_{Jx}et M_{Jy} et du vecteur F en fonction des fonctions de bases.

Quelles sont les propriétés des matrices M_ϕ, M_{Jx}et M_{Jy} ?

3.2 Résolution du problème matriciel

Question 4 *Écrire (4),(5) et (6) sous la forme $AX = B$. Quelles sont les propriétés de la matrice A (taille, symétrie ...) ? La matrice A est-elle définie positive ?*

On choisit de résoudre le problème matriciel en trois étapes :

1. on exprime ϕ en fonction de Jx et Jy ;
2. on remplace ϕ par sa nouvelle expression pour obtenir une équation en Jx et une équation en Jy ;
3. on détermine Jx et Jy et on calcule ensuite ϕ.

Question 5 *Écrire la démarche précédente sous la forme de systèmes matriciels. Quelles sont la nature des opérations (multiplications, inversions, tailles et propriétés des matrices ...) à chaque étape ? Quel est l'intérêt de cette démarche par rapport à la résolution globale $AX = B$?*

4 Détermination des coefficients des matrices

Ω est dorénavent un rectangle qu'on maille avec des carrés de côté h. On choisit de travailler avec les éléments finis de Raviart Thomas RT_1. Le flux est approché par des fonctions affines par maille et le courant par des fonctions paraboliques par mailles et **continues** sur Ω.

4.1 L'élément de référence

On travaille avec un carré $Q = [-1; 1] \times [-1; 1]$.

4.1.1 Degrés de liberté pour le flux

Question 6 *Déterminer les scalaires β_1 et β_2 (on choisira $\beta_2 > \beta_1$) tels qu'en posant*

$$L_1(x) = \frac{x - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2} \quad et \quad L_2(x) = \frac{x - \beta_1}{\beta_2 - \beta_1}$$

on ait

$$\int_{-1}^{1} L_i(x) L_j(x) dx = \delta_{ij} \, .$$

Tracer les fonctions L_1 et L_2.

Pour l'élément de référence les fonctions de bases sont $L_1(x)L_1(y)$, $L_2(x)L_1(y)$, $L_1(x)L_2(y)$ et $L_2(x)L_2(y)$. On choisit de numéroter les degrés de liberté (DDL) locaux comme indiqué sur la figure 1.

4.1.2 Degrés de liberté pour le courant

On définit les fonctions suivantes

$$\begin{aligned} P_1(x) &= 1 - \int_{-1}^{x} L_1(t) dt \\ P_2(x) &= -\int_{-1}^{x} L_2(t) dt + \int_{-1}^{x} L_1(t) dt \\ P_3(x) &= \int_{-1}^{x} L_2(t) dt \, . \end{aligned}$$

Question 7 *Tracer les fonctions P_1, P_2 et P_3 sur $[-1; 1]$.*

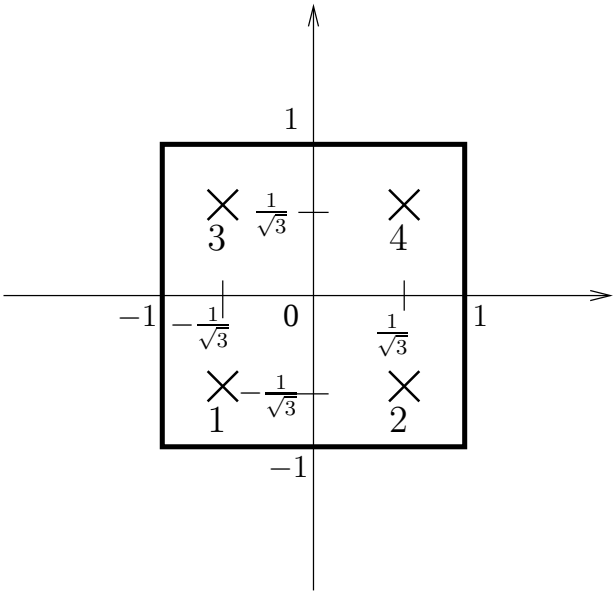

FIG. 1 – Numérotation des DDL locaux pour le flux

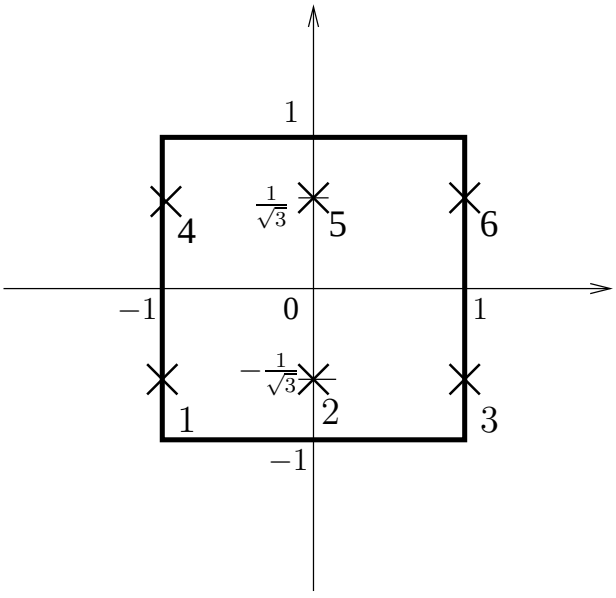

FIG. 2 – Numérotation des DDL locaux pour la composante x du courant

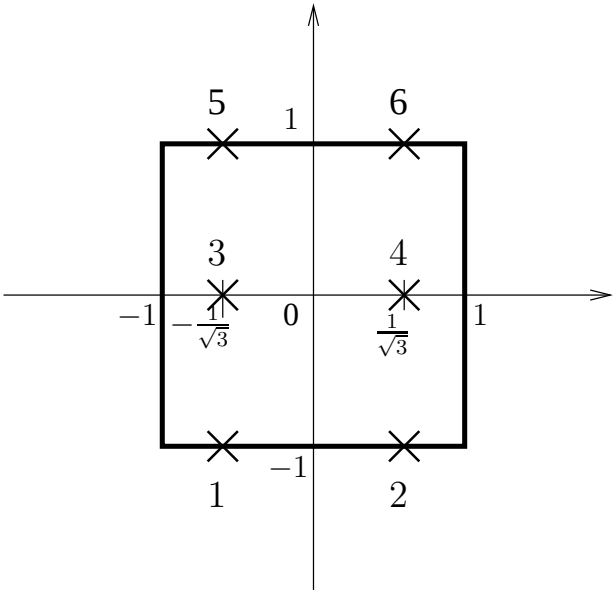

FIG. 3 – Numérotation des DDL locaux pour la composante y du courant

Les fonctions de base pour la composante suivant x du courant sur l'élément de référence sont $P_1(x)L_1(y)$, $P_2(x)L_1(y)$, $P_3(x)L_1(y)$, $P_1(x)L_2(y)$, $P_2(x)L_2(y)$, $P_3(x)L_2(y)$. Les DDL sont numérotés comme indiqué sur la figure 2.

Les fonctions de base pour la composante suivant y du courant sur l'élément de référence sont $L_1(x)P_1(y)$, $L_2(x)P_1(y)$, $L_1(x)P_2(y)$, $L_2(x)P_2(y)$, $L_1(x)P_3(y)$, $L_2(x)P_3(y)$. Les DDL sont numérotés comme indiqué sur la figure 3.

Question 8 *Calculer les intégrales suivantes*

$$\int_Q div(J)\phi\,, \quad \int_Q \Sigma\phi\psi\,, \quad \int_Q \frac{1}{D}JK\,,$$

où J, K, ϕ et ψ parcourent les fonctions de bases pour l'élément de référence. On pourra utiliser une méthode d'intégration numérique

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \left(f\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + f\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right)\right)\,,$$

qui est exacte pour les polynômes de degrés inférieurs à 3. Vérifier sur quelques coefficients que l'erreur commise, avec cette approximation pour le calcul de $\int_Q \frac{1}{D}JK$, est faible et qu'elle est nulle pour les deux autres intégrales.

4.2 L'élément courant

Dans cette sous-section, on travaille avec un carré $Q_{ij} = [ih; (i+1)h)] \times [jh; (j+1)h)]$.

Question 9 *Décrire la transformation géométrique qui permet de transformer Q en Q_{ij}.*

Question 10 *Sans refaire tous les calculs et en utilisant les deux questions précédentes, donner la valeur (ou valeur approchée) des intégrales*

$$\int_{Q_{ij}} div(J)\phi\,, \quad \int_{Q_{ij}} \Sigma\phi\psi\,, \quad \int_{Q_{ij}} \frac{1}{D}JK\,,$$

où J, K, ϕ et ψ parcourent les fonctions de bases pour l'élément courant Q_{ij}.

4.3 Assemblage

On construit les matrices correspondant au domaine Ω en utilisant les résultats de la question précédente. On choisit de numéroter les DDL globaux comme indiqué sur les figures 4, 5 et 6.

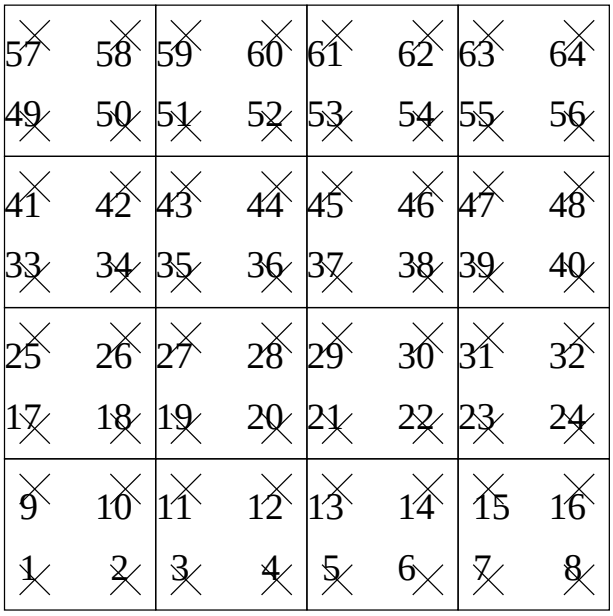

FIG. 4 – Numérotation des DDL globaux pour le flux

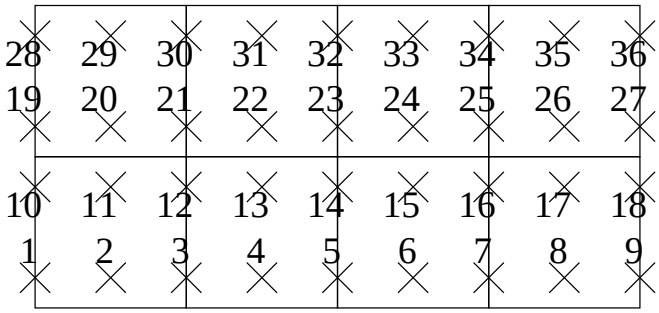

FIG. 5 – Numérotation des DDL globaux pour la composante x du courant

Question 11 *Donner les fonctions "locales-globales" permettant de passer de la numérotation locale à la numérotation globale pour le flux et les 2 composantes du courant.*

Question 12 *Décrire les fonctions de base globales ϕ_j^{ϕ}, ϕ_j^{Jx} et ϕ_j^{Jy} en utilisant les questions précédentes. On remarquera que le support des fonctions de base pour le flux est une maille alors que celui des fonctions de base pour le courant est de 2 mailles (les fonctions sont continues), sauf au bord du domaine.*

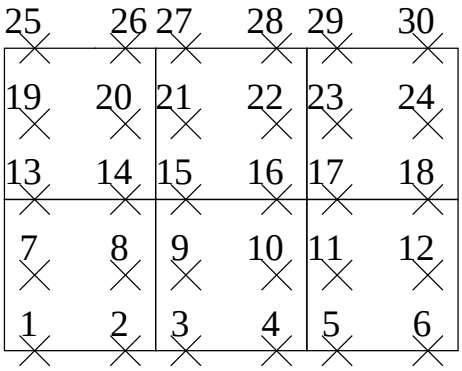

FIG. 6 – Numérotation des DDL globaux pour la composante y du courant

Question 13 *En utilisant les résultats de la question 10, donner les coefficients des matrices* M_ϕ, Rx, Ry, M_{Jx} *et* M_{Jy}.

4.4 Calcul du second membre

Pour des raisons de simplicité, on choisit de prendre la source f sous la forme $f = \sum_i f_i \phi_i^\phi$. Autrement dit, on se donne la valeur de f aux points où sont localisés les DDL globaux du flux.

Question 14 *Exprimer les seconds membres des systèmes matriciels établis aux questions 4 et 5 en fonction des* f_i.

5 Résultats numériques

5.1 Implémentation

Question 15 *Programmer les résolutions numériques des systèmes matriciels établis aux questions 4 et 5, de préférence en matlab ou en scilab. Travailler dans un premier temps en matrices pleines puis en matrices creuses (commande* sparse *en matlab). Comparer les performances en utilisant une inversion standard (commande* inv *en matlab) et un gradient conjugué précédé d'une décomposition LU.*

Question 16 *Écrire une procédure de post-traitement permettant de reconstruire le flux et les 2 composantes du courant sur le domaine* Ω *à partir des vecteurs solutions des systèmes matriciels. On tracera les solutions de préférence avec les commandes* surf *et* view(2) *de matlab.*

5.2 Simulation numérique

On prend en entrée les données suivantes :
- largeur du domaine rectangle : $Li = 1$;
- hauteur du domaine rectangle : $Lj = 1$;
- pas du maillage $h = 0.1$;
- $\Sigma = 2$;
- $D = 1/(3 * \Sigma)$;

Question 17 *Tracer les profils des matrices et commenter. Expliquer la différence de profils entre Rx et Ry.*

On choisit de prendre dans un premier temps $f_i = 1$ constant dans un carré situé au centre du domaine et de côté de longueur 0.4 et nul ailleurs.

Question 18 *Que vaut le flux ϕ sur le bord $\partial\Omega$? Commenter. Refaire une simulation en divisant le pas h par 2 puis 3 ... Que vaut le flux ϕ sur le bord $\partial\Omega$? Expliquer pourquoi on dit que la condition aux limites est prise au sens faible ?*

Question 19 *Faire varier le coefficient Σ et commenter.*

Question 20 *Modifier les valeurs des données d'entrée et de la source f. Commenter les résultats.*