

Modélisation et simulation
des phénomènes de transport de particules neutres

notes de cours



© 2014–2017 François Févotte et Gérard Samba.

Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la License Creative Commons : Attribution – Pas d’Utilisation Commerciale – Partage dans les Mêmes Conditions.

Table des matières

1	Modélisation	1
1.1	Transport neutronique	1
1.1.1	Population neutronique	1
1.1.2	Interactions neutrons-matière	1
1.1.3	Equation de Boltzmann 3D	2
1.1.4	Conditions aux limites	2
1.1.5	Géométrie 1D “slab”	3
1.2	Cas stationnaire	4
1.2.1	Problème à source	4
1.2.2	Problème à valeurs propres	5
1.3	Représentation des dépendances angulaires	6
1.3.1	Polynômes de Legendre et harmoniques sphériques	6
1.3.2	Anisotropie de la source de diffusion	7
1.4	Approximation multigroupe	8
1.5	Problème modèle	8
1.5.1	Caractère bien posé	9
1.5.2	Lien transport-diffusion	10
2	Méthodes de référence	15
2.1	Calcul analytique	15
2.1.1	Solution exacte dans un milieu purement absorbant	15
2.1.2	Solution stationnaire exacte dans un milieu homogène diffusif	18
2.2	Monte Carlo	19
2.2.1	Lien entre méthode de Monte Carlo et équation de Boltzmann	23
2.2.2	Précision d’une méthode Monte-Carlo par rapport à une méthode déterministe	25
3	Méthodes déterministes	27
3.1	Discrétisation angulaire	27
3.1.1	Méthode P_N	27
3.1.2	Méthode des ordonnées discrètes (S_N)	28
3.1.3	Equivalence en 1D de la méthode des ordonnées discrètes S_N et de la méthode P_{N-1}	28
3.2	Discrétisation spatiale – schéma diamant	29
3.2.1	Conditions de positivité du flux	30
3.3	Accélération des itérations de scattering	30
3.3.1	Analyse spectrale	30
3.3.2	Accélération par Diffusion Synthétique(DSA)	31
3.4	Limite Diffusion	32
3.4.1	Limite diffusion	34
3.4.2	Limite diffusion du schéma Diamant	38
A	Notations employées	41
B	Equation du transport dans diverses géométries	43
B.1	1D plan infini	43
B.2	1D sphérique	43
B.3	2D plan	44
B.4	2D axisymétrique	44
C	Problème de Milne	45

Chapitre 1

Modélisation

1.1 Transport neutronique

1.1.1 Population neutronique

Chaque neutron apparaissant à un instant t dans un système donné peut être caractérisé par les variables suivantes :

$\vec{r} = (x, y, z)$	– position
v ou E ($E = \frac{1}{2} m v^2$)	– vitesse ou énergie
$\vec{\Omega}$	– vecteur unitaire de direction

Lorsque le système est suffisamment riche en neutrons, la population neutronique peut être représentée de manière statistique par la densité neutronique $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ ou le flux neutronique $\Phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = v n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$.

1.1.2 Interactions neutrons-matière

En l'absence de matière, les neutrons avancent en ligne droite selon leur vitesse. En revanche, lors de la traversée d'un matériau dense, diverses interactions neutron-noyau viennent perturber la trajectoire des neutrons. Sans entrer dans trop de détails, on peut lister :

- les absorptions : le neutron rencontre un noyau et y est absorbé. Ceci a des conséquences sur ledit noyau, qui sortent du cadre de ce cours ;
- les chocs élastiques : le neutron entre en collision avec un noyau et “rebondit” en voyant sa vitesse modifiée (à la fois en direction et en énergie) ;
- les fissions : le neutron collisionne avec un noyau fissile et engendre une réaction de fission. Le noyau se décompose en plusieurs fragments produisant ainsi de l'énergie. Un certain nombre de neutrons sont émis à cette occasion, dont la direction est indépendante du neutron incident, et dont l'énergie obéit à un certain spectre dépendant du noyau.

Ces différentes interactions sont caractérisées par des *sections efficaces*. Dans un matériau donné, la probabilité pour un neutron d'interagir avec un noyau est directement proportionnelle à la longueur de matériau traversé. Le coefficient de proportionnalité est appelé *section efficace macroscopique*, et noté Σ :

$$p_{inter}(l) = \Sigma l.$$

La section efficace macroscopique est homogène à l'inverse d'une longueur, et est généralement mesurée en cm^{-1} .

Il paraît par ailleurs naturel de considérer que la section efficace macroscopique est directement proportionnelle à la densité de noyaux dans le matériau traversé. On peut ainsi définir la *section efficace microscopique*, notée σ :

$$\Sigma = \sigma \rho,$$

où ρ est la densité de noyaux dans le matériau considéré, exprimée en nombre de noyaux par unité de volume. La section efficace microscopique σ est donc homogène à une surface (ce qui explique d'ailleurs son appellation de “section”), généralement exprimée en *barn* ($1b = 10^{-24}cm^2$).

1.1.3 Equation de Boltzmann 3D

L'équation du transport des neutrons, qui permet de modéliser le flux neutronique, prend la forme d'une équation cinétique de Boltzmann, dans laquelle les interactions entre neutrons sont négligées. Pour un domaine géométrique $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^3$, cette équation peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \overbrace{L\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}^{\text{transport \& collisions}} \\ = \underbrace{H\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{transfert}} + \underbrace{F\Phi(\vec{r}, E, t)}_{\text{fission}} + \underbrace{S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{sources externes}} \quad \text{dans } \mathcal{X}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

où \mathcal{X} est l'espace des phases associé aux variables $(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$:

$$\mathcal{X} = \mathcal{D} \times [E_{\min}, E_{\max}] \times \mathcal{S}_2,$$

L , H et F sont des opérateurs explicités ci-dessous, et S représente une éventuelle source neutronique externe au système considéré.

Cette forme intégral-différentielle de l'équation de transport est simplement obtenue en établissant le bilan neutronique dans un élément différentiel de l'espace des phases. Trois phénomènes sont considérés :

— l'opérateur L prend en compte les fuites (transport spatial) ainsi que les collisions :

$$L\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t);$$

— l'opérateur H prend en compte le transfert en angle et en énergie (*scattering*) :

$$H\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \int_{E'} dE' \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, t) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t);$$

— l'opérateur F caractérise la production de neutrons par fission :

$$F\Phi(\vec{r}, E, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_i(E) \int_{E'} dE' \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_{fi}(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t),$$

où la sommation en i se fait sur tous les isotopes fissiles présents au point \vec{r} .

Les notations suivantes ont été employées :

$\Sigma_t(\vec{r}, E, t)$	— section efficace macroscopique totale ;
$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}, t)$	— section efficace différentielle de diffusion ;
$\chi_i(E)$	— spectre de fission pour l'isotope i ;
$\nu \Sigma_{fi}(\vec{r}, E', t)$	— nombre moyen de neutrons produits \times section de fission pour l'isotope i ;
$S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$	— source externe de neutrons.

1.1.4 Conditions aux limites

L'équation de Boltzmann (1.1) est assortie de conditions aux limites du domaine, exprimées sur la frontière entrante de l'espace des phases :

$$\partial\mathcal{X}_- = \left\{ (\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \in \mathcal{X}; \vec{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et } \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0 \right\},$$

où $\partial\mathcal{D}$ est la frontière du domaine géométrique \mathcal{D} et \vec{n} est le vecteur normal à cette frontière.

Suivant la nature du problème modélisé, les conditions aux limites peuvent être de deux types. Il peut s'agir d'une condition de type Dirichlet, dans laquelle on impose une valeur du flux angulaire entrant qui sera vu comme une source surfacique de neutrons. C'est par exemple le cas d'un domaine géométrique convexe entouré par le vide, qu'on modélisera par la condition aux limites suivante :

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = 0 \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-. \quad (1.2)$$

On peut aussi utiliser des conditions aux limites modélisant un déplacement géométrique particulier. Par exemple dans le cas de domaines symétriques ou répétitifs, le problème du transport n'est résolu que sur le motif élémentaire avec des conditions aux limites de réflexion spéculaire (1.3), translation (1.4) ou rotation (1.5) :

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega} - 2\vec{n}(\vec{\Omega} \cdot \vec{n})) \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-, \quad (1.3)$$

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Phi(\vec{r} - \vec{t}, E, \vec{\Omega}) \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-, \quad (1.4)$$

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Phi(r_{-\theta}(\vec{r}), E, r_{-\theta}(\vec{\Omega})) \quad \text{sur } \partial\mathcal{X}_-. \quad (1.5)$$

Dans ces expressions, \vec{t} représente le vecteur caractérisant la translation et r_θ est l'opérateur de rotation d'angle θ .

1.1.5 Géométrie 1D “slab”

On suppose maintenant que la géométrie étudiée est infinie et homogène dans les directions y et z :

$$\begin{aligned} \forall (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \forall E \in [E_{min}, E_{max}], \forall t \in \mathbb{R}^+, \\ \Sigma_R((x, y, z), E, t) = \Sigma_R((x, 0, 0), E, t), \end{aligned}$$

pour toutes les sections efficaces macroscopiques Σ_R (où R désigne un type d'interaction) permettant de caractériser les matériaux présents. On suppose de plus que le terme source respecte la même invariance :

$$\begin{aligned} \forall (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \forall \vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \forall E \in [E_{min}, E_{max}] \forall t \in \mathbb{R}^+, \\ S((x, y, z), \vec{\Omega}, E, t) = S((x, 0, 0), \vec{\Omega}, E, t). \end{aligned}$$

Ce type de géométrie correspond à une sorte de “dalle” infinie, dans laquelle la seule dimension intéressante est l'épaisseur. On s'y réfère en général sous l'appellation anglo-saxonne de “slab”.

Toutes les données du problème étant invariantes par translation dans toute direction orthogonale à l'axe (O, x) . Il en va de même pour la solution :

$$\begin{aligned} \forall (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \forall (\vec{\Omega}, E, t), \\ \Phi((x, y, z), \vec{\Omega}, E, t) = \Phi((x, 0, 0), \vec{\Omega}, E, t). \end{aligned}$$

Par ailleurs, les données du problème étant aussi invariantes par rotation autour de l'axe (O, x) . La solution possède elle aussi cette propriété :

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathbb{R}, \forall \vec{\Omega} = (\mu, \varepsilon, \eta) \in \mathcal{S}^2, \forall (E, t), \\ \Phi(x, (\mu, \varepsilon, \eta), E, t) = \Phi\left(x, \left(\mu, \sqrt{1 - \mu^2}, 0\right), E, t\right). \end{aligned}$$

On cherchera donc la solution sous la forme $\Phi(x, \mu, v, t)$. En paramétrisant la sphère unité \mathcal{S}^2 par le couple d'angles (θ, ϕ) tel que :

$$\vec{\Omega} = \begin{pmatrix} \mu \\ \varepsilon \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \phi \\ \cos \phi \cos \theta \\ \cos \phi \sin \theta \end{pmatrix},$$

on obtient

$$\begin{aligned} \forall f \in L^2(\mathcal{S}^2), \\ \iint_{\mathcal{S}^2} f(\vec{\Omega}) d^2\Omega = \int_0^{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} f(\vec{\Omega}) \left\| \frac{\partial \vec{\Omega}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \vec{\Omega}}{\partial \phi} \right\| d\phi d\theta \\ = \int_0^{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} f(\vec{\Omega}) \cos \phi d\phi d\theta \\ = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 f(\vec{\Omega}) d\mu d\theta, \end{aligned}$$

où la dernière égalité a été obtenue par le changement de variable $\mu = \sin \phi$.

Dans le cas qui nous intéresse, le flux Φ ne dépend que de μ . On a donc de plus :

$$\begin{aligned} \iint_{\mathcal{S}^2} \Phi(x, \mu, E, t) d^2\Omega = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \Phi(x, \mu, E, t) d\mu d\theta \\ = 2\pi \int_{-1}^1 \Phi(x, \mu, E, t) d\mu. \end{aligned}$$

On en déduit donc la formulation 1D de l'équation du transport en géométrie *slab* :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t}(x, \mu, E, t) + \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, \mu, E, t) + \Sigma_t(x, E, t) \Phi(x, \mu, E, t) = S(x, \mu, E, t) \\ + 2\pi \int_{E'} \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E, t) \Phi(x, \mu', E', t) d\mu' dE' \\ + \frac{1}{2\pi} \sum_i \chi_i(E) \int_{E'} \int_{-1}^1 \nu \Sigma_{f_i}(x, E', t) \Phi(x, \mu', E', t) d\mu' dE'. \end{aligned} \quad (1.6)$$

1.2 Cas stationnaire

La caractérisation de la population neutronique dans un système est par nature un phénomène dépendant du temps. Il existe cependant des situations pratiques dans lesquelles il est naturel de rechercher une solution indépendante du temps.

1.2.1 Problème à source

Certains problèmes sont essentiellement conditionnés par une source externe. C'est le cas par exemple de la radiographie industrielle, qui consiste à placer une source de rayons X à côté d'une pièce à étudier (un tuyau, une soudure. . .). L'étude du rayonnement ayant traversé la pièce permet de déterminer la présence et la position d'éventuels défauts.

Du côté de la neutronique, ce genre de problème apparaît pour les études de radioprotection : le cœur du réacteur est considéré comme une source constante, l'objet de l'étude étant la quantité de rayonnement présent dans le reste de la centrale (cuve, bâtiment réacteur, et au delà).

Dans ce type de problème, la source est maintenue constante pendant une durée bien supérieure à celle de la cinétique du transport de particules, ainsi que l'ensemble des paramètres physiques du problème (notamment les sections efficaces). Par ailleurs, la fission est absente de ces problèmes. On obtient ainsi l'équation de Boltzmann stationnaire :

$$\overbrace{L\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}^{\text{transport \& collisions}} = \underbrace{H\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}_{\text{transfert}} + \underbrace{S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}_{\text{sources externes}}. \quad (1.7)$$

On peut montrer que ce problème est bien posé sous les hypothèses suivantes :

- il y a de l'absorption partout dans le système : $\Sigma_a(\vec{r}, E) > 0, \forall \vec{r}, E$;
- les conditions aux limites correspondent à un flux entrant nul (1.2) ou un milieu périodique (1.3), (1.4) ou (1.5).

L'idée de la preuve est la suivante : on construit la suite récurrente $(\Phi^n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie par

$$\begin{aligned} L\Phi^0 &= S, \\ L\Phi^n &= H\Phi^{n-1} + S, \quad \forall n \geq 1. \end{aligned}$$

Avec cette définition, le flux Φ^0 correspond au flux en l'absence de collisions : on parle du flux non collisionné. Le flux Φ^1 est obtenu comme solution d'un problème dont la source $H\Phi^0$ de collision a été obtenue avec le flux non collisionné. Φ^1 est donc le flux correspondant à des particules ayant subi au plus une collision : on parle du flux de première collision. Plus généralement, Φ^n est appelé flux de n -ème collision, et correspond aux particules ayant subi au plus n collisions.

On définit ensuite la suite $(\varepsilon^n)_{n \in \mathbb{N}}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 &= \Phi^0, \\ \varepsilon^n &= \Phi^n - \Phi^{n-1}, \quad \forall n \geq 1. \end{aligned}$$

En reprenant les interprétations précédentes, ε^n est le flux correspondant aux particules ayant subi exactement n collisions. En réalisant un bilan global sur l'intégralité de l'espace des phases, on cherche à montrer que ce nombre de particules tend vers 0 :

$$\iiint_{\mathcal{D}} \iint_{S^2} \int_{\mathbb{R}^+} \varepsilon^n dE d^2\Omega d^3r \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

Ceci assure la convergence de $(\Phi^n)_n$, en tant que suite de Cauchy dans l'espace de Banach L^1 . On remarque ensuite que la limite Φ de cette suite vérifie l'équation (1.7). L'unicité se démontre par le même genre de bilan, en prouvant que la seule solution de l'équation homogène est nulle (au sens de L^1).

Sans un souci de simplicité, cette preuve n'est pas écrite intégralement ici pour le problème 3D complet, mais sera écrite dans le cadre plus simple du paragraphe 1.5.

1.2.2 Problème à valeurs propres

Le problème se complique lorsqu'on traite un problème comportant de la fission. En effet, dans ces conditions, l'hypothèse $\Sigma_a(\vec{r}, E) > 0$ ne suffit plus à assurer la décroissance de $\|\varepsilon\|_{L^1}$. De fait, cette situation ne pose pas que des difficultés théoriques puisqu'on observe en pratique des solutions instationnaires à ces problèmes.

Pour continuer à traiter de manière stationnaire les problèmes comportant de la fission, on est alors amené à considérer une équation de Boltzmann modifiée sous la forme d'un problème à valeurs propres généralisé.

Valeur propre α

On cherche la solution de l'équation de Boltzmann instationnaire sous la forme :

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = e^{\alpha t} \bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}),$$

où $e^{\alpha t}$ représente l'amplitude du flux, variant exponentiellement avec le temps, et $\bar{\Phi}$ est une fonction de forme ne dépendant que des variables de l'espace des phases.

On a alors :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{\alpha}{v} e^{\alpha t} \bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}).$$

Les opérateurs L , H , F n'agissant pas sur la variable temporelle, on a par ailleurs :

$$\begin{aligned} L\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) &= e^{\alpha t} L\bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t), \\ H\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) &= e^{\alpha t} H\bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t), \\ F\Phi(\vec{r}, E, t) &= e^{\alpha t} F\bar{\Phi}(\vec{r}, E, t). \end{aligned}$$

La fonction de forme $\bar{\Phi}$ vérifie donc une équation proche de l'équation de Boltzmann stationnaire, dans laquelle l'opérateur de transport spatial prend en compte une section efficace totale perturbée :

$$L_\alpha \bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (1.8)$$

où

$$L_\alpha \bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \left[\frac{\alpha}{v} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \bar{\Phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t).$$

Coefficient de multiplication

Une autre manière d'introduire une valeur propre dans l'équation de Boltzmann consiste à multiplier le terme de production par fission par un *coefficient de multiplication*, noté k et permettant à la fission de compenser exactement les pertes du système dues aux absorptions et fuites :

$$L\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{1}{k} F\Phi(\vec{r}, E) + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \quad (1.9)$$

Cette technique est la plus utilisée pour l'analyse des réacteurs nucléaires. La détermination du coefficient de multiplication k est une étape clé de l'étude d'un réacteur :

- si $k < 1$, le système est dit sous-critique : la population de neutrons a tendance à baisser au cours du temps ;
- si $k = 1$, le système est dit critique : il existe une solution au problème stationnaire ;
- si $k > 1$, le système est dit sur-critique : la population neutronique a tendance à augmenter au cours du temps.

C'est seulement dans le cas critique ($k_{eff} = 1$) que la solution obtenue est réellement une solution stationnaire de l'équation de Boltzmann. Dans tous les autres cas, l'équation vérifiée n'est pas celle du transport neutronique à proprement parler.

Algorithme des puissances inverses

La résolution du problème critique fait généralement appel à un algorithme de puissance inverse. Cet algorithme itératif résout une série de problèmes à source. A chaque itération $n + 1$, le nouveau flux est obtenu comme solution d'un problème où la source de fission est calculée à l'aide du flux et de la valeur propre de l'itération précédente :

$$L\Phi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = H\Phi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \frac{1}{k^n} F\Phi^n(\vec{r}, E) + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \quad (1.10)$$

En intégrant (1.9) (prise pour Φ^{n+1}) et (1.10) sur l'espace des phases, on obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} \left(L\Phi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - H\Phi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right) \\ = \frac{1}{k^{n+1}} \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\Phi^{n+1}(\vec{r}, E), \\ \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} \left(L\Phi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - H\Phi^{n+1}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right) \\ = \frac{1}{k^n} \iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\Phi^n(\vec{r}, E), \end{aligned}$$

d'où on tire la relation permettant de mettre à jour la valeur propre entre deux itérations :

$$k^{n+1} = k^n \frac{\iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\Phi^{n+1}(\vec{r}, E)}{\iiint_{\vec{r}, E, \vec{\Omega}} d\vec{r} dE d\vec{\Omega} F\Phi^n(\vec{r}, E)}. \quad (1.11)$$

1.3 Représentation des dépendances angulaires

1.3.1 Polynômes de Legendre et harmoniques sphériques

Une partie des grandeurs présentées ci-dessus sont des distributions continues bornées par rapport à la variable angulaire, qu'il s'agisse d'un cosinus directeur $\mu \in [-1; 1]$ ou de la direction $\vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2$.

Dans le premier cas, il est possible d'approcher une quantité $f(\mu)$ en en faisant un développement en polynômes de Legendre à l'ordre L :

$$f(\mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} f_l P_l(\mu),$$

où les polynômes de Legendre sont définis par la relation :

$$\begin{aligned} P_0(\mu) &= 1, \\ P_1(\mu) &= \mu, \\ P_{l+1}(\mu) &= \frac{1}{l+1} \left[(2l+1)\mu P_l(\mu) - l P_{l-1}(\mu) \right]. \end{aligned}$$

Les polynômes de Legendre vérifient les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\int_{-1}^1 d\mu P_l(\mu) P_{l'}(\mu) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'},$$

ce qui permet d'obtenir aisément le coefficient de rang l dans le développement de f :

$$f_l = \int_{-1}^1 d\mu P_l(\mu) f(\mu).$$

Dans un cas plus général, une distribution bornée et continue de la direction angulaire $f(\vec{\Omega})$ peut être approchée par un développement en harmoniques sphériques réelles à l'ordre L . Dans ce qui suit, on définira μ comme la

première composante de la direction $\vec{\Omega}$ (le cosinus de l'angle polaire), les autres composantes étant données par l'angle azimutal ϕ :

$$\vec{\Omega} = \begin{pmatrix} \mu \\ \varepsilon \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu \\ \sqrt{1-\mu^2} \cos \phi \\ \sqrt{1-\mu^2} \sin \phi \end{pmatrix}.$$

Avec ces notations, le développement d'une distribution angulaire $f(\vec{\Omega})$ peut s'écrire :

$$f(\vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l f_{l,m} A_{l,m}(\vec{\Omega}),$$

où les harmoniques sphériques réelles sont définies par :

$$A_{l,m}(\vec{\Omega}) = \sqrt{(2-\delta_{m,0}) \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\mu) T_m(\phi),$$

avec

$$P_l^m(\mu) = (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m P_l}{d\mu^m}(\mu), \quad \forall m \geq 0, \quad T_m(\phi) = \begin{cases} \cos(m\phi) & \text{si } m \geq 0, \\ \sin(|m|\phi) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Définies ainsi, les harmoniques sphériques réelles vérifient les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\int_{S^2} d^2\Omega A_{l,m}(\vec{\Omega}) A_{l',m'}(\vec{\Omega}) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'},$$

ce qui permet d'obtenir les composantes de la distribution f dans le développement en harmoniques sphériques réelles comme :

$$f_{l,m} = \int_{S^2} d^2\Omega A_{l,m}(\vec{\Omega}) f(\vec{\Omega}).$$

A titre d'illustration, les premières harmoniques sphériques réelles peuvent s'écrire ainsi en fonction des composantes de la direction $\vec{\Omega}$:

$$A_{0,0} = 1,$$

$$A_{1,-1} = \eta, \quad A_{1,0} = \mu, \quad A_{1,1} = \varepsilon.$$

1.3.2 Anisotropie de la source de diffusion

Il est intéressant d'appliquer ces développements à la définition de la source de diffusion : pour la plupart des matériaux, les milieux sont isotropes. La section efficace de diffusion $\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ ne dépend donc généralement pas de la direction du neutron incident $\vec{\Omega}$, mais seulement de l'angle de diffusion $\mu_0 = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$. Elle peut donc être représentée par un développement en polynômes de Legendre P_l :

$$\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}', E' \rightarrow E) \simeq \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E' \rightarrow E) P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'),$$

avec $\Sigma_{s,l}(\vec{r}, E' \rightarrow E) = \int_{-1}^1 d\mu_0 \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \mu_0) P_l(\mu_0).$

Quant à lui, le flux neutronique peut être décomposé en harmoniques sphériques réelles (dans les cas où il dépend continuellement de la direction angulaire) :

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \simeq \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l A_{lm}(\vec{\Omega}) \Phi_{lm}(\vec{r}, E),$$

La source de diffusion devient donc

$$\begin{aligned} Q_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_0^\infty dE' \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}') \\ &= \int_0^\infty dE' \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{s,l}(\vec{r}, E' \rightarrow E) \sum_{m=-l}^l A_{lm}(\vec{\Omega}) \Phi_{lm}(\vec{r}, E'), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le théorème d'addition des harmoniques sphériques :

$$P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \sum_{m=-l}^l A_{lm}(\vec{\Omega}) A_{lm}(\vec{\Omega}'), \quad l \geq 0.$$

1.4 Approximation multigroupe

Un traitement qu'il est possible de faire pour simplifier la dépendance énergétique des grandeurs considérées (sections efficaces et flux) est l'approximation multigroupe. L'immense majorité des outils de simulation de transport déterministes utilisent cette méthode pour la discrétisation de la variable énergétique. Bien que non strictement nécessaire dans la simulation du transport par méthodes de Monte Carlo, il est aussi possible de l'appliquer dans ce cadre, ce qui simplifie le traitement des données nucléaires.

Nous discrétisons la variable E en considérant des groupes, indexés par g , d'énergie comprise entre E_g et E_{g-1} . On suppose la variable énergétique séparable des autres à l'intérieur de chaque intervalle :

$$\begin{aligned} \exists f^g \text{ telle que } & \int_{E_g}^{E_{g-1}} f^g(E) dE = 1 \\ \text{et } & \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = f^g(E) \Phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad \forall \vec{r} \in \mathcal{D}, \forall \vec{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \forall E \in [E_g, E_{g-1}]. \end{aligned}$$

Il est alors possible d'intégrer l'équation de Boltzmann dans chacun des groupes d'énergie pour obtenir un système de G équations couplées :

$$(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_t^g(\vec{r})) \Phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (1.12)$$

où $Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ rassemble toutes les sources de neutrons, provenant de la fission ou des diffusions :

$$\begin{aligned} Q^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = & \sum_{g'} \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \\ & + \frac{1}{k} \frac{1}{4\pi} \sum_i \chi_i^g \sum_{g'} \int_{\vec{\Omega}'} d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_{fi}^{g'}(\vec{r}) \Phi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \\ & + \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE Q_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \end{aligned}$$

L'équation multigroupe ci-dessus fait appel à des sections efficaces multigroupes, dont la définition est donnée par :

$$\begin{aligned} \Sigma_t^g(\vec{r}) = & \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma_t(\vec{r}, E) f^g(E); \\ \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = & \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) f^{g'}(E'). \end{aligned} \quad (1.13)$$

La détermination de la forme de dépendance énergétique du flux f^g ainsi que des sections efficaces multigroupes est un problème extrêmement complexe qui n'est pas abordé ici.

Le système multigroupe (1.12) est généralement résolu grâce à un processus itératif conventionnel. Dans les groupes de haute énergie, les diffusions ne font que ralentir les neutrons (on parle de ralentissement pur). Le calcul des sources externes à un groupe g fait alors intervenir seulement les groupes g' d'énergie supérieure ($g' < g$). En résolvant successivement les équations monocinétiques pour les groupes d'énergie décroissante, on peut donc supposer les sources de transfert connues. En revanche, dans le domaine de plus faible énergie, le phénomène de thermalisation des neutrons induit un couplage entre les groupes. La résolution des équations monocinétiques pour les groupes thermiques doit donc se faire de manière simultanée (en pratique avec un algorithme de Gauss-Seidel).

Dans la suite de ce document, nous considérerons l'équation intégral-différentielle du transport uniquement en théorie multigroupe. Autant que possible, nous omettrons les indices de groupes pour éviter de surcharger les notations.

1.5 Problème modèle

Les différents traitements de l'équation de Boltzmann vus jusqu'ici permettent de définir un problème à source, monocinétique (*i.e.* à un groupe d'énergie), en géométrie 1D *slab* avec collisions isotropes (Σ_s ne dépend pas de la direction) :

$$\begin{aligned} \forall x \in [0, 1], \forall \mu \in [-1, 1], \\ \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t(x) \Phi(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_s(x) \int_{-1}^1 \Phi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Ce problème peut servir de modèle simplifié pour la résolution de l'équation de Boltzmann, dans la mesure où, grâce aux techniques vues ci-dessus (discrétisation multigroupe et itérations de puissance inverse), tout problème de criticité peut se ramener à une suite de résolutions de problèmes à source monocinétiques.

Nous profitons de ce cadre simplifié pour montrer ci-dessous quelques résultats.

1.5.1 Caractère bien posé

Nous considérons ici le cadre de l'équation modèle ci-dessus, dans laquelle on a relaxé l'hypothèse d'isotropie des collisions (la section efficace de *scattering* dépend de la direction). On munit le problème de conditions aux limites de vide (flux entrant nul, similaires aux conditions exprimées par (1.2) en 3D) :

$$\begin{aligned} \forall x \in [0, 1], \forall \mu \in [-1, 1], \\ \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t(x) \Phi(x, \mu) = \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu) \Phi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu), \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned} \forall \mu \in [-1, 0], \\ \Phi(1, \mu) = 0, \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \forall \mu \in [0, 1], \\ \Phi(0, \mu) = 0. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Nous reprenons plus en détails le processus de preuve évoqué au paragraphe 1.2.1. On construit la suite des flux collisionnés n fois, définis par :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi^0}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t(x) \Phi^0(x, \mu) = S(x), \\ \mu \frac{\partial \Phi^n}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t(x) \Phi^n(x, \mu) = \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu) \Phi^{n-1}(x, \mu') d\mu' + S(x), \end{cases} \quad \forall n \geq 1.$$

La solution d'un problème à source fixe sans collisions est aisée : il suffit d'inverser l'opérateur d'advection-absorption. Dans le cas par exemple de l'équation pour Φ^0 , on obtient

$$\Phi^0(x, \mu) = \begin{cases} \int_0^x \frac{S(x')}{\mu} e^{-\frac{\tau(x', x)}{\mu}} dx', & \text{si } \mu > 0, \\ -\int_x^1 \frac{S(x')}{\mu} e^{\frac{\tau(x, x')}{\mu}} dx', & \text{si } \mu < 0, \end{cases}$$

où $\tau(a, b) = \int_a^b \Sigma_t(x) dx$ représente l'épaisseur optique du matériau entre les cotes données par a et b .

Une conséquence immédiate de ce résultat est la positivité du flux : si $\Phi^0(0) > 0$ et $S(x) \geq 0$, alors $\Phi^0(x) \geq 0$. Par récurrence, ce résultat s'étend à $\Phi^n, \forall n \geq 1$.

En définissant $\varepsilon^0 = \Phi^0$ et $\varepsilon^n = \Phi^n - \Phi^{n-1}, \forall n \geq 1$, on a :

$$\mu \frac{\partial \varepsilon^n}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t(x) \varepsilon^n(x, \mu) = \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu) \varepsilon^{n-1}(x, \mu') d\mu'.$$

Pour les mêmes raisons que précédemment, et sous les mêmes hypothèses, on montre aisément que $\varepsilon^n \geq 0, \forall n \geq 1$.

En intégrant l'équation ci-dessus sur l'espace des phases, on obtient :

$$\int_0^1 \int_{-1}^1 \mu \frac{\partial \varepsilon^n}{\partial x}(x, \mu) d\mu dx + \int_0^1 \int_{-1}^1 \Sigma_t(x) \varepsilon^n(x, \mu) d\mu dx = \int_0^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu) \varepsilon^{n-1}(x, \mu') d\mu' d\mu dx.$$

En remarquant que :

$$\int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu) d\mu = \Sigma_s(\mu')$$

et que

$$\int_0^1 \int_{-1}^1 \mu \frac{\partial \varepsilon^n}{\partial x}(x, \mu) d\mu dx = \int_{-1}^1 \mu \left[\varepsilon^n(., \mu) \right]_0^1 d\mu \geq 0,$$

on obtient

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{-1}^1 \Sigma_t(x) \varepsilon^n(x, \mu) d\mu dx &\leq \int_0^1 \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu) \varepsilon^{n-1}(x, \mu) d\mu dx \\ &\leq \left\| \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \right\|_\infty \int_0^1 \int_{-1}^1 \Sigma_t(x, \mu) \varepsilon^{n-1}(x, \mu) d\mu dx, \end{aligned}$$

d'où

$$\int_0^1 \int_{-1}^1 \Sigma_t(x) \varepsilon^n(x, \mu) d\mu dx \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0,$$

sous la condition (vérifiée si tous les matériaux du système présentent des sections efficaces d'absorption non nulles) :

$$\left\| \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \right\|_\infty < 1. \quad (1.18)$$

Si de plus $\Sigma_t > 0$ (hypothèse vérifiée si la géométrie ne contient pas de matériau vide), et sachant que $\varepsilon^n \geq 0$, on a montré que ε^n est de Cauchy dans L^1 , qui est de Banach. Donc

$$\Phi^n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{L^1} \Phi,$$

et la limite Φ vérifie par continuité l'équation (1.15).

1.5.2 Lien transport-diffusion

Nous nous intéressons au comportement des méthodes numériques pour résoudre (1.14) dans les milieux diffusifs. Ces milieux sont caractérisés par un libre-parcours moyen (le libre-parcours moyen $\frac{1}{\Sigma_t}$ est la distance moyenne entre deux collisions) petit par rapport aux dimensions caractéristiques du milieu et par des absorptions rares par rapport aux collisions isotropes. La méthode Monte-Carlo précédemment décrite est alors extrêmement coûteuse puisque chaque particule subit un grand nombre de collisions avant de sortir du domaine. Sa marche aléatoire s'apparente alors à un mouvement brownien qui peut être décrit par une équation de diffusion. La méthode dite de Random Walk [21] utilise cette propriété pour réduire le temps de calcul consacré à la poursuite des particules dans de tels milieux. Il est donc crucial de pouvoir déterminer quelle est l'équation de diffusion sous-jacente.

Pour cela, en suivant [29, 41], on introduit un petit paramètre ϵ qui représente le rapport du libre-parcours à une dimension caractéristique du milieu et on fait la mise à l'échelle suivante :

$$\Sigma_t \longrightarrow \frac{\Sigma_t}{\epsilon}, \quad \Sigma_a \longrightarrow \epsilon \Sigma_a, \quad Q \longrightarrow \epsilon Q. \quad (1.19)$$

Cette mise à l'échelle peut être comprise en disant que l'échelle spatiale de la diffusion est $\frac{1}{\epsilon}$ fois plus grande que celle du transport, que les absorptions sont rares et que le terme source est petit, ainsi l'équation (??) devient :

$$\begin{cases} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi + \frac{\Sigma_t}{\epsilon} u = \left(\frac{\Sigma_t}{\epsilon} - \epsilon \Sigma_a \right) \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \Phi d\vec{\Omega} + \epsilon Q, \\ \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = g, \quad \vec{r} \in \Gamma^-. \end{cases} \quad (1.20)$$

Il est connu [32] que le flux intégré $\tilde{\Phi} = \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \Phi d\vec{\Omega}$ où Φ est solution de (1.20) vérifie l'équation de diffusion :

$$\begin{cases} -\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{3\Sigma_t} \vec{\nabla} \tilde{\Phi} + \Sigma_a \tilde{\Phi} = Q + O(\epsilon^2) \\ \tilde{\Phi}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} \frac{\sqrt{3}}{2} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| H(|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}|) g(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} + O(\epsilon), \quad x \in \Gamma, \end{cases} \quad (1.21)$$

où $H(\mu)$ est la fonction de Chandrasekhar [18].

Nous allons donner les étapes de la démonstration formelle. Signalons cependant qu'il existe un résultat de convergence "exact" [19].

La solution Φ de (1.20) est la somme d'une solution Φ_{int} qui est la solution "loin" des frontières du domaine et d'une solution Φ_{lim} nulle en dehors d'un voisinage de la frontière Γ^- qui correspond à une couche limite, soit :

$$\Phi = \Phi_{int} + \Phi_{lim}.$$

On développe Φ_{int} en puissances de ϵ , $\Phi_{int} = \sum_{n=0}^{n=+\infty} \Phi_{int}^n \epsilon^n$ puis on identifie dans (1.20) les coefficients des différents termes en ϵ^n pour n variant de -1 à 2. On suppose que Σ_t , Σ_a et Q sont d'ordre 0 par rapport à ϵ .

— $\epsilon = -1$

$$\Phi_{int}^0 = \tilde{\Phi}_{int}^0. \quad (1.22)$$

— $\epsilon = 0$

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^0 + \Sigma_t \Phi_{int}^1 = \Sigma_t \tilde{\Phi}_{int}^1. \quad (1.23)$$

— $\epsilon = 1$

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^1 + \Sigma_t \Phi_{int}^2 = \Sigma_t \tilde{\Phi}_{int}^2 - \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int}^0 + Q. \quad (1.24)$$

— $\epsilon = 2$

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^2 + \Sigma_t \Phi_{int}^3 = \Sigma_t \tilde{\Phi}_{int}^3 - \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int}^1. \quad (1.25)$$

On remplace dans (1.23) Φ_{int}^0 par $\tilde{\Phi}_{int}^0$, on la multiplie par $\frac{1}{4\pi} \vec{\Omega}$ puis on intègre en $\vec{\Omega}$, on obtient :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \Phi_{int}^1 d\vec{\Omega} = -\frac{1}{3\Sigma_t} \vec{\nabla} \tilde{\Phi}_{int}^0. \quad (1.26)$$

On multiplie par $\frac{1}{4\pi}$ l'équation (1.24), puis on intègre en $\vec{\Omega}$ et on remplace $\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \Phi_{int}^1 d\vec{\Omega}$ par son expression tirée de (1.26), on obtient :

$$-\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{3\Sigma_t} \vec{\nabla} \tilde{\Phi}_{int}^0 + \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int}^0 = Q. \quad (1.27)$$

On multiplie par $\frac{1}{4\pi}$ l'équation (1.25), puis on intègre en $\vec{\Omega}$, on obtient :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^2 d\vec{\Omega} + \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int}^1 = 0. \quad (1.28)$$

Pour obtenir $\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^2 d\vec{\Omega}$, on applique l'opérateur $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{\Sigma_t}$ à (1.24), on intègre en $\vec{\Omega}$, ce qui donne :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^1 \right) + \frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^2 d\vec{\Omega} = 0, \quad (1.29)$$

on a donc en reportant dans (1.28) :

$$-\frac{1}{4\pi} \int_{S_2} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{int}^1 \right) + \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int}^1 = 0, \quad (1.30)$$

en remplaçant Φ_{int}^1 par son expression tirée de (1.23) c'est-à-dire :

$\Phi_{int}^1 = \tilde{\Phi}_{int}^1 - \frac{1}{\Sigma_t} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\Phi}_{int}^0$, on obtient finalement :

$$-\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{3\Sigma_t} \vec{\nabla} \tilde{\Phi}_{int}^1 + \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int}^1 = 0. \quad (1.31)$$

En multipliant (1.31) par ϵ et en ajoutant (1.27), on trouve que $\tilde{\Phi}_{int}$ vérifie :

$$-\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{3\Sigma_t} \vec{\nabla} \tilde{\Phi}_{int} + \Sigma_a \tilde{\Phi}_{int} = Q + O(\epsilon^2). \quad (1.32)$$

Nous allons maintenant trouver la condition aux limites vérifiée par Φ_{int} à l'ordre 0.

Nous avons vu que $\Phi = \Phi_{int} + \Phi_{lim}$, sachant que $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ sur Γ^- , Φ_{lim} vérifie donc :

$$\begin{cases} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{lim} + \Sigma_t \Phi_{lim} = \Sigma_s \tilde{\Phi}_{lim}, \\ \Phi_{lim}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = g(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \Phi_{int}(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \Gamma^-. \end{cases} \quad (1.33)$$

En suivant [41], on introduit un système de coordonnées orthogonales (x, y, z) avec l'axe z pointant en un point \vec{r}_s de la surface à l'intérieur du domaine. On note Θ , l'angle polaire que fait $\vec{\Omega}$ avec l'axe des z et ξ l'angle azimuthal, on a alors :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi_{lim} = \mu \frac{\partial \Phi_{lim}}{\partial z} + (\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla})_{\perp} \Phi_{lim} + C_b \Phi_{lim},$$

où $\mu = \cos(\Theta) \in [-1, 1]$ et $(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla})_{\perp} = \sqrt{1 - \mu^2} \{ \cos \xi \frac{\partial \Phi_{lim}}{\partial x} + \sin \xi \frac{\partial \Phi_{lim}}{\partial y} \}$, C_b est un opérateur complexe prenant en compte la courbure de la surface au point \vec{r}_s .

On suppose maintenant que dans la direction des z , Φ_{lim} varie sur une échelle de longueur correspondant à ϵ soit le libre-parcours, alors que ses variations sont faibles dans les directions perpendiculaires, l'équation (1.33) devient alors :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi_{lim}}{\partial z} + \epsilon(\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla})_{\perp} \Phi_{lim} + \epsilon C_b \Phi_{lim} + \Sigma_t \Phi_{lim} = (\Sigma_t - \epsilon^2 \Sigma_a) \tilde{\Phi}_{lim}, \\ \Phi_{lim}(x, \vec{\Omega}) = g(x, \vec{\Omega}) - \Phi_{int}(x, \vec{\Omega}), \quad (x, \vec{\Omega}) \in \Gamma^-. \end{cases} \quad (1.34)$$

On développe Φ_{lim} en puissances de ϵ , $\Phi_{lim} = \sum_{n=0}^{n=+\infty} \epsilon^n \Phi_{lim}^n$, en identifiant les termes d'ordre 0 dans (1.34), on obtient que Φ_{lim}^0 vérifie le problème monodimensionnel sur l'axe z (en prenant l'origine au point \vec{r}_s) :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi_{lim}^0}{\partial z} + \Sigma_t \Phi_{lim}^0 = \Sigma_t \tilde{\Phi}_{lim}^0, \\ \Phi_{lim}^0(0, \vec{\Omega}) = g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) - \Phi_{int}^0(\vec{r}_s), \quad \mu > 0. \end{cases} \quad (1.35)$$

Comme on veut que Φ_{lim} soit une couche limite, on demande également que $\Phi_{lim}^0(\infty, \mu, \xi) = 0$.

En faisant le changement de variable $z' = \int_0^z \Sigma_t(s) ds$ (on omettra le ' sur le z par la suite), on obtient :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi_{lim}^0}{\partial z} + \Phi_{lim}^0 = \tilde{\Phi}_{lim}^0, \\ \Phi_{lim}^0(0, \vec{\Omega}) = g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) - \Phi_{int}^0(\vec{r}_s), \quad \mu > 0. \end{cases} \quad (1.36)$$

Le problème précédent est un problème de demi-espace classique en théorie du transport qu'on appelle problème de Milne conservatif. Chandrasekhar l'a résolu en utilisant la technique dite du invariant imbedding. Nous allons donner les grandes lignes de la démonstration. Tout d'abord, on a besoin du résultat suivant démontré dans [8, 9, 23] :

Soit l'équation :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial v}{\partial z} + v = \tilde{v}, \\ v(0, \vec{\Omega}) = h(\vec{\Omega}), \quad \mu > 0. \end{cases} \quad (1.37)$$

Notons S_2^+ la demi sphère unité correspondant à $\mu > 0$.

Si h appartient à $L^\infty(S_2^+)$, alors il existe une solution unique de (1.37) dans l'espace des fonctions bornées $L^\infty([0, +\infty] \times S_2)$ telle que la limite notée $C(h)$ de $v(z, \vec{\Omega})$ lorsque z tend vers $+\infty$ soit indépendante de $\vec{\Omega}$.

Nous allons calculer cette limite $C(h)$ et démontrer qu'elle s'exprime en fonction de h à l'aide d'une fonction universelle H dite fonction de Chandrasekhar. Pour cela, on commence par intégrer (1.37) en angle, il vient :

$\frac{\partial \widetilde{\mu v}}{\partial z} = 0$, donc $\widetilde{\mu v} = Cte$. Cette constante est nulle puisque v ne dépend pas de $\vec{\Omega}$ lorsque z tend vers $+\infty$. De

même, en multipliant (1.37) par μ et en intégrant en angle, il vient $\frac{\partial \widetilde{\mu^2 v}}{\partial z} = 0$, car $\widetilde{\mu v} = 0$, donc $\widetilde{\mu^2 v} = Cte$. On peut calculer $\widetilde{\mu^2 v}$ en $z = 0$ et sa limite lorsque z tend vers l'infini. Ces deux limites sont égales, donc :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} \mu^2 h(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} + \frac{1}{4\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} \mu^2 v(0, -\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = \frac{1}{3} C(h).$$

Le problème est maintenant de trouver une expression de

$\int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} \mu^2 v(0, -\vec{\Omega}) d\vec{\Omega}$ en fonction de h .

On commence par multiplier (1.37) par $\frac{1}{2\pi}$ puis on l'intègre sur la variable azimuthale ξ , on obtient :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial v}{\partial z} + v = \tilde{v}, \\ v(0, \mu) = h(\mu), \quad \mu > 0. \end{cases} \quad (1.38)$$

Ici $v(z, \mu)$ est un abus de notation pour désigner $\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} v(z, \vec{\Omega}) d\xi$ ainsi que $h(\mu)$ pour $\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} h(\vec{\Omega}) d\xi$.

Chandrasekhar a démontré (voir l'annexe C) que $v(0, -\mu)$ est relié à h par la relation suivante :

$$v(0, -\mu) = \frac{1}{2} H(\mu) \int_0^1 \frac{H(\mu') \mu' h(\mu')}{\mu + \mu'} d\mu', \quad (1.39)$$

donc

$$C(h) = \frac{3}{2} \int_0^1 \mu^2 h(\mu) d\mu + \frac{3}{2} \int_0^1 \mu^2 \frac{1}{2} H(\mu) \left(\int_0^1 \frac{H(\mu') \mu' h(\mu')}{\mu + \mu'} d\mu' \right) d\mu,$$

ou encore

$$C(h) = \int_0^1 \frac{3}{2} \mu \left(\mu + \frac{H(\mu)}{2} \int_0^1 \frac{H(\mu') \mu'^2}{\mu + \mu'} d\mu' \right) h(\mu) d\mu.$$

En utilisant les égalités vérifiées par H :

$$\frac{1}{H(\mu)} = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{H(\mu') \mu'}{\mu + \mu'} d\mu',$$

qui s'obtient en faisant $h = 1$ dans (1.39), auquel cas on a $v(0, \mu) = 1$ et

$$\int_0^1 H(\mu') \mu' d\mu' = \frac{2}{\sqrt{3}},$$

on a donc

$$\mu + \frac{H(\mu)}{2} \int_0^1 \frac{H(\mu') \mu'^2}{\mu + \mu'} d\mu' = \frac{H(\mu)}{\sqrt{3}}$$

et on obtient finalement

$$C(h) = \frac{\sqrt{3}}{2} \int_0^1 \mu H(\mu) h(\mu) d\mu.$$

On peut remarquer que si on avait $v(0, -\mu) = 2 \int_0^1 \mu h(\mu) d\mu$, ce qui revient à supposer un renvoi en loi de Lambert, on aurait alors

$$C(h) = \int_0^1 \left(\frac{3}{2} \mu^2 + \mu \right) h(\mu) d\mu, \text{ ce qui revient à faire l'approximation :}$$

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \mu H(\mu) \simeq 0.956\mu + 1.546\mu^2 \pm 0.0035 \simeq \mu + \frac{3}{2}\mu^2, \quad (1.40)$$

vérifiée par les schémas numériques que nous étudions par la suite.

Revenons à la résolution de (1.35), comme nous cherchons une solution de (1.35) tendant vers 0 à l'infini, nous avons nécessairement

$$C(g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) - \Phi_{int}^0(\vec{r}_s)) = 0, \text{ ce qui conduit à :}$$

$$\tilde{\Phi}_{int}^0(\vec{r}_s) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} \frac{\sqrt{3}}{2} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| H(|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}|) g(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega},$$

donc la solution de l'équation de diffusion Φ_{int} vérifie la condition aux limites de (1.21) à $O(\epsilon)$ près.

La conditions aux limites vérifiée par Φ_{int} à $O(\epsilon^2)$ près s'écrit [41] :

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(\vec{r}_s) + \epsilon \frac{0.7104}{\Sigma_t} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\Phi}(\vec{r}_s) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} \frac{\sqrt{3}}{2} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| H(|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}|) g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \\ &+ 2\epsilon(I_\perp + I_\sigma + I_C) + O(\epsilon^2), \quad \vec{r}_s \in \Gamma. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Le terme I_\perp prend en compte la variation spatiale de la condition aux limites g le long de la surface, I_σ la variation de Σ_t à l'intérieur de la couche limite et I_C la courbure de la frontière. Tous ces termes s'annulent lorsque g ne dépend pas de $\vec{\Omega}$, auquel cas on obtient la condition de Marshak :

$$\tilde{\Phi}(\vec{r}_s) + \epsilon \frac{0.7104}{\Sigma_t} \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\Phi}(\vec{r}_s) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} 2|\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}, \quad \vec{r}_s \in \Gamma. \quad (1.42)$$

Chapitre 2

Méthodes de référence

2.1 Calcul analytique

2.1.1 Solution exacte dans un milieu purement absorbant

Cas instationnaire

On se place dans le cas monokinétique et dans un milieu purement absorbant $\Sigma_t = \Sigma_a$.
L'équation du transport s'écrit alors :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi + \Sigma_a \Phi = Q(\vec{r}, t)$$

de solution $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$.

Plaçons nous sur la droite passant par le point \vec{r} de direction $\vec{\Omega}$ et paramétrons la :

$$\vec{X}(s) = \vec{r} + \vec{\Omega}(s - vt), s = v\tau$$

$$\text{Posons } u(s) = \Phi(\vec{X}(s), \vec{\Omega}, \frac{s}{v})$$

On a

$$\frac{du}{ds} = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}} \cdot \frac{d\vec{X}(s)}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{d(\frac{s}{v})}{ds} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi + \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t}$$

Donc l'équation de transport devient une équation différentielle ordinaire qui s'écrit :

$$\frac{du}{ds} + \sigma(s)u(s) = q(s)$$

avec $\sigma(s) = \Sigma_a(\vec{X}(s))$ et $q(s) = Q(\vec{X}(s), \vec{\Omega}, \frac{s}{v})$.

En multipliant par $\exp(\int_{s_0}^s \sigma(\chi) d\chi)$, on trouve

$$\frac{d}{ds} (\exp(\int_{s_0}^s \sigma(\chi) d\chi) u(s)) = q(s) \exp(\int_{s_0}^s \sigma(\chi) d\chi)$$

et en intégrant entre s_0 et s

$$\exp(\int_{s_0}^s \sigma(\chi) d\chi) u(s) - u(s_0) = \int_{s_0}^s q(s') \exp(\int_{s_0}^{s'} \sigma(\chi) d\chi) ds'$$

donc

$$u(s) = u(s_0) \exp(-\int_{s_0}^s \sigma(\chi) d\chi) + \int_{s_0}^s q(s') \exp(-\int_{s'}^s \sigma(\chi) d\chi) ds'$$

La solution de l'équation précédente prise en $s = vt$ est :

$$u(s = vt) = u(s_0) \exp(-\int_{s_0}^{vt} \sigma(\chi) d\chi) + \int_{s_0}^{vt} q(s') \exp(-\int_{s'}^{vt} \sigma(\chi) d\chi) ds'$$

— $\vec{r} - vt\vec{\Omega} \in V$

On a alors $s_0 = 0$ et $u(s_0)$ est donné par la condition initiale $u(s_0) = \Phi(\vec{r} - vt\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, 0)$

On a alors (on omet le vecteur $\vec{\Omega}$ dans les variables de dépendance de Φ pour la clarté)

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = u(vt) &= \Phi(\vec{r} - vt\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, 0) \exp\left(-\int_0^t v\sigma(\vec{r} + \vec{\Omega}v(\tau - t))d\tau\right) \\ &+ \int_0^t vq(\vec{r} + \vec{\Omega}v(\tau' - t), \tau') \exp\left(-\int_{\tau'}^t v\sigma(\vec{r} + v(\tau - t))d\tau\right) d\tau' \end{aligned} \quad (2.1)$$

— $\vec{r} - vt\vec{\Omega} \notin V$

s_0 est alors déterminé par l'équation $\vec{r}_0 = \vec{r} + \vec{\Omega}(s - vt)$, \vec{r}_0 étant le point d'intersection de la droite passant par \vec{r} de direction $\vec{\Omega}$ avec δV^- . Dans ce cas $u(s_0)$ est donné par la condition aux limites $u(s_0) = \Phi(\vec{r}_0, \vec{\Omega}, t_0 = \frac{s_0}{v}) = \Phi(\vec{r}_0, \vec{\Omega}, t_0 = t + \frac{\vec{r}_0 - \vec{r}}{v} \cdot \vec{\Omega})$.

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = u(vt) &= \Phi(\vec{r}_0, \vec{\Omega}, t_0) \exp\left(-\int_{t_0}^t v\sigma(\vec{r} + \vec{\Omega}v(\tau - t))d\tau\right) \\ &+ \int_{t_0}^t vq(\vec{r} + \vec{\Omega}v(\tau' - t), \tau') \exp\left(-\int_{\tau'}^t v\sigma(\vec{r} + v(\tau - t))d\tau\right) d\tau' \end{aligned} \quad (2.2)$$

Cas stationnaire

On paramètre la droite passant par le point \vec{r} de direction $\vec{\Omega}$: $\vec{X}(s) = \vec{r} - \vec{\Omega}s$

On obtient alors par le même type de calcul que précédemment :

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \Phi(\vec{r}_0, \vec{\Omega}) \exp\left(-\int_0^{s_0} \sigma(\vec{r} - \vec{\Omega}\chi)d\chi\right) \\ &+ \int_0^{s_0} q(\vec{r} - \vec{\Omega}s') \exp\left(-\int_0^{s'} \sigma(\vec{r} - \vec{\Omega}\chi)d\chi\right) ds' \end{aligned} \quad (2.3)$$

où s_0 est alors déterminé par l'équation $\vec{r}_0 = \vec{r} - \vec{\Omega}s$, \vec{r}_0 étant le point d'intersection de la droite passant par \vec{r} de direction $\vec{\Omega}$ avec δV^- .

Dans le cas où le milieu est infini, il reste uniquement le second terme soit :

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty q(\vec{r} - \vec{\Omega}s') \exp(-\int_0^{s'} \sigma(\vec{r} - \vec{\Omega}\chi) d\chi) ds' \quad (2.4)$$

qu'on peut réécrire comme une intégrale en volume. En effet

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{S_2} d\vec{\Omega}_R \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_R) \int_0^\infty q(\vec{r} - \vec{\Omega}_R s') \exp(-\int_0^{s'} \sigma(\vec{r} - \vec{\Omega}_R \chi) d\chi) ds' \quad (2.5)$$

(Par définition $\int_{S_2} f(\vec{\Omega}_R) d\vec{\Omega}_R \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_R) = f(\vec{\Omega})$)

donc en posant $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{\Omega}_R s'$ et en intégrant sur \vec{r}' , $d^3\vec{r}' = s'^2 ds' d\vec{\Omega}_R$

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int \frac{d^3\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} q(\vec{r}') \exp(-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}'|} \sigma(\vec{r} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \chi) d\chi) \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \quad (2.6)$$

Exemple

Pour une source ponctuelle $q(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0)$, on trouve

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2} \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|}) \exp(-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}_0|} \sigma(\vec{r} - \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \chi) d\chi)$$

Donc

$$\rho(\vec{r}) = \int_{S_2} d\vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2} \exp(-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}_0|} \sigma(\vec{r} - \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \chi) d\chi)$$

et

$$\vec{J}(\vec{r}) = \int_{S_2} d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^3} \exp(-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}_0|} \sigma(\vec{r} - \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \chi) d\chi)$$

Pour une source plane $q(z) = \frac{\delta(z)}{4\pi}$ avec σ constant pour plus de simplicité, on a :

$$\rho(z) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty 2\pi \frac{R}{R^2 + z^2} dR \exp(-\sigma \sqrt{R^2 + z^2})$$

car on peut paramétrer l'élément de volume avec $d^3\vec{r}' = 2\pi R dR$

$$\rho(z) = \frac{1}{2} \int_{|z|}^\infty dl \frac{1}{l} \exp(-\sigma l)$$

car en notant $l = \sqrt{R^2 + z^2}$ on a $R^2 + z^2 = l^2$ donc $R dR = l dl$

$$\rho(z) = \frac{1}{2} \int_0^1 d\mu \frac{1}{\mu} \exp(-\frac{\sigma|z|}{\mu}) = \frac{1}{2} E_1(\sigma|z|) \quad (2.7)$$

$$\text{avec } E_n(x) = \int_0^1 dt t^{n-2} \exp(-\frac{x}{t})$$

car on a en prenant $\mu = \frac{z}{l}$, $\mu l = z = \text{constante}$ donc $\frac{dl}{l} = -\frac{d\mu}{\mu}$.

Ce résultat peut s'obtenir également en partant de l'équation de transport en plan infini

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, \mu) + \sigma \Phi(z, \mu) = \frac{1}{2} \delta(z) \text{ pour } z \in]-\infty, +\infty[$$

équivalente à chercher pour $z > 0$

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, \mu) + \sigma \Phi(z, \mu) = 0 \text{ avec } \Phi(0, \mu) = \frac{1}{2\mu} \text{ pour } \mu > 0$$

dont la solution est

$$\Phi(z, \mu) = \Phi(0, \mu) \exp(-\sigma \frac{z}{\mu}) = \frac{1}{2\mu} \exp(-\sigma \frac{z}{\mu}) \text{ pour } \mu > 0 \text{ et } 0 \text{ pour } \mu < 0$$

Donc

$$\begin{aligned} \rho(z) &= \frac{1}{2} \int_0^1 d\mu \frac{1}{\mu} \exp(-\sigma \frac{z}{\mu}) \\ &= \frac{1}{2} E_1(\sigma|z|) \end{aligned} \tag{2.8}$$

et pour $z < 0$

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, \mu) + \sigma \Phi(z, \mu) = 0$$

$$\text{avec } \Phi(0, \mu) = -\frac{1}{2\mu} \text{ pour } \mu < 0$$

dont la solution est

$$\Phi(z, \mu) = -\frac{1}{2\mu} \exp(-\sigma \frac{z}{\mu}) \text{ pour } \mu < 0 \text{ et } 0 \text{ pour } \mu > 0$$

Donc

$$\begin{aligned} \rho(z) &= -\frac{1}{2} \int_{-1}^0 \frac{1}{\mu} d\mu \exp(-\sigma \frac{z}{\mu}) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{1}{\mu} d\mu \exp(\sigma \frac{z}{\mu}) \\ &= \frac{1}{2} E_1(\sigma|z|) \end{aligned} \tag{2.9}$$

2.1.2 Solution stationnaire exacte dans un milieu homogène diffusif

On se place dans un milieu homogène en 1D plan.

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \Sigma \Phi = c \Sigma \tilde{\Phi}$$

en posant $x = \int_{z_{min}}^{z_{max}} \Sigma(z) dz$, le problème devient :

trouver $\Phi(x, \mu)$ solution de l'équation homogène

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \Phi = c \tilde{\Phi}.$$

L'idée de Case [17] est de chercher $\Phi(x, \mu)$ sous la forme $\Phi(x, \mu) = \chi(x) \Psi(\mu)$.

On a alors en injectant cette expression dans l'équation précédente :

$$\mu \frac{d\chi(x)}{dx} \Psi(\mu) + \chi(x) \Psi(\mu) = c \chi(x) \tilde{\Psi}(\mu).$$

et donc

$$\frac{\frac{d\chi(x)}{dx}}{\chi(x)} = \frac{-1}{\mu} + c \frac{\tilde{\Psi}(\mu)}{\mu \Psi(\mu)}.$$

Chacun de deux membres de l'égalité doit être constant. On pose donc

$$\frac{d\chi(x)}{\chi(x)} = \frac{-1}{\mu} + c \frac{\tilde{\Psi}(\mu)}{\mu\Psi(\mu)} = -\frac{1}{\nu}$$

où ν est une constante.

On a donc $\chi(x) = \exp(-\frac{x}{\nu})$.

Comme la solution de l'équation homogène est définie à une constante multiplicative près, on peut poser $\tilde{\Psi}(\mu) = \frac{1}{2}$ et $\frac{-1}{\mu} + \frac{c}{2\mu\Psi(\mu)} = -\frac{1}{\nu}$ ou encore $(1 - \frac{\mu}{\nu})\Psi(\mu) = \frac{c}{2}$.

On en déduit que $\Psi(\mu) = \frac{c}{2}(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1}$ et pour satisfaire la condition $\tilde{\Psi}(\mu) = \frac{1}{2}$ que ν doit vérifier $\frac{c\nu}{2}\log(\frac{\nu+1}{\nu-1}) = 1$.

On traite uniquement le cas $c < 1$.

— $\nu \notin (-1, +1]$

Cette équation possède deux racines réelles ν_0 et $-\nu_0$ avec $\nu_0 > 1$.

alors $\Psi_{\nu_0}(\mu) = \frac{c}{2}(1 - \frac{\mu}{\nu_0})^{-1}$ et $\Psi_{-\nu_0}(\mu) = \frac{c}{2}(1 + \frac{\mu}{\nu_0})^{-1}$.

— $\nu \in (-1, +1]$

Comme le dénominateur peut s'annuler, on prend l'égalité $(1 - \frac{\mu}{\nu})\Psi(\mu) = \frac{c}{2}$ au sens des distributions. Cette équation possède la solution $\Psi(\mu) = \frac{c}{2}PV(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1}$ où PV est la valeur principale de Cauchy à laquelle on ajoute la solution au sens des distributions de $(\nu - \mu)\Psi(\mu) = 0$ qui est $\Psi(\mu) = \lambda(\nu)\delta(\mu - \nu)$.

En effet $\int d\mu(\nu - \mu)\lambda(\nu)\delta(\mu - \nu)f(\mu) = 0$ pour toute fonction $f \in C^\infty$ à support compact.

Rappel : $\int d\mu PV(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1}f(\mu) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\int_{-\infty}^{\nu-\epsilon} d\mu(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1}f(\mu) + \int_{\nu+\epsilon}^{+\infty} d\mu(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1}f(\mu))$ pour toute fonction $f \in C^\infty$ à support compact.

On a donc $\Psi_\nu(\mu) = \frac{c}{2}PV(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1} + \lambda(\nu)\delta(\mu - \nu)$ où $\lambda(\nu)$ doit vérifier $\int_{-1}^{+1} d\mu\Psi_\nu(\mu) = 1$ soit $\lambda(\nu) + \frac{c}{2}PV \int_{-1}^{+1} d\mu(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1} = 1$.

Or $PV \int_{-1}^{+1} d\mu(1 - \frac{\mu}{\nu})^{-1} = \nu \log(\frac{\nu+1}{1-\nu})$ d'où $\lambda(\nu) = 1 - \frac{c\nu}{2}\log(\frac{\nu+1}{1-\nu})$. Donc toutes les valeurs de ν comprises entre -1 et 1 sont des valeurs propres puisqu'on peut toujours trouver $\lambda(\nu)$.

On peut démontrer que les fonctions propres $\Psi_\nu(\mu)$ sont orthogonales au sens suivant : $\int_{-1}^{+1} d\mu\Psi_\nu(\mu)\Psi_{\nu'}(\mu) = 0$ pour $\nu \neq \nu'$ et $\int_{-1}^{+1} d\mu\Psi_\nu(\mu)\Psi_\nu(\mu) \neq 0$. On peut également démontrer que toute fonction solution de l'équation du transport peut se développer sur cette base (théorème de complétude).

Cette technique a permis de résoudre analytiquement de nombreux problèmes d'école en géométrie 1D : par exemple, le flux en tout point dû à une source ponctuelle placée en un point (calcul des fonctions de Green) ou le flux sortant d'une plaque infinie pour un flux incident unidirectionnel $\delta(\mu - \mu_0)$, le calcul du flux en tout point dans une plaque infinie composée de deux milieux avec des c différents. Cela permet de valider les codes de calcul sur des problèmes où le scattering est non nul.

Signalons que dans les problèmes de demi-espace, le mode dominant correspond au mode discret car ν_0 est supérieur à 1 tandis que les valeurs propres continues sont comprises entre 0 et 1. Donc loin des sources et des couches limites, le comportement du flux suit la loi $\frac{c}{2}\exp(-\frac{x}{\nu_0})(1 - \frac{\mu}{\nu_0})^{-1}$.

2.2 Monte Carlo

Les méthodes déterministes, recherchant le flux angulaire, approchent l'équation du transport sous sa forme intégral-différentielle qui s'écrit en stationnaire mono-cinétique

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}) + \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (2.10)$$

En Monte-Carlo, cette équation est tout d'abord mise sous forme intégrale :

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int \frac{d^3 \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} q(\vec{r}', \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r})) \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \quad (2.11)$$

avec $\tau(\vec{r}', \vec{r}) = \int_0^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Sigma_t(\vec{r} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \chi) d\chi$

et $q(\vec{r}', \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}') + \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}', \vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}', \vec{\Omega}')$.

Donc en posant $\chi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \Sigma_t(\vec{r}) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$, on obtient

$$\begin{aligned} \chi(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \int \frac{d^3 \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} Q(\vec{r}', \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r})) \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \Sigma_t(\vec{r}) \\ &+ \int \frac{d^3 \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \int_{S_2} d\vec{\Omega}' \frac{\Sigma_s(\vec{r}', \vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega})}{\Sigma_t(\vec{r}')} \chi(\vec{r}', \vec{\Omega}') \exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r})) \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \Sigma_t(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

En notant $T(\vec{r}' \mapsto \vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \Sigma_t(\vec{r}) \exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r})) \delta_2(\vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|})$

et $C(\vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega}, \vec{r}) = \frac{\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega})}{\Sigma_t(\vec{r})}$

$$\chi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int d^3 \vec{r}' T(\vec{r}' \mapsto \vec{r}, \vec{\Omega}) Q(\vec{r}') + \int d^3 \vec{r}' \int_{S_2} d\vec{\Omega}' T(\vec{r}' \mapsto \vec{r}, \vec{\Omega}) C(\vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega}, \vec{r}) \chi(\vec{r}', \vec{\Omega}') \quad (2.13)$$

Les méthodes monte-Carlo pour l'équation de transport des neutrons peuvent être expliquées comme approchant une équation intégrale mise sous la forme précédente :

$$\chi(x) = S(x) + \int K(x, y) \chi(y) dy$$

dont la solution formelle est

$$\chi(x) = \sum_{n=1}^{n=\infty} \chi^n(x) \quad (2.14)$$

avec $\chi^1(x) = S(x)$ et $\chi^n(x) = \int K(x, y) \chi^{n-1}(y) dy$ pour $n \geq 2$.

On veut calculer l'intégrale $I = \int \chi(x) g(x) dx$ où g est une fonction arbitraire.

On a en utilisant (2.14)

$$I = \sum_{n=1}^{n=\infty} \int \dots \int dx_1 \dots dx_n S(x_1) K(x_2, x_1) K(x_3, x_2) \dots K(x_n, x_{n-1}) g(x_n)$$

Calculer une intégrale multiple est toujours possible par une méthode Monte-Carlo. Nous présentons ici une marche aléatoire qui va nous permettre de calculer I .

Nous nous donnons une densité de probabilité $p^1(x)$ qui permet de tirer la position initiale, une fonction $p(x, y)$ telle que $p(y) = \int p(x, y) dx \leq 1$, ainsi $\frac{p(\cdot, y)}{p(y)}$ est une densité de probabilité.

On propose la marche aléatoire suivante

- Initialisation , $n = 1$ On tire x_1 à partir de la loi $p^1(x)$, on arrête le processus avec la probabilité $1 - p(x_1)$ on continue avec la probabilité $p(x_1)$.
- Boucle infinie $n = n + 1$
On tire x_n à partir de la loi $\frac{p(dx, x_{n-1})}{p(x_{n-1})}$, on arrête le processus avec la probabilité $1 - p(x_n)$, on continue la boucle avec la probabilité $p(x_n)$.

Soit la marche aléatoire $\alpha = x_1, x_2, \dots, x_n$ obtenue précédemment. On suppose que l'ensemble des marches aléatoires est un espace que l'on sait munir d'une tribu et d'une loi de probabilité. Sur cet espace de probabilité considérons la

variable aléatoire $\zeta(\alpha) = \frac{S(x_1)}{p^1(x_1)} \omega(x_2, x_1) \dots \omega(x_n, x_{n-1}) \frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)}$

avec $\omega(x_n, x_{n-1}) = \frac{K(x_n, x_{n-1})}{p(x_n, x_{n-1})}$, alors, on démontre que cette variable aléatoire est un estimateur sans biais de I ce qui veut dire que l'espérance de ζ est égale à I .

$$E(\zeta) = \sum_{\alpha} P(\alpha) \zeta(\alpha) = I$$

En effet $P(\alpha) = p^1(x_1) p(x_1) \frac{p(x_2, x_1)}{p(x_1)} p(x_2) \dots \frac{p(x_{n-1}, x_{n-2})}{p(x_{n-2})} p(x_{n-1}) \frac{p(x_n, x_{n-1})}{p(x_{n-1})} (1 - p(x_n))$

le dernier terme provenant du fait que la chaîne s'est arrêtée en x_n . Donc

$P(\alpha) = p^1(x_1) p(x_2, x_1) \dots p(x_n, x_{n-1}) (1 - p(x_n))$ et

$$\begin{aligned} P(\alpha) \zeta(\alpha) &= p^1(x_1) p(x_2, x_1) \dots p(x_n, x_{n-1}) (1 - p(x_n)) \frac{S(x_1)}{p^1(x_1)} \frac{K(x_2, x_1)}{p(x_2, x_1)} \dots \frac{K(x_n, x_{n-1})}{p(x_n, x_{n-1})} \frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)} \\ &= S(x_1) K(x_2, x_1) K(x_3, x_2) \dots K(x_n, x_{n-1}) g(x_n) \end{aligned}$$

On en déduit formellement que $E(\zeta) = \sum_{\alpha} P(\alpha) \zeta(\alpha) = I$.

On peut interpréter l'estimateur $\zeta(\alpha)$ comme un poids attribué à la particule Monte-Carlo

- Initialisation , $n = 1$

On tire x_1 à partir de la loi $p^1(x)$, on attribue à la particule le poids $\frac{S(x_1)}{p^1(x_1)}$,

on arrête le processus avec la probabilité $1 - p(x_1)$ dans ce cas on multiplie le poids de la particule par $\frac{g(x_1)}{1 - p(x_1)}$ on continue avec la probabilité $p(x_1)$.

- Boucle infinie $n = n + 1$

On tire x_n à partir de la loi $\frac{p(dx, x_{n-1})}{p(x_{n-1})}$, on multiplie le poids de la particule par $\omega(x_n, x_{n-1})$, on arrête le processus avec la probabilité $1 - p(x_n)$, dans ce cas on multiplie le poids de la particule par $\frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)}$, on continue la boucle avec la probabilité $p(x_n)$.

Le poids final de la particule est égal à $\zeta(\alpha)$ estimateur sans biais de I .

Réduction de variance et biaisage.

Le biaisage par la fonction d'importance solution du problème adjoint :

$$\psi(x) = g(x) + \int K(y, x) \psi(y) dy \quad (2.15)$$

fournit un estimateur de variance nulle : ie pour toute marche aléatoire α alors $\zeta(\alpha) = I$.

Démonstration :

On a $\int \psi(x) S(x) dx = \int \chi(x) g(x) dx$,

On choisit $p^1(x) = \frac{S(x) \psi(x)}{\int S(x) \psi(x) dx}$ et $p(x, y) = K(x, y) \frac{\psi(x)}{\psi(y)}$, on a alors

$$\begin{aligned}
\zeta(\alpha) &= \frac{S(x_1)}{p^1(x_1)} \omega(x_2, x_1) \dots \omega(x_n, x_{n-1}) \frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)} \\
&= \frac{\frac{S(x_1)}{S(x_1)\psi(x_1)} \frac{\psi(x_1)}{\psi(x_2)} \frac{\psi(x_2)}{\psi(x_3)} \dots \frac{\psi(x_{n-1})}{\psi(x_n)} \frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)}}{\int S(x)\psi(x)dx} \\
&= \left(\int S(x)\psi(x)dx \right) \frac{1}{\psi(x_n)} \frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)}
\end{aligned}$$

On a $p(y) = \int p(x, y)dx = \frac{1}{\psi(y)} \int K(x, y)\psi(x)dx$
donc en utilisant (2.15)

$$\begin{aligned}
1 - p(x_n) &= 1 - \frac{1}{\psi(x_n)} \int K(x, x_n)\psi(x)dx \\
&= 1 - \frac{1}{\psi(x_n)} (\psi(x_n) - g(x_n)) \\
&= \frac{g(x_n)}{\psi(x_n)}
\end{aligned}$$

On en déduit que

$$\zeta(\alpha) = \int \psi(x)S(x)dx = \int \chi(x)g(x)dx$$

d'où le résultat.

Application à la neutronique.

On alors $x = (\vec{r}, \vec{\Omega})$, $y = (\vec{r}', \vec{\Omega}')$, $K(x, y) = T(\vec{r}' \mapsto \vec{r}, \vec{\Omega})C(\vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega}, \vec{r}')$, $I = \int \Sigma_t(\vec{r}')\Phi(\vec{r}', \vec{\Omega}')g(\vec{r}', \vec{\Omega}')d\vec{r}'d\vec{\Omega}'$ et $S(x) = \int d\vec{r}'T(\vec{r}' \mapsto \vec{r}, \vec{\Omega})Q(\vec{r}')$.

On choisit $p(x, y) = K(x, y)$ et $p^0(x) = \frac{Q(x)}{\int Q(y)dy}$, on a $p(y) = \frac{\int_{S_2} d\vec{\Omega}\Sigma_s(\vec{r}', \vec{\Omega}' \mapsto \vec{\Omega})}{\Sigma_t(\vec{r}')} = 1 - \frac{\Sigma_a(\vec{r}')}{\Sigma_t(\vec{r}')}.$

On obtient alors la marche aléatoire suivante

— Initialisation , $n = 1$

On tire $x_0 = (\vec{r}_0, \vec{\Omega}_1)$ à partir de la loi $p^0(x)$, on attribue à la particule le poids $\frac{Q(x_0)}{p^0(x_0)} = \int Q(y)dy$, on transporte la particule jusqu'à $x_1 = (\vec{\Omega}_1, \vec{r}_1)$ en échantillonnant la probabilité $T(\vec{r}_0 \mapsto d\vec{r}, \vec{\Omega}_1)$.

on arrête le processus avec la probabilité $1 - p(x_1) = \frac{\Sigma_a(\vec{r}_1)}{\Sigma_t(\vec{r}_1)}$, on multiplie alors le poids de la particule par

$$\frac{g(x_1)}{1 - p(x_1)}$$

on continue avec la probabilité $p(x_1)$.

— Boucle infinie $n = n + 1$

On tire $\vec{\Omega}_n$ à partir de la loi $\frac{\Sigma_s(\vec{r}_{n-1}, \vec{\Omega}_{n-1} \mapsto d\vec{\Omega})}{\int_{S_2} d\vec{\Omega}\Sigma_s(\vec{r}_{n-1}, \vec{\Omega}_{n-1} \mapsto \vec{\Omega})}$

On tire \vec{r}_n à partir de la loi $T(\vec{r}_{n-1} \mapsto d\vec{r}_n, \vec{\Omega}_n)$. On déplace la particule en \vec{r}_n . Soit $x_n = (\vec{r}_n, \vec{\Omega}_n)$,

on arrête la particule avec la probabilité $1 - p(x_n)$, on multiplie alors le poids de la particule par $\frac{g(x_n)}{1 - p(x_n)}$

On continue avec la probabilité $p(x_n)$.

Le poids final de la particule est un estimateur sans biais de I . Il faut noter que le poids de la particule ne change pas au cours de la marche aléatoire car $p(x, y) = K(x, y)$.

Tirage de la distance de collision

Pour tirer la distance de collision, on doit échantillonner l dont la loi de probabilité sur $[0, \infty[$ s'écrit $\Sigma_t \exp(-l\Sigma_t)$. Pour cela, on calcule la fonction de répartition de cette probabilité

$F(l) = \int_0^l \Sigma_t \exp(-t\Sigma_t)dt = 1 - \exp(-l)\Sigma_t$. On obtient alors l en écrivant $F(l) = h$ où h est un nombre uniformément réparti entre 0 et 1. On obtient $l = -\frac{1}{\Sigma_t} \log(1 - h)$.

Remarquons que $\int_0^\infty t\Sigma_t \exp(-t\Sigma_t)dt = \frac{1}{\Sigma_t}$. Le libre-parcours moyen $\frac{1}{\Sigma_t}$ représente bien la distance moyenne de collision.

2.2.1 Lien entre méthode de Monte Carlo et équation de Boltzmann

Nous proposons ici une explicitation des liens entre le processus aléatoire décrit ci-dessus et la résolution de notre problème modèle en neutronique : l'équation de Boltzmann monocinétique en géométrie 1D *slab* avec collisions isotropes (1.14), dans le cas d'un matériau homogène (Σ_t et Σ_s ne dépendent pas de x).

0 – Etape préliminaire

Vision EDP considérons dans un premier temps la résolution de l'EDP

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi_{x_0}}{\partial x} + \Sigma_t \psi_{x_0} &= \delta_{x_0} && \text{sur } [0, 1], \\ \psi_{x_0}(0, \mu) &= 0 && \forall \mu > 0, \\ \psi_{x_0}(1, \mu) &= 0 && \forall \mu < 0. \end{aligned}$$

En se restreignant, pour simplifier, au cas $\mu > 0$, la solution de cette EDP est donnée par

$$\psi_{x_0}(x, \mu) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_0, \\ \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t (x-x_0)}{\mu}} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Vision Monte Carlo Étant donnés $x_0 \in [0, 1]$ et $\mu_0 \in [0, 1]$, considérons la variable aléatoire $x_1 = x_0 + l$, où l est une variable aléatoire dont la densité est donnée par

$$f_l(l) = \frac{\Sigma_t}{\mu_0} e^{-\frac{\Sigma_t l}{\mu_0}}.$$

La densité de x_1 est donc donnée de manière évidente par

$$f_{x_1}(x_1|x_0, \mu_0) = \frac{\Sigma_t}{\mu_0} e^{-\frac{\Sigma_t (x_1-x_0)}{\mu_0}} = \Sigma_t \psi_{x_0}(x_1, \mu_0).$$

Autrement dit, pour tout intervalle $[a, b] \subset [0, 1]$, on a

$$\frac{\mathbb{P}(a < x_1 < b)}{\Sigma_t} = \int_a^b \psi_{x_0}(x, \mu_0) dx,$$

ce qui permet de construire, sur la base de la variable x_1 un estimateur de la valeur moyenne de ψ_{x_0} .

1 – Flux non collisionné

Vision EDP Selon le raisonnement du paragraphe 1.5.1, on cherche maintenant le flux non collisionné, vérifiant

$$\mu \frac{\partial \Phi^0}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \Phi^0(x, \mu) = S(x)$$

avec les mêmes conditions aux limites que ci-dessus. En écrivant $S = \int_0^1 S(x) \delta_x dx$, et par linéarité de l'équation, il vient :

$$\Phi^0(x, \mu) = \int_0^1 S(x_0) \psi_{x_0}(x, \mu) dx_0.$$

Vision Monte Carlo Le paramètre $\mu_0 \in [-1, 1]$ étant fixé, on considère comme précédemment la variable aléatoire $x_1 = x_0 + l$, où x_0 est maintenant aussi une variable aléatoire, suivant une densité donnée par

$$f_{x_0}(x_0) = \frac{S(x_0)}{\int_0^1 S(x) dx}.$$

La densité de la variable aléatoire x_1 est donc maintenant donnée par

$$\begin{aligned} f_{x_1}(x_1|\mu_0) &= \int_0^1 f_{x_0}(x_0) f_{x_1}(x_1|x_0, \mu_0) dx_0 \\ &= \frac{\Sigma_t}{\int_0^1 S(x) dx} \int_0^1 S(x_0) \psi_{x_0}(x_1, \mu_0) dx_0 \\ &= \frac{\Sigma_t}{\int_0^1 S(x) dx} \Phi^0(x_1, \mu_0). \end{aligned}$$

De la même manière, si μ_0 est maintenant une variable aléatoire de loi uniforme sur $[-1, 1]$ (*i.e.* de densité $f_{\mu_0} = \frac{1}{2}$), on montre facilement que la densité de x_1 est donnée par

$$f_{x_1}(x_1) = \frac{\Sigma_t}{2 \int_0^1 S(x) dx} \int_{-1}^1 \Phi^0(x_1, \mu_0) d\mu_0 = \frac{\Sigma_t \tilde{\Phi}^0(x_1)}{\int_0^1 S(x) dx},$$

où l'on a noté $\tilde{\Phi}^0(x_1) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Phi^0(x_1, \mu) d\mu$ le flux scalaire associé à Φ^0 .

Encore une fois, ceci permet de lier la valeur moyenne de Φ^0 (ou $\tilde{\Phi}^0$) sur un intervalle à la probabilité que x_1 se trouve dans cet intervalle.

2 – Flux de première collision

Vision EDP Poursuivant les étapes du paragraphe 1.5.1, on s'intéresse maintenant au flux de première collision, vérifiant

$$\mu \frac{\partial \Phi^1}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \Phi^1(x, \mu) = \Sigma_s \tilde{\Phi}^0(x) + S(x).$$

En notant $\varepsilon^1 = \Phi^1 - \Phi^0$, on a

$$\mu \frac{\partial \varepsilon^1}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \varepsilon^1(x, \mu) = \Sigma_s \tilde{\Phi}^0(x).$$

et donc, comme précédemment :

$$\varepsilon^1(x, \mu) = \Sigma_s \int_0^1 \tilde{\Phi}^0(x_1) \psi_{x_1}(x_1, \mu) dx_1.$$

Vision Monte Carlo On poursuit le processus uniquement avec une probabilité de $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$. Dans le cas où le processus se poursuit, on construit la variable aléatoire $x_2 = x_1 + l_1$, où la densité de l_1 est donnée par

$$f_{l_1}(l_1) = \frac{\Sigma_t}{\mu_1} e^{-\frac{\Sigma_t l_1}{\mu_1}},$$

avec $\mu_1 \in [-1, 1]$ fixé dans un premier temps. La loi de x_2 est donc donnée par

$$\begin{aligned} f_{x_2}(x_2|\mu_1) &= \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \int_0^1 f_{x_1}(x_1) f(x_2|x_1, \mu_1) dx_1 \\ &= \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \int_0^1 \frac{\Sigma_t \tilde{\Phi}^0(x_1)}{\int_0^1 S(x) dx} \Sigma_t \psi_{x_1}(x_2, \mu_1) dx_1 \\ &= \frac{\Sigma_t}{\int_0^1 S(x) dx} \varepsilon^1(x_2, \mu_1). \end{aligned}$$

De la même manière, si μ_1 est maintenant une variable aléatoire de loi uniforme sur $[-1, 1]$, on obtient

$$f_{x_2}(x_2) = \frac{\Sigma_t}{2 \int_0^1 S(x) dx} \int_{-1}^1 \varepsilon^1(x_2, \mu_1) d\mu_1 = \frac{\Sigma_t \tilde{\varepsilon}^1(x_2)}{2 \int_0^1 S(x) dx}.$$

Donc la probabilité que x_2 se trouve dans un intervalle donné est liée à la contribution supplémentaire du flux de première collision par rapport aux flux non collisionné.

En poursuivant ainsi, on parvient à lier la solution de l'équation de Boltzmann complète (1.14) (vue comme la limite des flux collisionnés n fois), avec la somme des contributions Monte Carlo des indicateurs liés à la position de la n -ème collision.

2.2.2 Précision d'une méthode Monte-Carlo par rapport à une méthode déterministe

Une méthode Monte-Carlo ne nécessite pas de maillage de l'espace des phases. Les variables angulaires et spatiales sont traitées de façon continue, même si la présence de plusieurs matériaux peut nécessiter différentes régions spatiales. A cause du théorème central limite, sa précision est en $\frac{1}{\sqrt{N}}$ où N est le nombre de tirages.

Pour obtenir une estimation de l'espérance de ζ , on réalise N marches aléatoires indépendantes α_i dont on fait la moyenne $\bar{\zeta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} \zeta(\alpha_i)$.

D'après le théorème central limite, on a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (|\bar{\zeta} - I| < \epsilon) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\frac{\epsilon\sqrt{N}}{\sigma}} \frac{1}{\sigma} \exp(-\frac{t^2}{2}) dt$$

où σ est l'écart type (racine carrée de la variance) de la variable aléatoire ζ .

Ce théorème donne une estimation de l'erreur commise en faisant N essais si on connaît σ . Mais on peut obtenir un estimateur sans biais de σ sans surcoute en faisant :

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{N}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} \zeta^2(\alpha_i) - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} \zeta(\alpha_i) \right)^2 \right)$$

Il est facile de voir que $\sigma^2(\bar{\zeta}) = \frac{1}{N} V$ où V est la variance de ζ , donc l'erreur de l'estimateur Monte-Carlo $\frac{\sigma(\bar{\zeta})}{E(\bar{\zeta})}$ est proportionnelle à $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Par contre, les méthodes déterministes nécessitent un maillage. Leur précision dépend de la finesse du maillage.

Le maillage est le produit tensoriel du maillage en espace \mathcal{T}_h par le maillage de la sphère angulaire unité \mathcal{S}_h^2 . Sur chaque maille de $\mathcal{T}_h \times \mathcal{S}_h^2$, l'approximation de $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ appartient à un espace de fonctions de dimension finie préalablement défini.

La norme de l'erreur entre la solution exacte et approchée est en $o(h^k)$ où k dépend du degré des polynômes d'approximation et de la régularité de la solution.

Par exemple en cylindre fini

$\vec{r} = (r, z)$, $\vec{\Omega}$ est repéré par deux scalaires $\mu \in [-1, +1]$ et $\phi \in [0, \pi]$.

Une maille est donc le produit $T \times [\mu_1, \mu_2] \times [\phi_1, \phi_2]$ où T est un triangle.

On choisit par exemple Φ constant sur $[\mu_1, \mu_2]$, linéaire continu sur $[\phi_1, \phi_2]$ et linéaire discontinu sur T .

Il faut noter que la discrétisation angulaire peut faire perdre des propriétés d'invariance par rotation ou translation de l'équation continue. Cette perte d'invariance par rotation conduit au phénomène d'effet de raies : dans un milieu purement absorbant avec une source ponctuelle au centre, le flux solution de l'équation de transport discrétisée en angle est renforcé anormalement sur les rayons qui correspondent aux directions discrètes émanant de la source. On peut diminuer cet effet en augmentant le nombre de directions mais cela peut devenir prohibitif.

A contrario, les méthodes Monte-Carlo ne présentent pas ce problème mais les résultats sont soumis à un bruit statistique qui peut être rédhibitoire dans certaines applications.

Les méthodes Monte-Carlo sont plus versatiles que les méthodes déterministes. Le codage peut être rendu indépendant de la géométrie (1D, 2D, 3D, cartésien, curviligne) en faisant une trajectographie en 3D cartésien, alors que les méthodes déterministes nécessitent un codage spécifique à chaque géométrie.

Elles peuvent facilement traiter une physique fine pour la collision :

- Choix du noyau cible
- Prise en compte de la vitesse d'ensemble ou thermique des noyaux
- Anisotropie de la section de renvoi
- principe
- erreur statistique

Chapitre 3

Méthodes déterministes

3.1 Discrétisation angulaire

3.1.1 Méthode P_N

En 1D, on part de l'équation du transport :

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, \mu) + \Sigma_t \Phi(z, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l} P_l(\mu) \Phi_l(z)$$

avec $\Phi_l(z) = 2\pi \int_{-1}^{+1} P_l(\mu) \Phi(z, \mu) d\mu$.

Sachant qu'on a $\Phi(z, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \Phi_l(z)$, on injecte ce développement dans la première équation :

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} (\mu P_l(\mu) \frac{d}{dz} \Phi_l(z) + \Sigma_t P_l(\mu) \Phi_l(z)) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l} P_l(\mu) \Phi_l(z)$$

On utilise alors l'égalité $\mu P_l(\mu) = \frac{1}{2l+1} ((l+1)P_{l+1}(\mu) + lP_{l-1}(\mu))$ qu'on injecte dans l'équation précédente :

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} ((\frac{1}{2l+1} ((l+1)P_{l+1}(\mu) + lP_{l-1}(\mu))) \frac{d}{dz} \Phi_l(z) + \Sigma_t P_l(\mu) \Phi_l(z)) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l} P_l(\mu) \Phi_l(z)$$

on multiplie par $2\pi P_k(\mu)$ et on intègre l'équation entre -1 et 1 pour k compris entre 0 et N en utilisant l'égalité :

$$\int_{-1}^{+1} P_l(\mu) P_k(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,k}$$

On obtient

$$\frac{1}{2k+1} (k \frac{d}{dz} \Phi_{k-1}(z) + (k+1) \frac{d}{dz} \Phi_{k+1}(z)) + (\Sigma_t - \Sigma_{s,k}) \Phi_k(z) = 0$$

pour $k = 0, 1, \dots, N$

On ferme le système en supposant que $\frac{d}{dz} \Phi_{N+1}(z) = 0$, ainsi l'équation pour $k = N$ devient :

$$\frac{N}{2N+1} \frac{d}{dz} \Phi_{N-1}(z) + (\Sigma_t - \Sigma_{s,N}) \Phi_N(z) = 0$$

Exemple : pour N=1 on obtient le système :

$$\begin{cases} \frac{d}{dz} \Phi_1(z) + (\Sigma_t - \Sigma_{s,0}) \Phi_0(z) = 0 \\ \frac{1}{3} \frac{d}{dz} \Phi_0(z) + (\Sigma_t - \Sigma_{s,1}) \Phi_1(z) = 0 \end{cases}$$

On remarque que l'on peut éliminer $\Phi_1(z)$ pour obtenir l'équation de diffusion :

$$-\frac{1}{3} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{(\Sigma_t - \Sigma_{s,1})} \frac{d}{dz} \Phi_0(z) \right) + \Sigma_a \Phi_0(z) = 0$$

car $\Sigma_a = \Sigma_t - \Sigma_{s,0}$.

3.1.2 Méthode des ordonnées discrètes (S_N)

La méthode des ordonnées discrètes est une méthode collocative, dans laquelle on résout l'équation vérifiée par le flux angulaire uniquement dans un nombre fini de directions. Les intégrales en angle sont approchées par une formule de quadrature de type Gauss.

Pour un ensemble de directions $\{\vec{\Omega}_d, d \in \llbracket 1, N_d \rrbracket\}$, de poids associés $\{w_d, d \in \llbracket 1, N_d \rrbracket\}$ dans la formule de quadrature, l'équation du transport multigroupe (1.12) se ramène au système d'équations :

$$\left(\vec{\Omega}_d \cdot \vec{\nabla} + \Sigma_t^g(r)\right) \Phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_d) = Q_s^{g,d}(\vec{r}) + Q^{g,d}(\vec{r}), \quad (3.1)$$

couplées par les termes de source. $Q^{g,d}$ représente les sources de neutrons provenant de la fission ou de sources externes. $Q_s^{g,d}$ est la source de diffusion provenant du flux angulaire dans les autres groupes d'énergie et dans les autres directions :

$$Q_s^{g,d}(\vec{r}) = \sum_{g'} \sum_{l=0}^{\infty} \Sigma_{sl}^g(\vec{r}) \sum_{m=-l}^l A_{lm}(\vec{\Omega}_d) \tilde{\Phi}_{lm}^g(\vec{r})$$

Elle est calculée en utilisant les moments du flux angulaire intégrés à l'aide de la formule de quadrature angulaire :

$$\tilde{\Phi}_{lm}^g(\vec{r}) = \sum_{d=1}^{N_d} w_d A_{lm}(\vec{\Omega}_d) \Phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}_d)$$

3.1.3 Equivalence en 1D de la méthode des ordonnées discrètes S_N et de la méthode P_{N-1}

On considère les équations S_N en 1D plan :

$$\mu_j \frac{d\Phi(z, \mu_j)}{dz} + \Sigma_t \Phi(z, \mu_j) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l} \Phi_l(z) P_l(\mu_j)$$

avec $\Phi_l(z) = 2\pi \sum_{j=1}^N \omega_j P_l(\mu_j) \Phi(z, \mu_j)$ pour $l \in 0, 1, \dots, N-1$

et $\Sigma_{s,l} = 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu_0 \Sigma_s(z, \mu_0) P_l(\mu_0)$.

Les μ_j sont les zéros du polynome P_N et les poids ω_j sont ceux de la formule de quadrature de Legendre de rang N .

On multiplie les équations S_N par $2\pi\omega_j P_k(\mu_j)$ avec $k \in 0, 1, \dots, N-1$ et on somme sur les j pour $j \in 1, 2, \dots, N$.

On obtient

$$2\pi \sum_{j=1}^N \omega_j \mu_j P_k(\mu_j) \frac{d\Phi(z, \mu_j)}{dz} + \Sigma_t \Phi_k(z) = 2\pi \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l} \Phi_l(z) \sum_{j=1}^N \omega_j P_k(\mu_j) P_l(\mu_j)$$

On suppose que L est inférieur ou égal à N .

On a alors $\sum_{j=1}^N \omega_j P_l(\mu_j) P_k(\mu_j) = \frac{2}{2l+1} \delta_{lk}$ car le polynome $P_l(\mu) P_k(\mu)$ est de degré inférieur ou égal à $2N-1$.

En utilisant la relation de récurrence sur les polynomes de Legendre, on obtient les relations

$$\frac{1}{2k+1} \left(k \frac{d}{dz} \Phi_{k-1}(z) + (k+1) \frac{d}{dz} \Phi_{k+1}(z) \right) + (\Sigma_t - \Sigma_{s,k}) \Phi_k(z) = 0$$

On a également $P_N(\mu_j) = 0$ pour $j \in 1, 2, \dots, N$.

On a donc $\Phi_N(z) = 0$ et on vérifie que les $\Phi_k(z)$ pour $k \in 0, 1, \dots, N-1$ vérifient le système d'équations P_{N-1} .

Pour démontrer la réciproque, on pose $\Phi(z, \mu_j) = \sum_{l=0}^{N-1} \frac{2l+1}{4\pi} \Phi_l(z) P_l(\mu_j)$ et on peut vérifier que les $\Phi(z, \mu_j)$ satisfont

les équations S_N .

Pour $N=2$ on a ainsi équivalence entre le système d'équations P_1 et S_2 :

$$\mu_j \frac{d\Phi(z, \mu_j)}{dz} + \Sigma_t \Phi(z, \mu_j) = \sum_{l=0}^1 \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l} \Phi_l(z) P_l(\mu_j)$$

avec $\mu_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $\mu_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ et $\omega_1 = \omega_2 = 1$.

3.2 Discrétisation spatiale – schéma diamant

Pour simplifier les notations, on se restreint ici au problème à source 1D sur un intervalle :

$$\begin{aligned} \forall \mu \in \mathcal{S}^2, \forall x \in [a, b], \\ \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, \mu) + \Sigma_t \phi(x, \mu) = Q(x) \end{aligned} \quad (3.2)$$

On se donne un ensemble de points $\{x_i\}_{i \in \llbracket 1, N+1 \rrbracket}$ tels que

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_i < \dots < x_{N+1} = b,$$

permettant de découper l'intervalle $[a, b]$ en N mailles :

$$\begin{aligned} [a, b] &= \cup_{i=1}^N \mathcal{M}_i, \\ \text{avec } \mathcal{M}_i &= [x_i, x_{i+1}], \quad \forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket. \end{aligned}$$

On suppose de plus que les sections efficaces sont constantes par maille :

$$\begin{aligned} \forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, \forall x \in \mathcal{M}_i, \\ \Sigma_t(x) = \Sigma_{t,i} \in \mathbb{R}^+. \end{aligned}$$

En intégrant l'équation (3.2) sur chaque maille, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, \mu) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \Sigma_t \phi(x, \mu) dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} Q(x) dx \\ \Leftrightarrow \mu [\phi(x_{i+1}) - \phi(x_i)] + \Delta_i \Sigma_{t,i} \underbrace{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{\Delta_i} \phi(x, \mu) d\mu}_{\tilde{\phi}_i} &= \Delta_i \underbrace{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{\Delta_i} Q(x) dx}_{\tilde{Q}_i}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dans le cas où $\mu > 0$, on peut supposer $\phi(x_1) = \phi(a)$ connu grâce aux conditions aux limites portant sur le flux entrant. \tilde{Q}_1 est aussi une donnée d'entrée du problème. L'équation ci-dessus, prise pour $i = 1$, a donc deux inconnues : $\phi(x_2)$ et $\tilde{\phi}_1$.

Pour définir le schéma diamant, on introduit la relation de fermeture suivante, permettant d'éliminer l'inconnue de flux moyen $\tilde{\phi}_i$:

$$\tilde{\phi}_i = \frac{1}{2} [\phi(x_i) + \phi(x_{i+1})]. \quad (3.4)$$

Il est ainsi possible de déterminer le flux $\phi(x_2)$ sortant de la maille \mathcal{M}_1 , comme solution du système d'équations (3.3)–(3.4) pris pour $i = 1$. Le flux $\phi(x_2)$ peut à son tour être injecté dans le même système pris pour $i = 2$. Plus généralement, en supposant $\phi(x_i)$ connu, on a :

$$\begin{aligned} \mu [\phi(x_{i+1}) - \phi(x_i)] + \Delta_i \Sigma_{t,i} \tilde{\phi}_i &= \Delta_i \tilde{Q}_i \\ \Leftrightarrow \mu [\phi(x_{i+1}) - \phi(x_i)] + \frac{\Delta_i \Sigma_{t,i}}{2} [\phi(x_i) + \phi(x_{i+1})] &= \Delta_i \tilde{Q}_i \\ \Leftrightarrow \phi(x_{i+1}) &= \frac{2 \Delta_i \tilde{Q}_i + (2\mu - \Delta_i \Sigma_{t,i}) \phi(x_i)}{2\mu + \Delta_i \Sigma_{t,i}}. \end{aligned}$$

Le même raisonnement peut être tenu dans le cas $\mu < 0$, en supposant $\phi(x_{N+1}) = \phi(b)$ connu grâce aux conditions aux limites, puis en calculant de proche en proche $\phi(x_i)$ à partir de $\phi(x_{i+1})$. Finalement, les deux cas $\mu > 0$ et $\mu < 0$ peuvent être regroupés dans la même équation :

$$\phi_i^+ = \frac{2 \Delta_i \tilde{Q}_i + (2|\mu| - \Delta_i \Sigma_{t,i}) \phi_i^-}{2|\mu| + \Delta_i \Sigma_{t,i}}, \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \text{avec } \phi_i^- &= \begin{cases} \phi(x_i) & \text{si } \mu > 0, \\ \phi(x_{i+1}) & \text{sinon,} \end{cases} \\ \phi_i^+ &= \begin{cases} \phi(x_{i+1}) & \text{si } \mu > 0, \\ \phi(x_i) & \text{sinon.} \end{cases} \end{aligned}$$

3.2.1 Conditions de positivité du flux

Lorsque le terme source Q et les sections efficaces Σ_t sont positives dans l'équation continue (3.2), le flux solution est nécessairement positif.

Une condition nécessaire de stabilité du schéma diamant est qu'il vérifie cette même propriété de positivité du flux. Étant donné le mécanisme d'obtention de ϕ_i^+ à partir de ϕ_i^- , cette condition de positivité peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket \text{ tel que } \tilde{Q}_i \geq 0, \Sigma_{t,i} \geq 0 \text{ et } \phi_i^- \geq 0, \\ \phi_i^+ \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad 2 \Delta_i \tilde{Q}_i + (2|\mu| - \Delta_i \Sigma_{t,i}) \phi_i^- \geq 0 \\ \Leftrightarrow \quad 2|\mu| - \Delta_i \Sigma_{t,i} \geq 0 \\ \Leftrightarrow \quad \frac{\Delta_i \Sigma_{t,i}}{|\mu|} \leq 2 \end{aligned} \quad (3.6)$$

On notera que cette condition de positivité mêle des grandeurs très différentes, liées

- au problème physique ($\Sigma_{t,i}$),
- à la discrétisation spatiale (Δ_i),
- à la discrétisation angulaire (μ).

Il est toujours possible d'ajuster la discrétisation spatiale en fonction des données du problème en choisissant de raffiner le maillage aux endroits où les sections efficaces sont les plus grandes de manière à contrôler le produit $\Delta_i \Sigma_{t,i}$. En revanche, la discrétisation angulaire est partagée par toutes les mailles spatiales. En pratique, lors de la résolution d'un problème complet à l'aide d'une discrétisation angulaire S_N , c'est la plus petite valeur de μ intervenant dans la formule de quadrature qui impose la condition de positivité.

3.3 Accélération des itérations de scattering

3.3.1 Analyse spectrale

On reprend l'analyse spectrale telle que présentée par P. Lascaux
La méthode de la source itérée consiste pour résoudre l'équation

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \Sigma \Phi = \Sigma c \tilde{\Phi}, \quad (3.7)$$

$$\tilde{\Phi} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \Phi(\mu) d\mu,$$

$z \in [0; L]$ et des conditions aux limites de réflexion soit :

$$\Phi(0, \mu) = \Phi(0, -\mu), \quad \Phi(L, \mu) = \Phi(L, -\mu) \quad \mu \in [-1, +1]$$

à résoudre le système itératif

$$\mu \frac{\partial \Phi^n}{\partial z} + \Sigma \Phi^n = \Sigma c \tilde{\Phi}^{n-1}, \quad (3.8)$$

ce qui permet de rendre indépendante la résolution par direction discrète.

Prenons $\tilde{\Phi}^{n-1}(z, \mu)$ sous la forme $\cos(mz)$ avec $m = k \frac{\pi}{L}$

$$\Phi^n(z, \mu) = A(\mu) \cos(mz) + B(\mu) \sin(mz) + C(\mu) \exp\left(-\frac{\Sigma z}{\mu}\right)$$

est solution de (3.8) avec A et B vérifiant

$$\Sigma A + \mu m B = \Sigma c \text{ et } \Sigma B - \mu m A = 0 \text{ donc } A(\mu) = c \left(1 + \frac{\mu^2 m^2}{\Sigma^2}\right)^{-1} \text{ et } B(\mu) = \frac{\mu m c}{\Sigma} \left(1 + \frac{\mu^2 m^2}{\Sigma^2}\right)^{-1}.$$

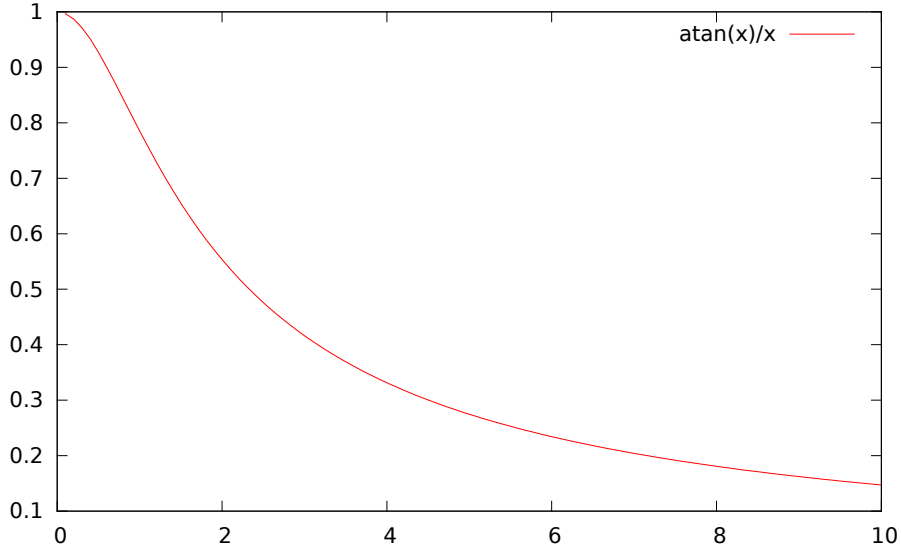
Les conditions aux limites de réflexion en 0 et L sont : en $z = 0$, $A(\mu) + C(\mu) = A(-\mu) + C(-\mu)$ et en $z = L$, $(-1)^k A(\mu) + C(\mu) \exp\left(-\frac{\Sigma L}{\mu}\right) = (-1)^k A(-\mu) + C(-\mu) \exp\left(\frac{\Sigma L}{\mu}\right)$ d'où l'on déduit

$C(\mu) = 0$ donc puisque B est impaire

$$\tilde{\Phi}^n(z) = \cos(mz) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 A(\mu) d\mu = \cos(mz) \frac{c \Sigma}{m} \text{Arctg}\left(\frac{m}{\Sigma}\right)$$

On a donc $\tilde{\Phi}^n(z) = \rho \tilde{\Phi}^{n-1}(z)$ avec $\rho = \frac{c \Sigma}{m} \text{Arctg}\left(\frac{m}{\Sigma}\right)$

or on a $\sup_k \rho = c$ car la fonction $f(\omega) = \frac{\text{Arctg}(\omega)}{\omega}$ est une fonction décroissante de 1 vers 0 lorsque $\omega = \frac{m}{\Sigma}$ varie de 0 à $+\infty$. Donc pour $c = 1$, la convergence du processus peut être arbitrairement lente.



On a

$$\Phi^n(z, \mu) = \frac{c}{1 + \omega^2 \mu^2} (1 + \mu \omega t g(mz)) \tilde{\Phi}^{n-1}(z)$$

Lorsque ω tend vers 0 on a donc $\Phi^n(z, \mu) \simeq (1 + \mu \omega t g(mz)) \tilde{\Phi}^{n-1}(z)$. Le mode le plus lent est donc linéaire en μ . On va introduire la résolution d'une équation de diffusion dont est solution le mode le plus lent pour accélérer la convergence.

3.3.2 Accélération par Diffusion Synthétique(DSA)

On commence par une itération du processus précédent :

$$\mu \frac{\partial \Phi^{n-1/2}}{\partial z} + \Sigma \Phi^{n-1/2} = \Sigma c \tilde{\Phi}^{n-1}, \quad (3.9)$$

puis en posant $\epsilon = \Phi^n - \Phi^{n-1/2}$

$$\mu \frac{\partial \epsilon}{\partial z} + \Sigma \epsilon = \Sigma c \tilde{\epsilon} + \Sigma c (\tilde{\Phi}^{n-1/2} - \tilde{\Phi}^{n-1}), \quad (3.10)$$

par l'équation de diffusion

$$-\frac{1}{3\Sigma} \frac{d^2 \epsilon}{dz^2} + \Sigma(1 - c)\epsilon = \Sigma c (\tilde{\Phi}^{n-1/2} - \tilde{\Phi}^{n-1}), \quad (3.11)$$

avec pour conditions aux limites $\frac{d\epsilon}{dx}(0) = \frac{d\epsilon}{dx}(L) = 0$.

on obtient alors $\tilde{\Phi}^n = \tilde{\Phi}^{n-1/2} + \epsilon$ ce qui complète le processus itératif.

En posant $\tilde{\Phi}^{n-1}(z) = \cos(mz)$, on a $\tilde{\Phi}^{n-1/2} = (\frac{c\Sigma}{m} \text{Arctg}(\frac{m}{\Sigma})) \tilde{\Phi}^{n-1}$

On a $\epsilon = \lambda \cos(mz)$ avec $\lambda(\frac{m^2}{3\Sigma} + \Sigma(1 - c)) = \Sigma c (\frac{c\Sigma}{m} \text{Arctg}(\frac{m}{\Sigma}) - 1)$

Donc $\lambda(\frac{\omega^2}{3} + (1 - c)) = c(\frac{c}{\omega} \text{Arctg}(\omega) - 1)$

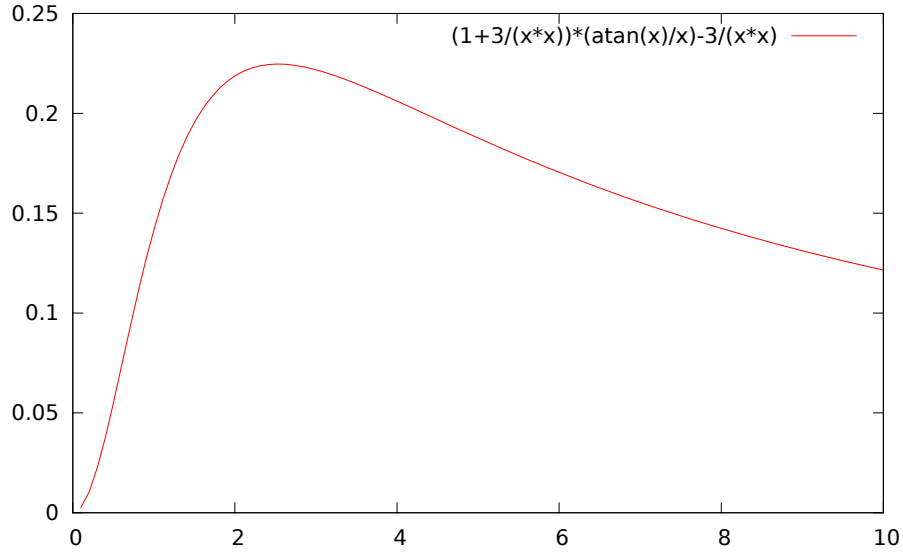
donc $\tilde{\Phi}^n = \rho \tilde{\Phi}^{n-1}$ avec $\rho = \frac{c}{\omega} \text{Arctg}(\omega) + \lambda$.

on a donc

$$(1 - c + \frac{\omega^2}{3})\rho(\omega) = c(\frac{c}{\omega} \text{Arctg}(\omega) - 1) + (1 - c + \frac{\omega^2}{3})\frac{1}{\omega} \text{Arctg}(\omega)$$

donc

$$\rho(\omega) = c(1 - c + \frac{\omega^2}{3})^{-1}((1 + \frac{\omega^2}{3})\frac{1}{\omega} \text{Arctg}(\omega) - 1)$$



Pour $c = 1$, on a $\sup_k(\rho) \simeq ((1 + \frac{3}{\omega^2})\frac{1}{\omega} \text{Arctg}(\omega) - \frac{3}{\omega^2}) = 0.23$ d'où l'accélération de convergence.

3.4 Limite Diffusion

Nous cherchons à discrétiser l'équation (??) lorsque l'approximation de la diffusion (1.21) est valide, sur un maillage optiquement épais c'est à dire tel que sa profondeur optique caractéristique ($\Sigma_t \Delta z$ en 1D) est grande. Lorsque le schéma numérique utilisé pour résoudre (??) est convergent, il ne donne pas forcément une solution correcte dans ce cas. En effet, son erreur de consistance tend vers 0 lorsque la profondeur optique caractéristique tend vers 0, ce qui n'est ici pas le cas puisque le maillage est optiquement épais. Bien sûr, si on fait tendre cette profondeur vers 0 en raffinant le maillage, la solution numérique tend vers la solution exacte, mais ce qui nous intéresse ici est un schéma pour l'équation du transport qui approche la solution de (1.21) lorsque ϵ tend vers 0 et ceci sur un maillage dont la taille caractéristique est la distance $\frac{1}{\sqrt{3\Sigma_t\Sigma_a}}$ indépendante de ϵ . Cette dimension caractéristique de variation de la solution de (1.21) est d'ordre 0 par rapport à ϵ avec la mise à l'échelle (1.19) et donc $\frac{1}{\epsilon}$ fois plus grande que le libre parcours ($\frac{\epsilon}{\Sigma_t}$). Lorsqu'un schéma possède cette propriété, on dit alors qu'il respecte la limite diffusion.

L'intérêt de ce type de schéma est qu'il permet de traiter en même temps des zones diffusives et des zones transparentes avec des maillages dans les zones diffusives de taille raisonnable.

La technique pour déterminer si un schéma numérique de résolution de l'équation du transport a la limite diffusion est d'appliquer la mise à l'échelle (1.19) à la forme discrétisée de (??), de développer la solution numérique en puissances de ϵ et de chercher l'équation aux différences vérifiée par son développement jusqu'à un certain ordre. Si cette équation correspond à une discrétisation consistante de (1.21), le schéma respecte la limite diffusion.

Cette section concerne un schéma aux éléments finis linéaires discontinus en 1D plan infini. On y redémontre un résultat de Larsen et de Morel [30, 38]. La démonstration est conduite en 5 étapes.

- Tout d'abord, on démontre que Φ_0 est isotrope.
- On trouve ensuite l'équation vérifiée par le moment angulaire d'ordre 1 de Φ_1 . C'est l'équivalent discret de l'équation du flux : $\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 0$.
- On démontre ensuite que Φ_0 est continue.
- Puis on relie le flux à Φ_0 par l'équivalent discret de la loi de Fick $\vec{F} = -\frac{1}{3\Sigma} \vec{\nabla} \Phi_0$. On démontre qu'on trouve un schéma d'éléments finis linéaires continus.
- On s'attache ensuite à déterminer les conditions aux limites de cette équation de diffusion. Lorsque l'intensité entrante $g(\mu)$ est anisotrope, nous savons qu'il se développe sur quelques libre-parcours une couche limite dans laquelle l'intensité devient isotrope. Ce problème de couche limite se pose également à l'interface d'un milieu transparent et d'un milieu diffusif lorsque l'intensité provenant du milieu transparent sur l'interface est anisotrope [46]. Lorsqu'on fait l'hypothèse de la diffusion, la "bonne" condition aux limites n'est pas la condition de Dirichlet en prenant comme valeur de l'intensité au bord : $\int 2\mu g(\mu) d\mu$ mais la condition dite

de Chandrasekhar [18] dont la version approchée consiste à prendre comme condition de Dirichlet : $\int(\mu + \frac{3}{2}\mu^2)g(\mu)d\mu$. On démontre que la solution discrète Φ_0 possède la propriété remarquable d'être égale à $\int(\mu + \frac{3}{2}\mu^2)g(\mu)d\mu$ au bord, ce qui signifie qu'il n'est pas nécessaire de mailler au libre-parcours la couche limite pour avoir la bonne solution à l'intérieur du domaine.

On part de l'équation de transport en plan infini 1D (3.7). avec avec $L = 1$, $c = 1$ et pour conditions aux limites :

$$\phi(0, \mu \geq 0) = g(\mu), \quad \Phi(1, \mu \leq 0) = h(\mu).$$

On redémontre ci dessous un résultat de Larsen et de Morel [29, 38] :

Par rapport au chapitre précédent, on a supposé que $\Sigma_a = 0$ mais prendre en compte une section d'absorption non nulle ne pose pas de difficulté particulière.

Les directions discrètes sont notées μ_m , la maille j est l'intervalle $[z_{j-\frac{1}{2}}, z_{j+\frac{1}{2}}]$, on suppose pour plus de simplicité que le maillage est uniforme de pas Δz .

La valeur de Φ sur la demi-maille $[z_{j-\frac{1}{2}}, z_j]$ et pour la direction μ_m est notée $\Phi_{j,G}^m$.

La valeur de u sur la demi-maille $[z_j, z_{j+\frac{1}{2}}]$ et pour la direction μ_m est notée $\Phi_{j,D}^m$.

Σ est supposé linéaire discontinue.

$\Sigma_{j,G}$ et $\Sigma_{j,D}$ sont les valeurs de Σ dans la maille j aux sommets $z_{j-\frac{1}{2}}$ et $z_{j+\frac{1}{2}}$.

On pose :

$$\Phi_j^m = \frac{\Phi_{j,G}^m + \Phi_{j,D}^m}{2}.$$

Le "lumping" ou "condensation" de la matrice de masse consiste à faire l'approximation :

$$\int_{z_{j-\frac{1}{2}}}^{z_{j+\frac{1}{2}}} \lambda_A \lambda_B dz = \delta_A^B \int_{z_{j-\frac{1}{2}}}^{z_{j+\frac{1}{2}}} \lambda_A dz$$

dans le terme de scattering $\Sigma\Phi - \Sigma\tilde{\Phi}$, où λ_A est la fonction affine qui vaut 1 au sommet A et 0 au sommet B (A et B pouvant être les points $z_{j-\frac{1}{2}}$ ou $z_{j+\frac{1}{2}}$).

Le schéma aux éléments finis linéaires discontinus lumpés s'écrit en 1D :

Trouver $\Phi_{j,G}^m, \Phi_{j,D}^m$ solutions de :

$$\begin{cases} \mu_m(\Phi_j^m - \Phi_{j-\frac{1}{2}}^m) + \frac{\Phi_{j,G}^m}{2}\Sigma_{j,G}\Delta z = \frac{\tilde{\Phi}_{j,G}}{2}\Sigma_{j,G}\Delta z, \\ \mu_m(\Phi_{j+\frac{1}{2}}^m - \Phi_j^m) + \frac{\Phi_{j,D}^m}{2}\Sigma_{j,D}\Delta z = \frac{\tilde{\Phi}_{j,D}}{2}\Sigma_{j,D}\Delta z, \end{cases} \quad (3.12)$$

avec :

$$\tilde{\Phi} = \sum_m \omega_m u^m,$$

et

$$\begin{aligned} \Phi_{j-\frac{1}{2}}^m &= \Phi_{j-1,D}^m \text{ si } \mu_m \geq 0, \\ \Phi_{j-\frac{1}{2}}^m &= \Phi_{j,G}^m \text{ si } \mu_m \leq 0, \end{aligned}$$

pour la maille 1 = $[x_{\frac{1}{2}}, x_{\frac{3}{2}}]$, ($x_{\frac{1}{2}} = 0$)

$$\begin{aligned} \Phi_{\frac{1}{2}}^m &= g(\mu_m) \text{ si } \mu_m \geq 0, \\ \Phi_{\frac{1}{2}}^m &= \Phi_{1,G}^m \text{ si } \mu_m \leq 0, \end{aligned}$$

de même pour la dernière maille $N = [x_{N-\frac{1}{2}}, x_{N+\frac{1}{2}}]$, ($x_{N+\frac{1}{2}} = 1$)

$$\begin{aligned} \Phi_{N+\frac{1}{2}}^m &= h(\mu_m) \text{ si } \mu_m \leq 0, \\ \Phi_{N+\frac{1}{2}}^m &= \Phi_{N,D}^m \text{ si } \mu_m \geq 0. \end{aligned}$$

Remarque : pour $\mu_m \geq 0$, $\Phi_{j-\frac{1}{2}}^m$ est une donnée pour le système (3.12) et $\Phi_{j+\frac{1}{2}}^m$ une inconnue et inversement pour $\mu_m \leq 0$.

Les ω_m sont les poids d'une formule de quadrature sur $[-1, +1]$ normalisés de telle sorte que $\sum_m \omega_m = 1$.

Dans la limite diffusion, la profondeur optique (nombre de libres parcours) tend vers l'infini dans chaque maille, on introduit donc le petit paramètre $\epsilon = \frac{1}{\Sigma\Delta z}$. On note : $\tilde{\Sigma}$, une valeur caractéristique de Σ ,

$$\Sigma_{j,G} = \frac{\Sigma_{j,G}}{\tilde{\Sigma}},$$

$$\Sigma_{j,D} = \frac{\Sigma_{j,D}}{\tilde{\Sigma}}.$$

Le système (3.12) se réécrit :

$$\epsilon\mu_m(\Phi_j^m - \Phi_{j-\frac{1}{2}}^m) + \Sigma_{j,G}\frac{\Phi_{j,G}^m}{2} = \Sigma_{j,G}\frac{\tilde{\Phi}_{j,G}^m}{2}, \quad (3.13)$$

$$\epsilon\mu_m(\Phi_{j+\frac{1}{2}}^m - \Phi_j^m) + \Sigma_{j,D}\frac{\Phi_{j,D}^m}{2} = \Sigma_{j,D}\frac{\tilde{\Phi}_{j,D}^m}{2}. \quad (3.14)$$

On introduit le développement :

$$\Phi_{j,G}^m = \Phi_{j,G,0}^m + \epsilon\Phi_{j,G,1}^m + \epsilon^2\Phi_{j,G,2}^m + \dots,$$

$$\Phi_{j,D}^m = \Phi_{j,D,0}^m + \epsilon\Phi_{j,D,1}^m + \epsilon^2\Phi_{j,D,2}^m + \dots$$

On veut montrer que $\tilde{\Phi}_0$ ($\tilde{\Phi}_0 = \sum_m \omega_m \Phi_0^m$) est continue soit :

$$\tilde{\Phi}_{j,D,0} = \tilde{\Phi}_{j+1,G,0} = \tilde{\Phi}_{j+\frac{1}{2},0},$$

et que $\tilde{\Phi}_{j+\frac{1}{2},0}$ vérifie une équation discrète consistante avec l'équation de diffusion associée à l'équation de transport continue :

$$-\frac{d}{dz} \frac{1}{3\Sigma} \frac{d}{dz} \Phi = 0.$$

ici, Σ est la quantité dimensionnée de l'équation de transport continue (3.7).

On précisera ensuite les conditions aux limites de cette équation discrète.

3.4.1 Limite diffusion

Isotropie

On fait dans la suite l'hypothèse que le système de quadrature vérifie la relation :

$$\sum_m \mu_m \omega_m = 0, \quad (3.15)$$

ce qui est vérifié s'il est symétrique par rapport à 0. On montre que u est isotrope à l'ordre 0.

Pour cela, on commence par identifier les termes d'ordre 0 dans (3.13) et (3.14).

Il vient :

$$\Phi_{j,G,0}^m = \tilde{\Phi}_{j,G,0},$$

$$\Phi_{j,D,0}^m = \tilde{\Phi}_{j,D,0},$$

ce qui entraîne que u ne dépend pas de m et est donc isotrope à l'ordre 0.

Equation du flux

On montre que le flux discret ; $\sum_m \omega_m \mu_m \Phi_1^m$, vérifie une version discrète de l'équation du flux : $\frac{d}{dz}(F) = 0$.

En écrivant l'équation (3.14) sur la maille j et l'équation (3.13) sur la maille $j+1$, en les multipliant par ω_m , en les sommant sur les m et en les ajoutant, on obtient :

$$\epsilon \sum_m (\omega_m \mu_m \Phi_{j+1}^m - \omega_m \mu_m \Phi_j^m) + \sum_m \omega_m \left(\frac{\Sigma_{j,D} \Phi_{j,D}^m + \Sigma_{j+1,G} \Phi_{j+1,G}^m}{2} \right) = \frac{\Sigma_{j,D} \tilde{\Phi}_{j,D} + \Sigma_{j+1,G} \tilde{\Phi}_{j+1,G}}{2}.$$

On pose :

$$J_j^1 = \sum_m \omega_m \mu_m \Phi_{j,1}^m.$$

En identifiant les termes facteurs de ϵ^2 , il vient :

$$J_{j+1}^1 - J_j^1 + \sum_m \omega_m \left(\frac{\Sigma_{j,D} \Phi_{j,D,2}^m + \Sigma_{j+1,G} \Phi_{j+1,G,2}^m}{2} \right) = \frac{\Sigma_{j,D} \tilde{\Phi}_{j,D,2} + \Sigma_{j+1,G} \tilde{\Phi}_{j+1,G,2}}{2},$$

donc

$$J_{j+1}^1 - J_j^1 = 0. \quad (3.16)$$

Continuité

On établit maintenant la continuité de u à l'ordre 0. Pour cela, nous prenons l'équation (3.13), nous sommions sur les m en multipliant par le poids ω_m . En identifiant les termes d'ordre 1, on obtient :

$$\sum_m \omega_m \mu_m (\Phi_{j,0}^m - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}^m) + \Sigma_{j,G} \sum_m \omega_m \frac{\Phi_{j,G,1}^m}{2} = \Sigma_{j,G} \frac{\tilde{\Phi}_{j,G,1}}{2},$$

donc :

$$\sum_m \omega_m \mu_m (\Phi_{j,0}^m - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}^m) = 0.$$

Or $\Phi_{j,0}^m$ ne dépend pas de m , donc grâce à (3.15), on a :

$$\sum_m \omega_m \mu_m \Phi_{j-\frac{1}{2},0}^m = 0,$$

ou

$$\sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m u_{j-1,D,0}^m = \sum_{\mu_m \leq 0} \omega_m |\mu_m| \Phi_{j,G,0}^m,$$

soit

$$\tilde{\Phi}_{j-1,D,0} \sum_{\mu_m \geq 0} \mu_m \omega_m = \tilde{\Phi}_{j,G,0} \sum_{\mu_m \leq 0} \omega_m |\mu_m|.$$

On obtient grâce à (3.15) :

$$\tilde{\Phi}_{j-1,D,0} = \tilde{\Phi}_{j,G,0}, \quad (3.17)$$

ce qui prouve la continuité de $\tilde{\Phi}_0$.

Expression du flux

Nous allons maintenant exprimer J^1 en fonction de $\tilde{\Phi}_0$, ce qui permettra, en remplaçant dans (3.16) de trouver l'équation de diffusion vérifiée par $\tilde{\Phi}_0$.

On pose $\tilde{\Phi}_{j-1,D,0} = \tilde{\Phi}_{j,G,0} = \tilde{\Phi}_{j-\frac{1}{2},0}$. On multiplie (3.13) et (3.14) par $\mu_m \omega_m$, on somme sur les m et on identifie les termes d'ordre 1 donc :

$$\sum_m \omega_m \mu_m^2 (\Phi_{j,0} - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}) + \Sigma_{j,G} \sum_m \omega_m \mu_m \frac{\Phi_{j,G,1}^m}{2} = 0, \quad (3.18)$$

$$\sum_m \omega_m \mu_m^2 (\Phi_{j+\frac{1}{2},0} - \Phi_{j,0}) + \Sigma_{j,D} \sum_m \omega_m \mu_m \frac{\Phi_{j,D,1}^m}{2} = 0. \quad (3.19)$$

En supposant que :

$$\sum_m \omega_m \mu_m^2 = \frac{1}{3}, \quad (3.20)$$

en sommant les deux équations après division par $\Sigma_{j,G}$ et $\Sigma_{j,D}$, on obtient :

$$\frac{1}{3\Sigma_{j,G}} (\Phi_{j,0} - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}) + \frac{1}{3\Sigma_{j,D}} (\Phi_{j+\frac{1}{2},0} - \Phi_{j,0}) + J_j^1 = 0.$$

Donc puisque

$$\Phi_{j,0} = \frac{\Phi_{j-\frac{1}{2},0} + \Phi_{j+\frac{1}{2},0}}{2},$$

on a :

$$\frac{1}{6\Sigma_{j,G}}(\Phi_{j+\frac{1}{2},0} - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}) + \frac{1}{6\Sigma_{j,D}}(\Phi_{j+\frac{1}{2},0} - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}) + J_j^1 = 0,$$

$$J_j^1 = -\frac{1}{3\Sigma_j}(\Phi_{j+\frac{1}{2},0} - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}) \quad (3.21)$$

avec :

$$\frac{2}{\Sigma_j} = \frac{1}{\Sigma_{j,G}} + \frac{1}{\Sigma_{j,D}}.$$

En remplaçant dans (3.16), on trouve :

$$-\frac{1}{3\Sigma_{j+1}}(\Phi_{j+\frac{3}{2},0} - \Phi_{j+\frac{1}{2},0}) + \frac{1}{3\Sigma_j}(\Phi_{j+\frac{1}{2},0} - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}) = 0,$$

ce qui est une discrétisation aux noeuds consistante de l'équation de diffusion.

Conditions aux limites

Nous allons maintenant chercher quelles sont les conditions aux limites de cette équation, par exemple à gauche, ce que l'on doit prendre comme valeur de $\Phi_{\frac{1}{2},0}$.

On écrit pour la première maille (3.13) et (3.14) :

$$\epsilon\mu_m(\Phi_1^m - \Phi_{\frac{1}{2}}^m) + \Sigma_{1,G}\frac{\Phi_{1,G}^m}{2} = \Sigma_{1,G}\frac{\tilde{\Phi}_{1,G}}{2},$$

$$\epsilon\mu_m(\Phi_{\frac{3}{2}}^m - \Phi_1^m) + \Sigma_{1,D}\frac{\Phi_{1,D}^m}{2} = \Sigma_{1,D}\frac{\tilde{\Phi}_{1,D}}{2}.$$

La première équation à l'ordre 0 donne :

$$\Phi_{1,G,0}^m = \tilde{\Phi}_{1,G,0},$$

donc $\Phi_{1,G,0}^m$ ne dépend pas de m .

De même, $\Phi_{1,D,0}^m$ ne dépend pas de m , donc $\Phi_{1,0}^m$ ne dépend pas de m .

A l'ordre 1, en sommant sur les m et en multipliant par ω_m , on obtient :

$$\sum_m \omega_m \mu_m (\Phi_{1,0}^m - \Phi_{\frac{1}{2},0}^m) = 0.$$

Ici, $\Phi_{\frac{1}{2}}^m$ est une donnée pour $\mu_m \geq 0$, notons $\Phi_{\frac{1}{2},0}^m = g_0^m$ pour $\mu_m \geq 0$.

Puisque $\Phi_{1,0}^m$ ne dépend pas de m , on obtient :

$$\sum_m \omega_m \mu_m \Phi_{\frac{1}{2},0}^m = 0,$$

soit encore :

$$\sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m g_0^m = \sum_{\mu_m \leq 0} \omega_m |\mu_m| \Phi_{1,G,0}^m.$$

Donc :

$$u_{1,G,0}^m = \tilde{\Phi}_{1,G,0} = 4 \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m g_0^m, \quad (3.22)$$

à condition que le système de quadrature vérifie :

$$\sum_{\mu_m \leq 0} \omega_m |\mu_m| = \frac{1}{4}. \quad (3.23)$$

A l'ordre 0, la valeur à gauche dans la première maille est donc entièrement déterminée par la condition aux limites, mais nous allons voir que $\Phi_{\frac{1}{2},0} = \tilde{\Phi}_{\frac{1}{2},0}$ n'est pas égale à $\tilde{\Phi}_{1,G,0}$.

Pour cela, nous allons déterminer $\Phi_{\frac{1}{2},0}$ en utilisant (3.21) :

$$J_1^1 = -\frac{1}{3\Sigma_1}(\Phi_{\frac{3}{2},0} - \Phi_{\frac{1}{2},0}). \quad (3.24)$$

On a (3.18,3.19) pour $j = 1$:

$$\begin{aligned} \sum_m \omega_m \mu_m^2 (\Phi_{1,0} - \Phi_{\frac{1}{2},0}^m) + \Sigma_{1,G} \sum_m \omega_m \mu_m \frac{\Phi_{1,G,1}^m}{2} &= 0, \\ \sum_m \omega_m \mu_m^2 (\Phi_{\frac{3}{2},0} - \Phi_{1,0}) + \Sigma_{1,D} \sum_m \omega_m \mu_m \frac{\Phi_{1,D,1}^m}{2} &= 0. \end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Sigma_{1,G}} \sum_m \omega_m \mu_m^2 (\Phi_{1,0} - \Phi_{\frac{1}{2},0}^m) + \frac{1}{\Sigma_{1,D}} \frac{1}{3} (\Phi_{\frac{3}{2},0} - \Phi_{1,0}) + J_1^1 &= 0, \\ J_1^1 &= -\frac{1}{\Sigma_{1,D}} (\Phi_{\frac{3}{2},0} - \Phi_{1,0}) \frac{1}{3} - \frac{1}{\Sigma_{1,G}} \Phi_{1,0} \frac{1}{3} + \frac{1}{\Sigma_{1,G}} \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m^2 g_0^m \\ &\quad + \frac{1}{\Sigma_{1,G}} \Phi_{1,G,0} \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

En substituant $\Phi_{1,0}$ par $\frac{\Phi_{1,G,0} + \Phi_{\frac{3}{2},0}}{2}$ dans l'équation précédente, on obtient, en supposant que $\Sigma_{1,G} = \Sigma_{1,D} = \Sigma_1$ pour simplifier l'écriture :

$$\begin{aligned} J_1^1 &= -\frac{1}{2\Sigma_1} (\Phi_{\frac{3}{2},0} - \Phi_{1,G,0}) \frac{1}{3} - \frac{1}{\Sigma_1} \frac{\Phi_{1,G,0} + \Phi_{\frac{3}{2},0}}{2} \frac{1}{3} \\ &\quad + \frac{1}{\Sigma_1} \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m^2 g_0^m + \frac{1}{\Sigma_1} \Phi_{1,G,0} \frac{1}{6}, \\ J_1^1 &= -\frac{1}{3\Sigma_1} \Phi_{\frac{3}{2},0} + \frac{1}{\Sigma_1} \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m^2 g_0^m + \frac{1}{6\Sigma_1} \Phi_{1,G,0}, \\ J_1^1 &= -\frac{1}{3\Sigma_1} (\Phi_{\frac{3}{2},0} - \frac{1}{2} \Phi_{1,G,0} - 3 \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m^2 g_0^m). \end{aligned} \tag{3.25}$$

On a donc en utilisant (3.24, 3.22, 3.25) :

$$\Phi_{\frac{1}{2},0} = 2 \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m g_0^m + 3 \sum_{\mu_m \geq 0} \omega_m \mu_m^2 g_0^m.$$

Ceci est la condition aux limites de l'équation de diffusion associée au transport. Il faut noter que la condition aux limites "exacte" [18] associée à l'équation de diffusion en continu est :

$$\Phi(0) = \int_0^1 \frac{\sqrt{3}}{2} \mu H(\mu) g(\mu) d\mu,$$

où

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \mu H(\mu) \simeq \mu + \frac{3}{2} \mu^2.$$

Remarque : pour obtenir la condition aux limites associée à une intensité entrante anisotrope, il faut ajouter une correction d'ordre ϵ à la condition aux limites précédente [41].

On retrouve bien la version discrète de :

$$\Phi(0) = \int_0^1 (\mu + \frac{3}{2} \mu^2) g(\mu) d\mu.$$

Il faut noter que si l'intensité entrante est isotrope (g_0^m indépendant de m), on trouve le résultat exact quelle que soit la valeur de $\frac{\Sigma_1}{\Sigma_{1,G}}$. En effet :

$$\Phi_{\frac{1}{2},0} = \frac{1}{2} (2 - \frac{\Sigma_1}{\Sigma_{1,G}}) g_0 + \frac{1}{2} \frac{\Sigma_1}{\Sigma_{1,G}} g_0 = g_0.$$

On a alors :

$$\Phi_{\frac{1}{2},0} = \tilde{\Phi}_{1,G,0} = g_0.$$

Résumé

Sous des hypothèses naturelles sur la quadrature utilisée (3.15,3.20,3.23), le schéma aux éléments finis linéaires discontinus lumpés a bien la limite diffusion. Les conditions aux limites à l'ordre 0 sont des conditions de Dirichlet avec une pondération en $\mu + \frac{3}{2}\mu^2$ de l'intensité entrante. Ceci constitue un résultat remarquable et surprenant car si l'intensité entrante n'est pas isotrope, il y a une couche limite qu'il est normalement indispensable de mailler très finement (avec des mailles de l'ordre du libre-parcours) pour avoir un résultat précis. Ce schéma permet d'avoir un résultat précis sans avoir à mailler finement le bord du domaine.

3.4.2 Limite diffusion du schéma Diamant

En régime diffusion, les équations du schéma Diamant sont :

$$\frac{\mu_m}{\Delta z_j}(\Phi_{j+\frac{1}{2}}^m - \Phi_{j-\frac{1}{2}}^m) + \frac{\Sigma_{Tj}}{\epsilon}\Phi_j^m = \left(\frac{\Sigma_{Tj}}{\epsilon} - \epsilon\Sigma_{aj}\right)\tilde{\Phi}_j + \epsilon Q_j$$

avec $\Phi_{\frac{1}{2}}^m = f_m$ pour $\mu_m > 0$ et $\Phi_{J+\frac{1}{2}}^m = g_m$ pour $\mu_m < 0$.

$$\Phi_j^m = \frac{1}{2}(\Phi_{j-\frac{1}{2}}^m + \Phi_{j+\frac{1}{2}}^m)$$

avec $\tilde{\Phi}_j = \sum_m \omega_m \Phi_j^m$, les ω_m normalisés de telle façon à ce qu'on ait $\sum_m \omega_m = 1$ et $\sum_m \omega_m \mu_m^2 = \frac{1}{3}$.

Ordre -1

A l'ordre $\frac{1}{\epsilon}$ on a

$$\Sigma_{Tj}(\Phi_{j,0}^m - \tilde{\Phi}_{j,0}) = 0$$

donc

$$\Phi_{j,0}^m = \tilde{\Phi}_{j,0} \quad (3.26)$$

Ordre 0

A l'ordre 0 en ϵ on a

$$\Sigma_{Tj}(\Phi_{j,1}^m - \tilde{\Phi}_{j,1}) = -\frac{\mu_m}{\Delta z_j}(\Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m - \Phi_{j-\frac{1}{2},0}^m) \quad (3.27)$$

$$\Phi_{j,0}^m = \frac{1}{2}(\Phi_{j-\frac{1}{2},0}^m + \Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m) = \tilde{\Phi}_{j,0}. \quad (3.28)$$

$$\Phi_{\frac{1}{2},0}^m = f_m, \Phi_{J+\frac{1}{2},0}^m = g_m \quad (3.29)$$

En posant

$$u_{j+\frac{1}{2},0} = \sum_m 3\mu_m^2 \omega_m \Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m \quad (3.30)$$

$$\eta_{j+\frac{1}{2},0}^m = \Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m - u_{j+\frac{1}{2},0}, \quad (3.31)$$

on a donc $\sum_m \mu_m^2 \omega_m \eta_{j+\frac{1}{2},0}^m = 0$

En utilisant les équations (3.28) et (3.31), on obtient :

$$\tilde{\Phi}_{j,0} = \frac{1}{2}(u_{j-\frac{1}{2},0} + u_{j+\frac{1}{2},0}) + \frac{1}{2}(\eta_{j-\frac{1}{2},0}^m + \eta_{j+\frac{1}{2},0}^m) \quad (3.32)$$

et en appliquant l'opérateur $\sum_m \mu_m^2 \omega_m$,

$$\tilde{\Phi}_{j,0} = \frac{1}{2}(u_{j-\frac{1}{2},0} + u_{j+\frac{1}{2},0}) \quad (3.33)$$

on obtient donc $0 = \eta_{j-\frac{1}{2},0}^m + \eta_{j+\frac{1}{2},0}^m$ donc

$$\eta_{j+\frac{1}{2},0}^m = (-1)^j \eta_m. \quad (3.34)$$

donc

$$\sum_m \mu_m^2 \omega_m \eta_m = 0 \quad (3.35)$$

et en utilisant (3.31)

$$\Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m = u_{j+\frac{1}{2},0} + (-1)^j \eta_m \quad (3.36)$$

L'équation (3.27) devient :

$$\Sigma_{Tj}(\Phi_{j,1}^m - \tilde{\Phi}_{j,1}) = -\frac{\mu_m}{\Delta z_j}(u_{j+\frac{1}{2},0} - u_{j-\frac{1}{2},0} + 2(-1)^j \eta_m) \quad (3.37)$$

On a donc

$$\Phi_{j,1}^m = \tilde{\Phi}_{j,1} - \frac{\mu_m}{\Sigma_{Tj} \Delta z_j}(u_{j+\frac{1}{2},0} - u_{j-\frac{1}{2},0} + 2(-1)^j \eta_m) \quad (3.38)$$

et en appliquant l'opérateur $\sum_m \omega_m$ à l'équation (3.37), on obtient

$$\sum_m \mu_m \omega_m \eta_m = 0. \quad (3.39)$$

Ordre 1

On obtient

$$\Sigma_{Tj}(\Phi_{j,2}^m - \tilde{\Phi}_{j,2}) = -\frac{\mu_m}{\Delta z_j}(\Phi_{j+\frac{1}{2},1}^m - \Phi_{j-\frac{1}{2},1}^m) - \Sigma_{aj} \Phi_{j,0}^m + Q_j \quad (3.40)$$

$$\Phi_{j,1}^m = \frac{1}{2}(\Phi_{j-\frac{1}{2},1}^m + \Phi_{j+\frac{1}{2},1}^m) \quad (3.41)$$

En appliquant l'opérateur $\sum_m \omega_m$ à l'équation (3.40), on obtient :

$$0 = -\sum_m \omega_m \mu_m (\Phi_{j+\frac{1}{2},1}^m - \Phi_{j-\frac{1}{2},1}^m) - \Delta z_j \Sigma_{aj} \tilde{\Phi}_{j,0} + \Delta z_j Q_j \quad (3.42)$$

On additionne les équations (3.42) pour les mailles j et $j+1$. En utilisant (3.41), on obtient :

$$0 = -2 \sum_m \omega_m \mu_m (\Phi_{j+1,1}^m - \Phi_{j,1}^m) - (\Delta z_j \Sigma_{aj} \tilde{\Phi}_{j,0} + \Delta z_{j+1} \Sigma_{a,j+1} \tilde{\Phi}_{j+1,0}) + (\Delta z_j Q_j + \Delta z_{j+1} Q_{j+1})$$

Finalement, en remplaçant $\Phi_{j+1,1}^m$ et $\Phi_{j,1}^m$ par leur expression (3.38) et en utilisant (3.33) et (3.35), $u_{j+\frac{1}{2},0}$ satisfait l'équation de diffusion discrétisée :

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{1}{3\Delta z_{j+1}\Sigma_{t,j+1}}(u_{j+\frac{3}{2},0} - u_{j+\frac{1}{2},0}) - \frac{1}{3\Delta z_j\Sigma_{tj}}(u_{j+\frac{1}{2},0} - u_{j-\frac{1}{2},0})\right) \\ & + \frac{1}{4}((\Delta z_{j+1}\Sigma_{a,j+1}(u_{j+\frac{1}{2},0} + u_{j+\frac{3}{2},0}) + (\Delta z_j\Sigma_{aj}(u_{j+\frac{1}{2},0} + u_{j-\frac{1}{2},0})) \\ & = \frac{1}{2}(\Delta z_j Q_j + \Delta z_{j+1} Q_{j+1}) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Les équations (3.28), (3.36) donnent :

$$\Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m = u_{j+\frac{1}{2},0} + (-1)^j \eta_m$$

et

$$\Phi_{j,0}^m = \frac{1}{2}(u_{j-\frac{1}{2},0} + u_{j+\frac{1}{2},0})$$

On en déduit que les flux centrés $\Phi_{j,0}^m$ ont la limite diffusion car l'équation (3.43) est une discrétisation consistante de l'équation de diffusion tandis que les flux aux noeuds $\Phi_{j+\frac{1}{2},0}^m$ peuvent osciller en espace autour de la solution de l'équation de diffusion $u_{j-\frac{1}{2},0}$ si la condition aux limites est anisotrope car alors η_m est non nul.

Les conditions aux limites pour l'équation (3.43) s'obtiennent ainsi :

on a $u_{\frac{1}{2},0} + \eta_m = f_m$ pour $\mu_m > 0$ et $u_{J+\frac{1}{2},0} + (-1)^J \eta_m = g_m$ ce qui détermine entièrement η_m dès que $u_{\frac{1}{2},0}$ et $u_{J+\frac{1}{2},0}$ sont connues.

Pour les connaître on utilise les équations (3.35) et (3.39) en remplaçant η_m par leurs expressions précédentes. .

On obtient ainsi deux équations à deux inconnues $u_{\frac{1}{2},0}$ et $u_{J+\frac{1}{2},0}$:

$$u_{\frac{1}{2},0} = \sum_{\mu_m > 0} \left(\frac{\mu_m}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) f_m \omega_m + (-1)^J \sum_{\mu_m < 0} \left(\frac{-|\mu_m|}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) g_m \omega_m$$

et

$$u_{J+\frac{1}{2},0} = \sum_{\mu_m < 0} \left(\frac{|\mu_m|}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) g_m \omega_m + (-1)^J \sum_{\mu_m > 0} \left(\frac{-\mu_m}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) f_m \omega_m$$

avec $\gamma = 2 \sum_{\mu_m > 0} \mu_m \omega_m \simeq \frac{1}{2}$.

On observe que si les flux entrants sont isotropes $f_m = f$ et $g_m = g$, on obtient les bonnes conditions aux limites pour l'équation de diffusion : $u_{\frac{1}{2},0} = f$ et $u_{J+\frac{1}{2},0} = g$.

Par contre si les conditions aux limites sont anisotropes, alors les conditions aux limites sont fausses à cause des deux termes $(-1)^J \sum_{\mu_m < 0} \left(\frac{-|\mu_m|}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) g_m \omega_m$ et $(-1)^J \sum_{\mu_m > 0} \left(\frac{-\mu_m}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) f_m \omega_m$. Les “bonnes” conditions aux limites seraient :

$$u_{\frac{1}{2},0} = \sum_{\mu_m > 0} \left(\frac{\mu_m}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) f_m \omega_m$$

et

$$u_{J+\frac{1}{2},0} = \sum_{\mu_m < 0} \left(\frac{|\mu_m|}{\gamma} + 3\mu_m^2 \right) g_m \omega_m$$

Donc, l'équation de diffusion limite est correcte mais pas les valeurs aux bords. La solution limite est donc fausse. On observe également ce comportement à la frontière entre un milieu transparent et un milieu diffusif dès que le flux au niveau de l'interface est anisotrope.

Annexe A

Notations employées

Variables indépendantes :

- coordonnées d'espace $\vec{r} = (x, y, z)$
- direction $\vec{\Omega} = (\varepsilon, \eta, \mu)$
- vitesse du neutron v
- énergie du neutron $E = \frac{1}{2} m v^2$
- temps t

Section efficace macroscopique :

- d'absorption Σ_a
- de diffusion (*scattering*) Σ_s
- totale $\Sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$

Flux :

- angulaire Φ
- scalaire (intégré) $\tilde{\Phi} = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{S}_2} \Phi(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega}$

Annexe B

Equation du transport dans diverses géométries

B.1 1D plan infini

On a $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \Phi(z, \mu, t)$

$$\text{Or } \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi = \frac{d\Phi}{ds} \text{ et } \frac{d\Phi}{ds} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{dt}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \frac{d\mu}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial z} \frac{dz}{ds}$$

L'équation d'une droite dans ces coordonnées s'écrit :

$$\mu = \text{Constante}, z(s) = z(0) + \mu s \text{ et } s = vt \text{ donc}$$

$$\frac{d\mu}{ds} = 0, \frac{dz}{ds} = \mu \text{ et } \frac{dt}{ds} = \frac{1}{v}$$

Finalement, on obtient :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi = \frac{d\Phi}{ds} = \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mu \frac{\partial \Phi}{\partial z}$$

B.2 1D sphérique

On a $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \Phi(r, \mu, t)$ où $\vec{r} = OM$ et $\mu = \vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r}}{r}$

$$\text{Or } \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi = \frac{d\Phi}{ds} \text{ et } \frac{d\Phi}{ds} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{dt}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \frac{d\mu}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{dr}{ds}$$

L'équation d'une droite dans ces coordonnées s'écrit :

$$r\sqrt{1-\mu^2} = \text{Constante}, r(s)\mu(s) = r(0)\mu(0) + s \text{ et } s = vt \text{ donc}$$

$$\frac{d\mu}{ds} = \frac{1-\mu^2}{r}, \frac{dr}{ds} = \mu \text{ et } \frac{dt}{ds} = \frac{1}{v}$$

Finalement, on obtient :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi = \frac{d\Phi}{ds} = \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} + \mu \frac{\partial \Phi}{\partial r}$$

qui peut être mise sous la forme conservative suivante :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi = \frac{d\Phi}{ds} = \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{v} \frac{\partial(r^2 \Phi)}{\partial t} + \frac{\partial((1 - \mu^2)r\Phi)}{\partial \mu} + \frac{\partial(\mu r^2 \Phi)}{\partial r} \right)$$

B.3 2D plan

B.4 2D axisymétrique

Annexe C

Problème de Milne

Soit c une constante $0 \leq c \leq 1$ et u l'unique solution dans $L^\infty([0, +\infty[\times [-1, +1])$ de :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial u}{\partial x} + u = c\tilde{u}, \\ u(0, \mu) = g(\mu), \mu > 0. \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Il s'agit de trouver $u(0, \mu)$ pour $\mu < 0$ en fonction de la donnée $g(\mu)$ pour $\mu > 0$. On cherche la fonction $S(\mu, \mu')$ telle que :

$$\mu u(0, \mu) = \int_0^1 S(\mu, \mu') g(\mu') d\mu'$$

pour $\mu < 0$.

On commence par remarquer que

$$\mu u(x_0, \mu) = \int_0^1 S(\mu, \mu') u(x_0, \mu') d\mu'$$

pour $\mu < 0$ et ceci pour tout $x_0 > 0$ car la fonction v définie par $v(x, \mu) = u(x + x_0, \mu)$ pour $x > 0$ est solution du problème de Milne :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial v}{\partial x} + v = c\tilde{v}, \\ v(0, \mu) = u(x_0, \mu), \mu > 0. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

En d'autres termes, l'opérateur de réflexion S est invariant par translation.

On pose $u^+(x, \mu) = u(x, \mu)$ pour $\mu > 0$ et $u^-(x, \mu) = u(x, -\mu)$ pour $\mu > 0$. On a alors :

$$\begin{cases} \mu u^-(x, \mu) = \int_0^1 S(\mu, \mu') u^+(x, \mu') d\mu', \\ \mu \frac{\partial u^+}{\partial x} + u^+ = \frac{c}{2} \int_0^1 (u^+ + u^-) d\mu', \\ -\mu \frac{\partial u^-}{\partial x} + u^- = \frac{c}{2} \int_0^1 (u^+ + u^-) d\mu', \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

ou encore :

$$\begin{cases} \mu u^-(x, \mu) = \int_0^1 S(\mu, \mu') u^+(x, \mu') d\mu', \\ \mu \frac{\partial u^+}{\partial x} + u^+ = \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+ + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 d\lambda S(\mu', \lambda) u^+(x, \lambda)), \\ -\mu \frac{\partial u^-}{\partial x} + u^- = \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+ + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 d\lambda S(\mu', \lambda) u^+(x, \lambda)). \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

On dérive la première équation par rapport à x :

$$\mu \frac{\partial u^-}{\partial x}(x, \mu) = \int_0^1 S(\mu, \lambda) \frac{\partial u^+}{\partial x}(x, \lambda) d\lambda,$$

on remplace dans cette équation $\frac{\partial u^+}{\partial x}(x, \lambda)$ par sa valeur issue de la seconde équation de (C.4) ce qui donne :

$$\mu \frac{\partial u^-}{\partial x}(x, \mu) = \int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} \left\{ -u^+(x, \lambda) + \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+(x, \mu') + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 S(\mu', \nu) u^+(x, \nu) d\nu) \right\}.$$

En utilisant cette expression dans la troisième équation pour éliminer u^- :

$$\begin{aligned} & - \int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} \left\{ -u^+(x, \lambda) + \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+(x, \mu') + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 S(\mu', \nu) u^+(x, \nu) d\nu) \right\} \\ & + \frac{1}{\mu} \int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) u^+(x, \lambda) \\ & - \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+(x, \mu') + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 d\lambda S(\mu', \lambda) u^+(x, \lambda)) = 0, \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} & \int_0^1 d\lambda u^+(x, \lambda) S(\mu, \lambda) \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\lambda} \right) = \\ & \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+(x, \mu') + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 S(\mu', \nu) u^+(x, \nu) d\nu) \times \int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} \\ & + \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+(x, \mu') + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 d\nu S(\mu', \nu) u^+(x, \nu)) \\ & = \frac{c}{2} \int_0^1 d\mu' (u^+(x, \mu') + \frac{1}{\mu'} \int_0^1 S(\mu', \nu) u^+(x, \nu) d\nu) \times \left(\int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} + 1 \right) \\ & = \frac{c}{2} \int_0^1 d\lambda u^+(x, \lambda) \times \left(\int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} + 1 \right) \\ & + \frac{c}{2} \int_0^1 d\lambda u^+(x, \lambda) \left(\int_0^1 d\mu' \frac{1}{\mu'} S(\mu', \lambda) \right) \times \left(\int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} + 1 \right). \end{aligned}$$

Cette relation devant être vraie pour toute fonction u^+ , on a nécessairement :

$$S(\mu, \lambda) \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\lambda} \right) = \frac{c}{2} \left(1 + \int_0^1 d\lambda S(\mu, \lambda) \frac{1}{\lambda} \right) \times \left(1 + \int_0^1 d\mu' \frac{1}{\mu'} S(\mu', \lambda) \right),$$

ou encore :

$$S(\mu, \mu') \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu'} \right) = \frac{c}{2} \left(1 + \int_0^1 S(\mu, \lambda) \frac{d\lambda}{\lambda} \right) \times \left(1 + \int_0^1 S(\lambda, \mu') \frac{d\lambda}{\lambda} \right).$$

On remarque que le noyau S est symétrique :

$$S(\mu, \mu') = S(\mu', \mu).$$

On introduit la fonction de Chandrasekhar H :

$$H(\mu) = 1 + \int_0^1 S(\mu, \lambda) \frac{d\lambda}{\lambda},$$

on a donc :

$$S(\mu, \mu') \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu'} \right) = \frac{c}{2} H(\mu) H(\mu'),$$

et H vérifie l'équation intégrale non linéaire :

$$H(\mu) = 1 + \frac{c}{2} \mu H(\mu) \int_0^1 \frac{H(\mu') d\mu'}{\mu + \mu'}.$$

Cette fonction qui dépend de c peut se calculer numériquement par un processus itératif. Elle permet d'obtenir :

$$u(0, \mu) = \frac{c}{2} H(\mu) \int_0^1 \frac{H(\mu') \mu'}{\mu + \mu'} g(\mu') d\mu'$$

pour $\mu < 0$.

Bibliographie

- [1] M.L.Adams, “Discontinuous Finite Element Methods in Thick Diffusive Problems”, *Nuclear Science and Engineering*, **137**, 298 (2001) .
- [2] M.L.Adams, “Subcell balance methods”, *Trans Theory and Statistical Physics*, 385-431 (1997).
- [3] M.L.Adams, “Discontinuous Finite Element Transport Solutions in the Thick Diffusion Limit in Cartesian Geometry”,*Proc. International Topical Mtg on Advances in Mathematics, Computations and reactor Physics*, vol **5** ,p 21.1 3-1 Pittsburg (1991).
- [4] M.L.Adams, C.J.Gesh, “Finite Element Solutions of Second-order Forms of the Transport Equation at the Interface Between Diffusive and Non-Diffusive Regions”,*Proc. M&C 2001 Salt Lake City, Utah, USA* (2001).
- [5] M.L.Adams, “Even and odd-parity finite element transport solutions in the thick diffusion limit”,*Proc. International Topical Mtg on Advances in Mathematics, Computations and reactor Physics*, Pittsburg (1991).
- [6] R.E.Alcouffe, “Diffusion Synthetic Acceleration Methods for the Diamond Differenced Discrete Ordinate Equations”, *Nucl.Sci.Eng.***64**, 344-355, (1977).
- [7] G.Bal et Y. Maday, “Coupling of Transport and Diffusion Models in Linear Transport Theory”, *Math. Modeling and Numer. Anal.*, **36**, pp 69-86 (2002).
- [8] C.Bardos, R.Santos, R.Sentis, “Sur le problème de Milne conservatif ”,*C.R. Acad. Sc. Paris*, t. 297 (1983).
- [9] C.Bardos, R.Santos, R.Sentis, “Diffusion Approximation and Computation of the critical size”, *Trans. A.M.S.*,284,pp 617-649 (1984).
- [10] G.I.Bell and S.Glasstone, “Nuclear reactor Theory”, Van Nostrand Reinhold Ltd.,New York (1970).
- [11] E.Bonneaux, “Résolution de Problèmes de transport par Fermeture non linéaire des Equations de Moments”, Thèse (1997).
- [12] J.Bussac, P.Reuss, “Traité de neutronique”, Hermann, (1986).
- [13] B.G.Carlson, “Transport theory : discrete ordinates over the unit sphere”, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-4554, (1970).
- [14] B.G.Carlson, K.D.Lathrop, “Transport theory : The method of discrete ordinates”, in *Computing Methods in Reactor Physics*, edited by H.Greenspan, C.N.Kelber and D.Okrent (Gordon & Breach, New York) 171 (1968).
- [15] J.Cartier, “Résolution de l'équation du transport par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides et approximation par la diffusion de problèmes de transport”, Thèse (Avril 2006).
- [16] J.Cartier, G.Samba, “Mixed Hybrid Finite Element Method for the Transport equation”, *Nuclear Science and Engineering*, **154**, 28-47 (2006).
- [17] K.M Case and P.F.Zweifel, “Linear transport Theory”, Addison-Wesley Publishing Co.,Inc., Reading, Massachusetts (1967).
- [18] S.Chandrasekhar, “Radiative transfer”, Dover, New York (1960).
- [19] R.Dautray, J.L.Lions, “Analyse mathématique et calcul numérique” Chap 21. Masson, Paris (1988).
- [20] J.J.Duderstadt, W.R.Martin, “Transport Theory”, New York, Willey, (1979).
- [21] J.A.Fleck and E. H. Canfield, “A Random Walk Procedure for Improving the Computational Efficiency of the Implicit Monte Carlo Method for Nonlinear Radiation Transport “, *J.Comput.Phys*, **54**, 508 (1984).
- [22] C.J.Gesh,”Finite Element Method for Second Order Forms of the Transport Equation”,Ph.Thesis, Texas A&M University,(1999).
- [23] F.Golse, S.Jin, C.D.Levermore, “the Convergence of Numerical Transfer Schemes in Diffusive Regimes”, 1. The Discrete Ordinate Method”, *SIAM J.Num.Anal.*, **36** pp 1333-1369 (1999).
- [24] F.Golse, S.Jin, C.D.Levermore, “A Domain Decomposition Analysis for a Two-Scale Linear Transport Problem”, *Math. Model Num. Anal.* **37** 869-892 (2003).

- [25] L.Gosse, G.Toscani, "An Asymptotic-preserving well-balanced scheme for the hyperbolic heat Equations", *C.R. Acad. Sc. Paris*, t. 334 (2002).
- [26] L.Gosse, G.Toscani, "Space Localization and well-balanced schemes for discrete kinetic models in diffusive regimes", *SIAM J on Scient and Stat.Comput.* **41** 641-658 (2003).
- [27] S.Jin, C.D Levermore, "Fully-Discrete Numerical Transfer in diffusive regimes", *Transport Theory and Statistical Physics*, **22**(6), 739-791 (1993).
- [28] A.Kavenoky, M.Lam.Hime, Z.Stankovski, "Improvements of the Integral Transport Theory Method", *Nat. Top. Mtg. Computational Methods in Nuclear Engineering, Williamsburg, Virginia USA*, April 23-25 (1979).
- [29] E.W.Larsen, G.C.Pomraning and V.C.Badham, "Asymptotic Analysis of Radiative Transfer Problems", *J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transfer*, **29**, 285 (1983).
- [30] E.W.Larsen, "The Asymptotic Diffusion Limit of Discretized Transport Problems", *Nuclear Science and Engineering*, **112**, 336-346 (1992).
- [31] E.W.Larsen, "On Numerical Solutions of Transport Problems in the Diffusion Limit", *Nuclear Science and Engineering*, **83**, 90 (1983).
- [32] E.W.Larsen and J.B.Keller, "Asymptotic Solution of Neutron Transport Problems for Small Mean Free Paths", *J.Math. Phys*, **15**, 75 (1974).
- [33] E.W.Larsen, J.E.Morel and W.F.Miller Jr, "Asymptotic Solutions of Numerical Transport Problems in Optically Thick, Diffusive Regimes", *J.Comput.Phys*, **69**, 283 (1987).
- [34] E.W.Larsen and J.E.Morel, "Asymptotic Solutions of Numerical Transport Problems in Optically Thick, Diffusive Regimes,II", *J.Comput.Phys*, **83**, 212 (1989).
- [35] K.D.Lathrop, "Ray effects in discrete ordinates equations", *Nuclear Science and Engineering*, **32**, 357 (1968).
- [36] P.Lesaint, "Sur la Résolution des systèmes du Premier Ordre par des Méthodes d'éléments finis", Thèse de Doctorat (1975).
- [37] T.A. Manteuffel and R.J. Ressel, "Least-squares finite element solution of the neutron transport equation in diffusive regimes", *SIAM J on Scient and Stat.Comput.* **35** 806-835 (1998).
- [38] J.E.Morel, T.Wareing, K.Smith, "A Linear Discontinuous Spatial Differencing Scheme for Sn Radiative Transfer Calculations", *J.Comput.Phys* **128** , 445-462 (1996).
- [39] J.E.Morel, "A Self-Adjoint Angular Flux Equation", *Nuclear Science and Engineering*, **132**, 312-325 (1999).
- [40] G.C.Pomraning, "The Equations of Radiation Hydrodynamics", Pergamon, Oxford (1973).
- [41] G.C.Pomraning, "Diffusive Limits for Linear Transport Equations", *Nuclear Science and Engineering*, **112**, 239-255 (1992).
- [42] G.Samba, "Limite asymptotique d'un schéma d'éléments finis discontinus en régime de diffusion", Rapport CEA-R-5960 (2001).
- [43] G.Samba, E.Varin, "Spherical Harmonics Finite Element Transport Equation Using a Least Square Approach", *Nuclear Science and Engineering*, **151**, 167-183 (2005).
- [44] G.Samba, "Discontinuous Finite Element for Solving the two-dimensional Neutron Transport equation on Lagrangian Meshes", *Nuclear Science and Engineering*, **92**, 197-203 (1986).
- [45] R.Sanchez, N.J.McCormick, "A Review of Neutron Transport approximations", *Nuclear Science and Engineering*, **80**, 481-535 (1982).
- [46] R.Sentis, "Analyse Asymptotique d'Equations de transport", Thèse (1981).
- [47] E.Varin, "Résolution de l'équation de Transport neutronique par une méthode de moindres carrés en Trois Dimensions", Thèse, Ecole Centrale des Arts et Manufactures (2001).
- [48] D.Verwaerde, "Résolution de l'Equation du transport par la méthode du Flux Pair", Rapport CEA-N-2352, (1983).