

AMS302 - Modélisation et simulation du transport de particules neutres

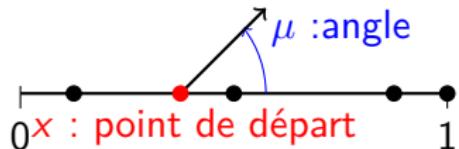
$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \varphi(x, \mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \varphi(x, \mu') \ d\mu' + S(x, \mu)$$

Etienne Peillon



Morgane Steins

Position du problème



Le neutron peut :

- Sortir du domaine
- Être absorbé : Σ_a
- Entrer en collision avec un noyau : Σ_s

Conditions aux limites

- Flux entrant nul (il faut une source) ou
- Flux entrant unitaire

Résolution : 2 méthodes

- Probabiliste, simulation des trajectoires
- Déterministe, vision moyenne

Méthode Monte-Carlo

Idées principales de la méthode Monte-Carlo

- ① simuler un grand nombre de particule obéissant aux lois du problème,
- ② résultats sont obtenus en effectuant une moyenne sur l'ensemble des particules.

Méthode Monte-Carlo

Idées principales de la méthode Monte-Carlo

- ① simuler un grand nombre de particule obéissant aux lois du problème,
- ② résultats sont obtenus en effectuant une moyenne sur l'ensemble des particules.

Tests effectués au cours de la vie d'une particule

- ① direction de la particule μ suivant la loi $\mathcal{U}[-1, 1]$
- ② distance parcourue suivant le loi de libre parcours
- ③ si la particule est encore dans la simulation ou non :
 - sortie du domaine $[0, 1]$,
 - scattering avec une probabilité $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$,
 - absorption avec une probabilité $1 - \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$.

Libre parcours

Quelle est la variable aléatoire décrivant la distance parcourue par un neutron depuis (x, μ) ?

Loi exponentielle car temps de survie, densité $f(x) = \frac{\Sigma_t}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} x}$
Pour la simuler on inverse la fonction de répartition $F(x)$:

$$F^{-1}(y) = -\frac{\mu}{\Sigma_t} \log(1 - y)$$

Matériaux homogène et *purement absorbant*

Cas sans scattering :

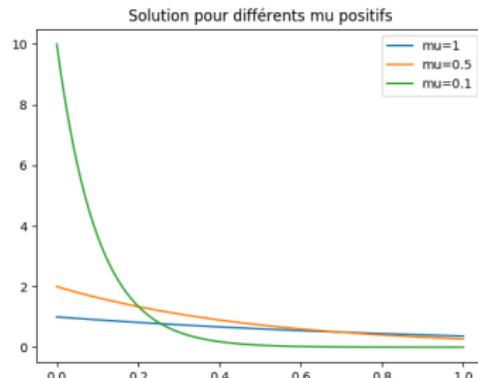
$$\Sigma_t = \Sigma_a \text{ et } \Sigma_S = 0$$

Source ponctuelle : $S = \delta_0$

Solution analytique :

$$\psi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t x}{\mu}}$$

Il suffit de tirer une particule pour un μ donné et on regarde où elle s'arrête.



Matériaux homogène et *purement absorbant*

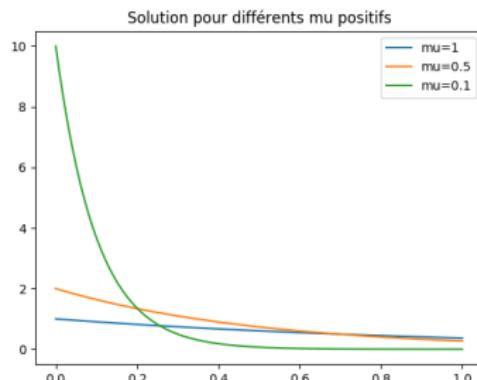
Cas sans scattering :

$$\Sigma_t = \Sigma_a \text{ et } \Sigma_S = 0$$

Source ponctuelle : $S = \delta_0$

Solution analytique :

$$\psi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t x}{\mu}}$$



Il suffit de tirer une particule pour un μ donné et on regarde où elle s'arrête.

⇒ Cas basique mais nécessaire pour la suite !

Source uniforme

Calcul de la solution analytique

$$S(x) = \int_0^1 S(t) \delta_t dt$$

Donc par linéarité on obtient la solution et l'estimateur

Monte-Carlo pour x_0 tiré selon une loi uniforme sur $[0,1]$, x_1 point d'absorption de la particule

$$\varphi(x, \mu_0) = \frac{\mathbb{P}(x_1 \in I_x | \mu_0)}{\Sigma_t dx}$$

Source uniforme

Calcul de la solution analytique

$$S(x) = \int_0^1 S(t) \delta_t dt$$

Donc par linéarité on obtient la solution et l'estimateur Monte-Carlo pour x_0 tiré selon une loi uniforme sur $[0,1]$, x_1 point d'absorption de la particule

$$\varphi(x, \mu_0) = \frac{\mathbb{P}(x_1 \in I_x | \mu_0)}{\sum_t dx}$$

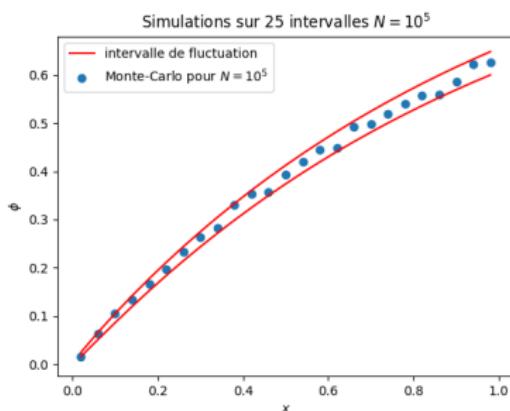


FIGURE – Simulation et intervalle de confiance

Matériaux diffusants

On a maintenant $\Sigma_a = 0$ et
 $\Sigma_s = \Sigma_t$.

Méthode des flux n fois
collisionnés pour calculer
l'approximation Monte-Carlo :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \varphi^0}{\partial x} + \Sigma_t \varphi^0 = S \\ \mu \frac{\partial \varphi^n}{\partial x} + \Sigma_t \varphi^n = S + \\ \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \varphi^{n-1}(\mu') d\mu' \quad \forall n \geq 1 \end{cases}$$

Matériaux diffusants

On a maintenant $\Sigma_a = 0$ et
 $\Sigma_s = \Sigma_t$.

Méthode des flux n fois
collisionnés pour calculer
l'approximation Monte-Carlo :

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \varphi^0}{\partial x} + \Sigma_t \varphi^0 = S \\ \mu \frac{\partial \varphi^n}{\partial x} + \Sigma_t \varphi^n = S + \\ \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \varphi^{n-1}(\mu') d\mu' \quad \forall n \geq 1 \end{cases}$$

Mise en place

- ① Tirer un *batch* de particules uniformément en (x, μ)
- ② Regarder la nouvelle position pour chaque particule encore dans le domaine
- ③ Tirer si absorption ou collision
- ④ Retour à (2) avec les particules collisionnées, tant qu'il en reste

Résultat numérique

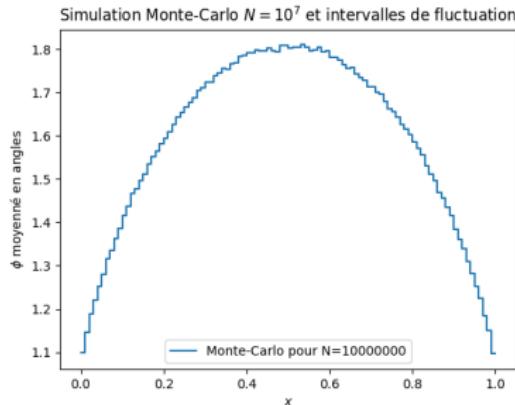


FIGURE – Simulation de $\tilde{\varphi}(x)$ pour $N = 10^7$ tirages

On ne connaît pas la solution analytique. Toutefois il faut une solution symétrique par rapport à $x = 1/2$.

Temps de calcul conséquent pour une précision moyenne : le déterministe fait-il mieux ?

Idée générale

Discrétisation angulaire

Méthode de collocation aux points de quadrature (μ_k) de poids $d\mu$

$$\begin{aligned} \mu_k \frac{\partial \varphi_k^n}{\partial x}(x) + \sum_t \varphi_k^n(x) = \\ \frac{\Sigma_s(x)}{2} \sum_{l=0}^{N_\mu-1} d\mu \varphi_l^{n-1}(x) + S(x) \end{aligned}$$

Idée générale

Discrétisation angulaire

Méthode de collocation aux points de quadrature (μ_k) de poids $d\mu$

$$\mu_k \frac{\partial \varphi_k^n}{\partial x}(x) + \sum_t \varphi_k^n(x) = \\ \frac{\Sigma_s(x)}{2} \sum_{l=0}^{N_\mu-1} d\mu \varphi_l^{n-1}(x) + S(x)$$

Discrétisation spatiale

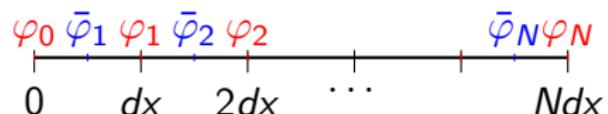


Schéma diamant

$$\varphi_i^+ = \frac{2dx \tilde{Q}^i + (2|\mu| - dx \Sigma_t^i) \varphi_i^-}{2|\mu| + dx \Sigma_t^i}$$

Matériaux homogènes et absorbants

Source ponctuelle

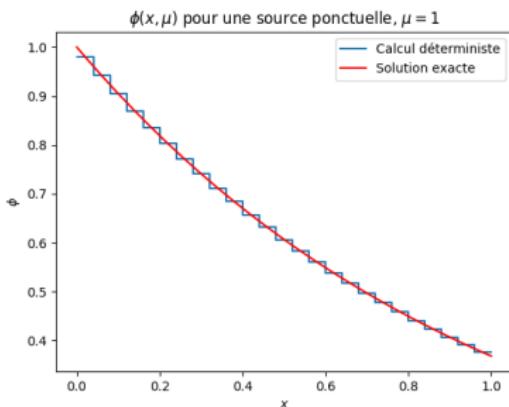


FIGURE – Calcul et solution théorique

Source uniforme

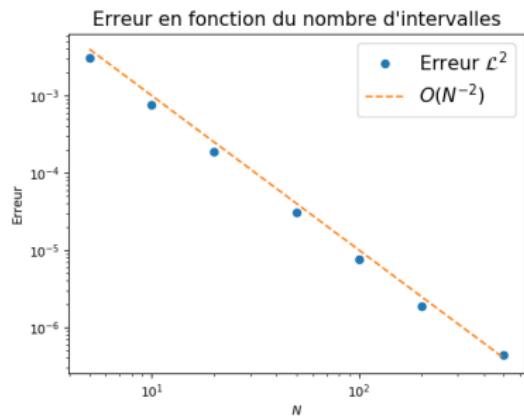


FIGURE – Erreur L^2 en fonction de N

Matériaux non homogènes

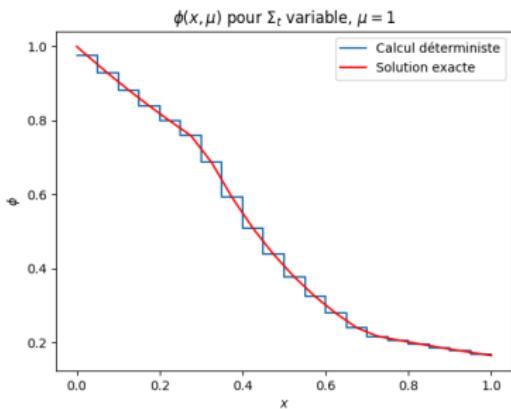


FIGURE – Comparaison de la solution théorique et calculée

Impact de la pente de la solution sur la qualité de l'approximation

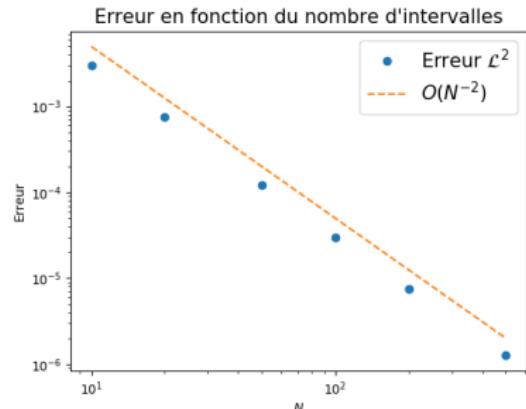


FIGURE – Erreur L^2 en fonction de N

Matériaux diffusants

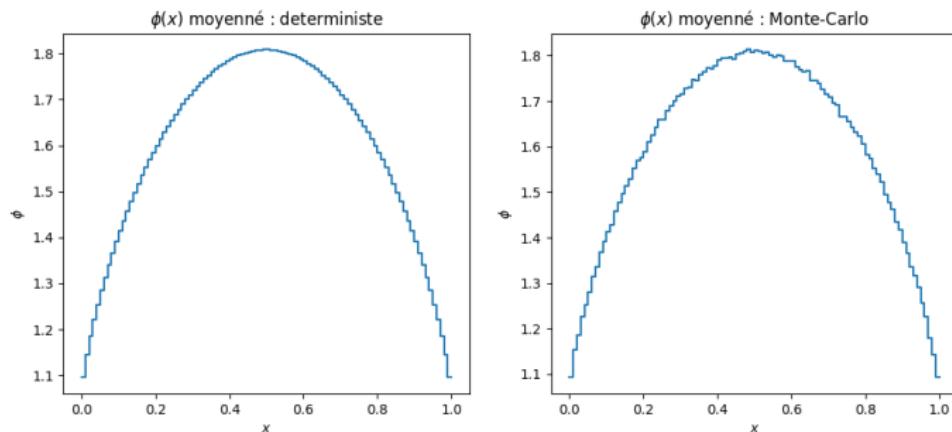


FIGURE – Comparaison Monte-Carlo vs déterministe

Le déterministe fait bien plus propre en plus rapide : 0.2s vs 3s.

Limite de diffusion

- $\Sigma_a = 0, \Sigma_s = \Sigma_t$: Pas d'absorption
- $\Sigma_t = \frac{\sigma_t}{\varepsilon}, Q = \varepsilon$: très petite source mais beaucoup de collisions

Limite de diffusion

- $\Sigma_a = 0, \Sigma_s = \Sigma_t$: Pas d'absorption
- $\Sigma_t = \frac{\sigma_t}{\varepsilon}, Q = \varepsilon$: très petite source mais beaucoup de collisions

Équation en limite de diffusion

Avec $\Sigma_t = 1$

$$\frac{-1}{3} \tilde{\varphi}_{\varepsilon=0}(x)'' = 1 \quad (1)$$

Soit avec les conditions aux limites de Dirichlet homogène :

$$\tilde{\varphi}_{\varepsilon=0}(x) = \frac{3}{2}x(1-x)$$

Résultats numériques

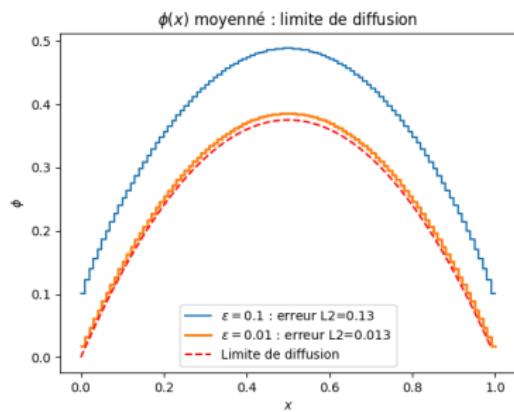


FIGURE – Solution pour différents ε

Résultats numériques

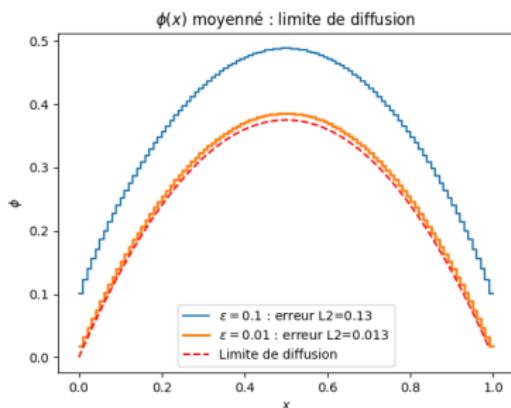


FIGURE – Solution pour différents ϵ

Nombre d'itérations nécessaires à $\eta = 10^{-7}$:

ϵ	1	0.1	0.01
Itérations	32	505	25243
Tps exec	0.09s	1.18s	1m

→ Impossible d'atteindre la limite de diffusion sans accélérer le code !

Méthode DSA

Au cours d'une itération, le schéma *Diamant* n'est pas suffisant.

$$\Rightarrow \tilde{\varphi}^{n+1} = \tilde{\varphi}^{n+1/2} + \delta_{\varphi}^{n+1}$$

Avec δ_{φ}^{n+1} solution de l'équation :

$$\underbrace{\mu \frac{\partial \delta_{\varphi}^{l+1}}{\partial x} + \sum_t \delta_{\varphi}^{l+1}}_{\text{Équation de transport}} = \underbrace{\frac{\Sigma_S}{2} \int_{-1}^1 \delta_{\varphi}^{l+1} d\mu' + \sum_S (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n)}_{\text{Terme de source}}$$

Méthode DSA

Approximation de l'équation en limite de diffusion

L'équation de transport en limite de diffusion peut être approximé par

$$-\frac{1}{3\Sigma_S} \frac{\partial^2 \tilde{\delta}_\varphi^{l+1}}{\partial x^2} + \Sigma_a \delta_\varphi^{l+1} = \Sigma_S (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n) \quad (2)$$

et des conditions de Dirichlet sur le bord : $\tilde{\delta}_\varphi^{l+1}(0) = \tilde{\delta}_\varphi^{l+1}(1) = 0$.

Méthode DSA

Approximation de l'équation en limite de diffusion

L'équation de transport en limite de diffusion peut être approximé par

$$-\frac{1}{3\Sigma_S} \frac{\partial^2 \tilde{\delta}_\varphi^{l+1}}{\partial x^2} + \Sigma_a \delta_\varphi^{l+1} = \Sigma_S (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n) \quad (2)$$

et des conditions de Dirichlet sur le bord : $\tilde{\delta}_\varphi^{l+1}(0) = \tilde{\delta}_\varphi^{l+1}(1) = 0$.

Itération de l'algorithme avec DSA

Itérations de l'algorithme en deux temps :

- ➊ Calcul d'une demi-itération par le schéma *diamant*
- ➋ Calcul de la seconde demi-itération en résolvant l'équation de diffusion par des éléments finis P^1

Résultats numériques

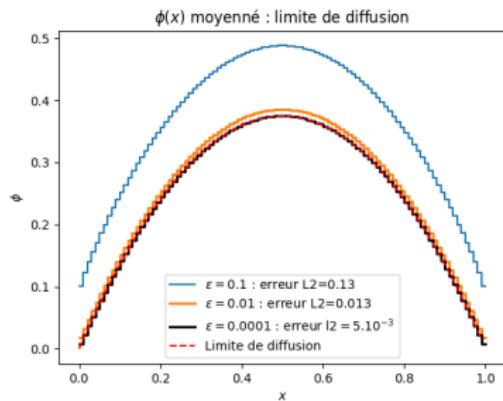


FIGURE – Solution pour différents ϵ

Résultats numériques

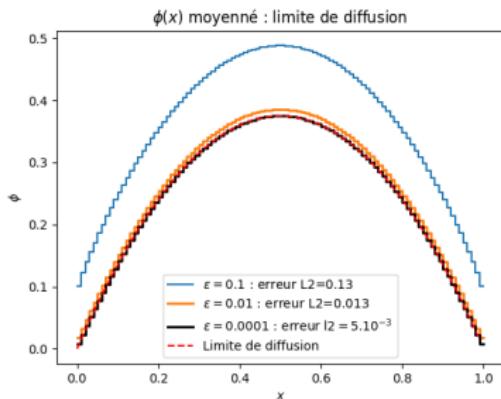


FIGURE – Solution pour différents ε

Nombre d'itérations avec
 $\eta = 10^{-7}$:

ε	1	0.1	0.01
Sans DSA	32	505	25243
Avec DSA	24	27	23

→ La limite de diffusion est atteinte !!

Conclusion

Monte-Carlo

- ✓ Vison proche de la physique microscopique
- ✓ Pas de discréétisation angulaire
- ✓ Personnel : Découvrir et implémenter une nouvelle méthode
- ✗ Demande beaucoup de particules car précision en $\frac{1}{\sqrt{N}}$
- ✗ Globalement lent

Déterministe

- ✗ Demande de discréétiser en angle ET en espace : beaucoup de degrés de liberté
- ✗ Personnel : Méthode plus classique en simulation numérique
- ✓ Beaucoup plus rapide que Monte-Carlo
- ✓ Possibilité d'accélération via la DSA en limite de diffusion