

## AMS302 - Modélisation et simulation du transport de particules neutres

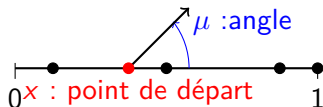
$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \varphi(x, \mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \varphi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu)$$

Etienne Peillon



Morgane Steins

# Position du problème



## Conditions aux limites

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

## Le neutron peut :

- Sortir du domaine
- Être absorbé :  $\Sigma_a$
- Entrer en collision avec un noyau :  $\Sigma_s$

## 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  $\mu$  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  $(x, \mu)$  ?

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 :

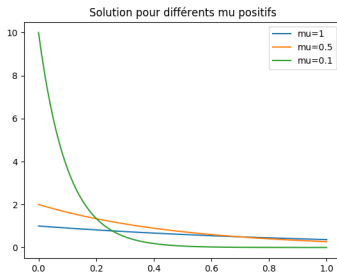
$$\Sigma_t = \Sigma_a \text{ et } \Sigma_s = 0$$

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  $\mu$  donné et on regarde où elle s'arrête.



# Matériaux homogène et *purement absorbant*

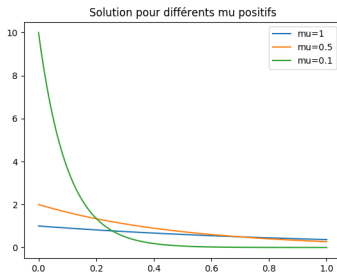
Cas sans scattering :

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

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  $\mu$  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

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



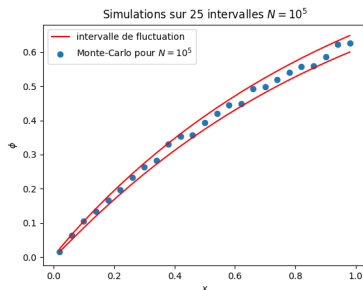
# Source uniforme

## 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

# Matériau diffusant

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

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

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

# Matériau diffusant

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

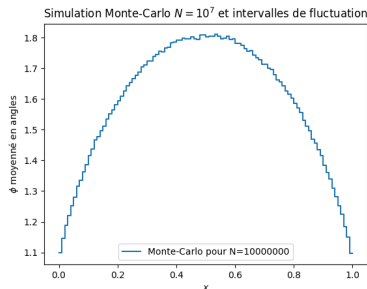
Méthode des flux  $n$  fois  
collisionnés pour calculer  
l'approximation Monte-Carlo :

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

## Mise en place

- ❶ Tirer un *batch* de particules uniformément en  $(x, \mu)$
- ❷ Regarder la nouvelle position pour chaque particule encore dans le domaine
- ❸ Tirer si absorption ou collision
- ❹ 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  $(\mu_k)$  de poids  $d\mu$

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

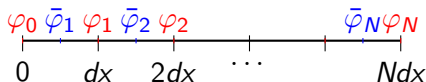
# Idée générale

## Discrétisation angulaire

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

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

## Discrétisation spatiale



## Schéma diamant

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

# Matériau homogène et absorbant

## Source ponctuelle

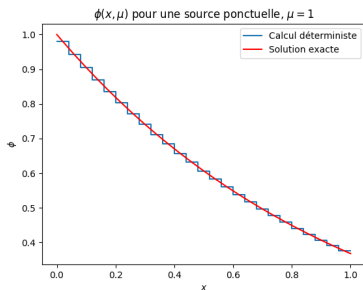


FIGURE – Calcul et solution théorique

## Source uniforme

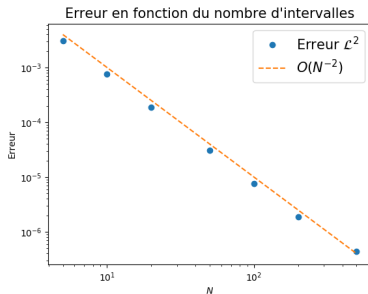


FIGURE – Erreur  $\mathcal{L}^2$  en fonction de  $N$

# Matériau non homogène

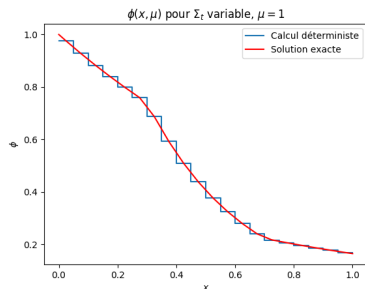


FIGURE – Comparaison de la solution théorique et calculée

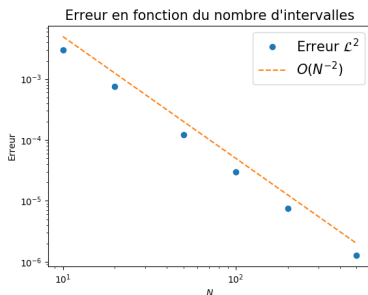


FIGURE – Erreur  $\mathcal{L}^2$  en fonction de  $N$

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



# Matériau diffusant

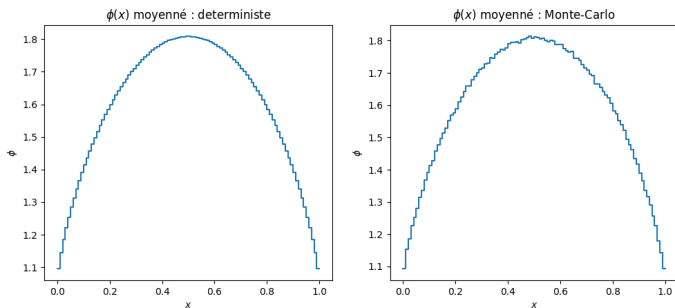


FIGURE – Comparaison Monte-Carlo vs déterministe

Le déterministe fait bien plus propre et 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

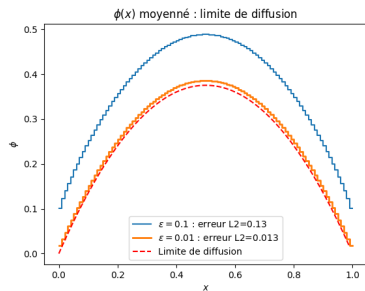


FIGURE – Solution pour différents  $\varepsilon$

# Résultats numériques

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

$\varepsilon$	1	0.1	0.01
<b>Itérations</b>	32	505	25243
<b>Tps exec</b>	0.09s	1.18s	1m

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

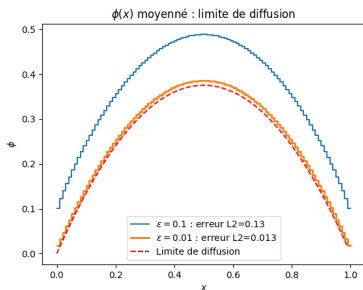


FIGURE – Solution pour différents  $\varepsilon$

# 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  $\delta_{\varphi}^{n+1}$  solution de l'équation :

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

# Méthode DSA

## Approximation de l'équation en limite de diffusion

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

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

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

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

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

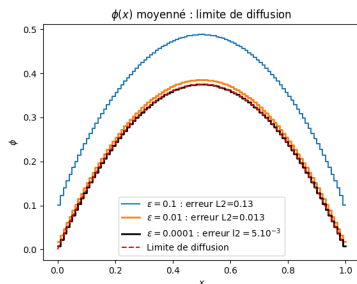


FIGURE – Solution pour différents  $\varepsilon$

# Résultats numériques

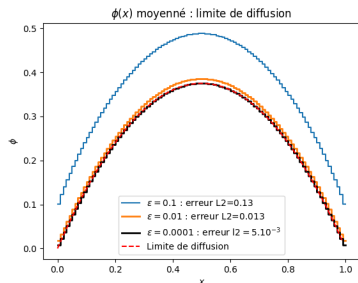


FIGURE – Solution pour différents  $\epsilon$

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

$\epsilon$	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 discrétisation angulaire
- ✓ Personnel : Découvrir et implémenter une nouvelle méthode
- ✗ Demande beaucoup de particules car précision en  $\frac{1}{\sqrt{N}}$
- ✗ Globalement lent

## Déterministe

- ✗ Demande de discrétiser 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