

TP1 AMS302 - Modélisation et Simulation du transport de particules neutres

Morgane STEINS et Etienne PEILLON

Version préliminaire pour le 14/10/2019

Nous cherchons à résoudre l'équation du transport neutronique en 1D sur l'intervalle $[0; 1]$ et pour tout $\mu \in [1; 1]$

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

1 Solveur Monte-Carlo

1.1 Préliminaires

Tout d'abord nous justifions la forme du libre parcours d'un neutron. Une section efficace macroscopique Σ caractérise la probabilité d'intéraction sur un petit intervalle δl

$$P_{\text{interaction}}([x; x + \delta l]) = \Sigma \delta l$$

Lorsque l'on projette cette distance sur l'axe des abscisses, on fait apparaître le cosinus de l'angle entre le vecteur directeur du déplacement et \vec{x} qui est défini par μ dans ce TP. D'où en 1D $P_{\text{interaction}}(x) = \frac{\Sigma}{\mu} \delta l$

On peut voir le libre parcours du neutron de deux manières différentes. La première est de considérer qu'il s'agit d'une sorte comme un "temps" de survie et utiliser le fait que ce genre de phénomène se modélise avec une loi exponentielle. On peut aussi utiliser faire une démonstration plus physique. On découpe l'intervalle $[0; 1]$ en N sous-intervalles de longueur dx et on considère partir du point 0. La probabilité d'interaction au point $x = idx$ s'obtient en considérant qu'il y a une interaction dans l'intervalle i mais pas dans les précédents ce qui donne

$$P_{\text{interaction}}(x \in [idx; (i+1)dx]) = \frac{\Sigma}{\mu} \left(1 - \frac{\Sigma}{\mu} dx\right)^i dx$$

Le passage à la limite $N \rightarrow \infty$ donne la densité de probabilité d'interagir au point x et pas avant, donc la densité de probabilité du libre parcours $f : f(x) = \frac{\Sigma}{\mu} e^{-\frac{\Sigma}{\mu} x}$

On vérifie immédiatement que $\int_0^\infty f(x) dx = 1$.

Pour échantillonner une variable aléatoire selon une loi, on peut inverser sa fonction de répartition si elle est connue. La fonction de répartition F du libre parcours moyen s'écrit

$$F(x) = \int_0^x f(t) dt = \int_0^x \frac{\Sigma}{\mu} e^{-\frac{\Sigma}{\mu} t} dt = 1 - e^{-\frac{\Sigma}{\mu} x}$$

Pour l'inverser on résout $y = F(x)$

$$y = 1 - e^{-\frac{\Sigma}{\mu} x} \iff x = -\frac{\mu}{\Sigma} \log(1 - y) = F^{-1}(y)$$

Pour tirer une variable aléatoire selon la loi F , on tire y selon une loi uniforme sur $[0; 1]$ et on calcule $F^{-1}(y)$.

La méthode Monte-Carlo consiste à simuler un grand nombre de trajectoires de neutrons et en déduire le flux neutronique par la loi des grands nombres.

1.2 Matériaux purement absorbants

1.2.1 Source ponctuelle

On commence avec le cas particulièrement simple $\Sigma_s = 0$. Il n'y a pas de scattering, les neutrons émis par une source avec une direction μ continuent simplement dans cette direction jusqu'à être absorbés.

Le cas le plus simple est celui d'une source ponctuelle en 0. L'équation devient

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \psi(x, \mu) = \delta_0(x) \quad (2)$$

avec pour condition aux limites un flux entrant nul, c'est à dire

$$\psi(0, \mu > 0) = \psi(1, \mu < 0) = 0$$

On note la solution de ce problème ψ car elle nous sera utile dans la suite pour des cas plus complexes. Il s'agit de la solution élémentaire.

Pour trouver la solution plaçons nous à $\mu > 0$ puisque pour $\mu < 0$ les neutrons émis en 0 sortent immédiatement du domaine, le flux est nul en tout point. On multiplie l'équation par $e^{\frac{\Sigma_t x}{\mu}}$ et on intègre entre 0 et x

$$\begin{aligned} \int_0^x \left(\mu \frac{\partial \psi}{\partial x}(t, \mu) + \Sigma_t \psi(t, \mu) \right) e^{\frac{\Sigma_t t}{\mu}} dt &= \int_0^x \delta_0(t) e^{\frac{\Sigma_t t}{\mu}} dt \\ \iff \mu \psi(x, \mu) e^{\frac{\Sigma_t x}{\mu}} &= \mu \psi(0, \mu) + 1 \\ \iff \psi(x, \mu) &= \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t x}{\mu}} \end{aligned}$$

Pour simuler ce flux neutronique avec un solveur Monte-Carlo sur un intervalle de largeur dx centré en x , l'idée de base est de tirer un grand nombre de particules dans le domaine et de compter celle qui s'arrêtent dans l'intervalle. Plus précisément, on considère une subdivision du domaine $[0, 1] = \bigcup_i [x_i, x_{i+1}]$ et on va compter le nombre de particules dans chaque sous-intervalle.

Pour simuler une particule, on choisit au début d'une itération une direction de départ μ_0 avec une loi uniforme $\mathcal{U}[-1, 1]$, puis on la fait avancer d'une distance l_0 suivant la loi de libre parcourt :

$$f_\psi(x_1) = \frac{\Sigma_t}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} x_1} = \Sigma_t \psi(x_1, \mu)$$

Une fois la particule arrêtée, soit elle est encore dans le domaine et on la compte, soit elle est sortie du domaine et on s'en occupe plus.

La probabilité pour un neutron de se trouver dans un intervalle $[a, b]$ est donc donnée par l'intégrale de φ sur cet intervalle à un facteur Σ_t près. En prenant un intervalle de longueur dx négligeable devant 1 (la taille de notre intervalle d'étude) on obtient

$$\psi(x, \mu) = \lim_{dx \rightarrow 0} \frac{\mathbb{P}(x_1 \in [x - dx/2, x + dx/2] | \mu)}{\Sigma_t dx} \quad (3)$$

Figures/Q3_fx_solution.png

FIGURE 1 – $\psi(x, \mu)$

Maintenant que nous avons un algorithme nous pouvons nous concentrer sur l'implémentation. Commençons par étudier l'allure de la solution ψ pour différentes valeurs de μ . Plus μ se rapproche de 0 plus sa densité est centrée sur 0. La limite pour $\mu = 0$ est le dirac en 0. En effet si le neutron part à la verticale il sera aussi absorbé à $x = 0$.

Il s'agit maintenant de comparer ses densités théoriques aux résultats de notre simulation. Une question pratique se pose : quelle valeur donner à dx ? En effet ce paramètre n'est en rien déterminé par le problème physique ou la méthode Monte-Carlo. Empiriquement, s'il est trop grand l'approximation de l'intégrale est fausse et s'il est trop petit il n'y aura aucune trajectoire qui mène à l'intervalle $[x - dx/2; x + dx/2]$. Nous voulons limiter le nombre d'intervalles de calcul pour représenter les solutions de manière visible et feront ici 25 intervalles.

Enfin, il faut une estimation de la fiabilité de nos résultats. Pour ce faire, on va procéder par intervalle de fluctuation à 95%. L'intervalle de fluctuation à 95% donne l'intervalle de valeurs dans lequel 95% de nos mesures doivent être, en postulant que la théorie (notre code est juste) est vrai.

Pour ce faire, on considère la variable aléatoire X nous donnant le nombre de particules dans l'intervalle $I_i = [x_i, x_{i+1}]$. Cette variable aléatoire suit une loi binomiale de paramètre N le nombre total de particules et $p_{i|\mu_0}$ la probabilité d'un succès, qui est donné par :

$$p_{i|\mu_0} = \int_{I_i} \frac{\psi(x, \mu_0)}{\int_0^1 \psi(y, \mu_0) dy} dx = \int_{I_i} \Sigma_S \psi(x, \mu_0) dx$$

Ainsi, l'espérance et la variance de X sont $\mathbb{E}(X) = Np_{i|\mu_0}$ et $\text{Var}(X) = Np_{i|\mu_0}(1 - p_{i|\mu_0})$. Ainsi, pour une seule particule, on peut faire les estimations suivantes :

$$\mathbb{E}_\varphi = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} \psi(x, \mu_0) dx = \frac{\mathbb{E}(X)}{N \Delta x}$$

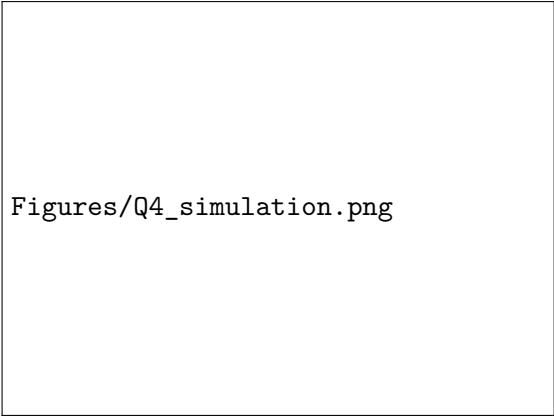
et

$$\text{Var}_\varphi = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} (\psi(x, \mu_0) - \mathbb{E}_\varphi)^2 dx = \frac{\text{Var}(X)}{N \Delta x}$$

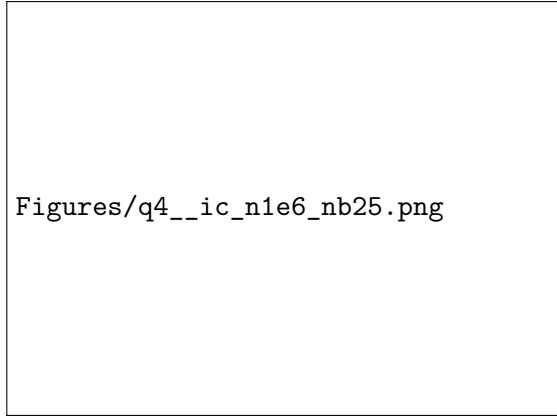
Cette estimation nous donne un intervalle asymptotique de confiance :

$$I_c^i = \left[\psi - 1.96 \sqrt{\frac{\text{Var}(X)}{N \Delta x}}, \psi + 1.96 \sqrt{\frac{\text{Var}(X)}{N \Delta x}} \right]$$

On a représenté sur la figure (2a) l'allure de la solution par simulation Monte-Carlo. Elle est constante par morceaux pour chaque intervalle d'approximation où la valeur moyenne est assimilée à l'intégrale.



Figures/Q4_simulation.png



Figures/q4_ic_n1e6_nb25.png

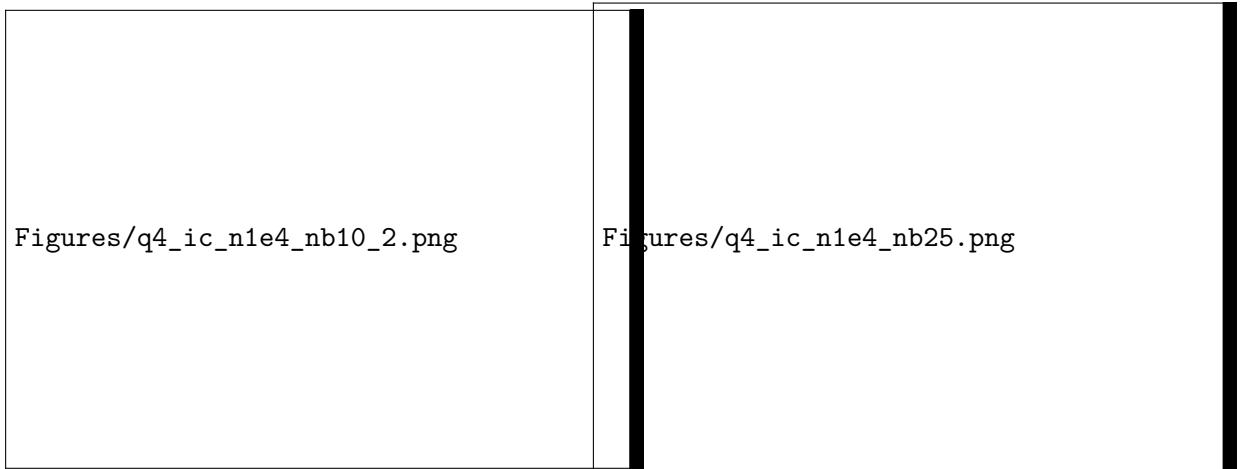
(a) Solution et simulations pour $\mu = 1$

(b) Intervalle de confiance $N = 10^6$

FIGURE 2 – Etude de la simulation de $\psi(x, \mu = 1)$

Pour la représentation des intervalles de confiance, on remarque que pour $N = 10^6$ simulations il est peu visible sur la figure puisque de largeur évoluant en l'inverse de \sqrt{N} , il est ici de largeur de l'ordre de $10^{-3}/25$ pour 25 intervalles. Les points donnent toutefois l'impression d'être compris dedans de manière très qualitative. Nous avons tracé l'intervalle de confiance à 95% pour une variable aléatoire suivant une loi gaussienne puisque par théorème central limite la moyenne empirique que nous calculons tend vers l'espérance de la valeur ponctuelle de φ .

Il est intéressant de regarder à N fixé comment évolue la précision de notre simulation en fonction du nombre d'intervalles. s



(a) 10 intervalles

(b) 25 intervalles

FIGURE 3 – Etude de la simulation de $\psi(x, \mu = 1)$

Sur la figure (3) on remarque que pour 25 intervalles les points sont beaucoup plus loin de la solution exacte. En effet pour un même nombre de tirages il y a plus d'intervalles donc moins de particules par intervalle. Ceci montre que si on veut une estimation plus précise spatialement (i.e. réduire la taille des intervalles), il faut augmenter le nombre de tirages. C'est pour cette raison que la taille de l'intervalle de fluctuation dépend de la taille des intervalles dx .

1.2.2 Source uniforme

On s'intéresse ensuite au cas d'une source S uniforme et unitaire sur tout l'intervalle $[0, 1]$. Comme on écrit $S(x) = \int_0^1 S(t)\delta_x(t)dt$ on peut réutiliser l'étude faite avec une source ponctuelle. Cette source peut maintenant être située en tout point de l'intervalle d'étude. Par translation on obtient la solution de l'équation pour une source ponctuelle en x_0 pour $\mu > 0$

$$\psi_{x_0}(x, \mu) = 1_{(x>x_0)} \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t(x-x_0)}{\mu}} \quad (4)$$

Par symétrie on trouve la solution pour $\mu < 0$ en changeant simplement l'indicatrice $1_{(x<x_0)}$.

Par linéarité la solution de notre équation pour $S = 1$ s'écrit

$$\varphi(x, \mu) = \int_0^1 \psi_{x_0}(x, \mu) dx_0$$

Dans notre démarche Monte-Carlo nous tirons maintenant x_0 le point de départ selon la loi de probabilité induite par la source. Comme la source est constante on tire x_0 selon une loi uniforme $\mathcal{U}[0, 1]$. On tire μ_0 comme précédemment. Pour connaître la densité $f_{\mu_0}(x_1)$ on utilise la formule de Bayes sur les densités conditionnelles

$$f(x_1|\mu_0) = \int_0^1 f_\psi(x_1|x_0, \mu_0) f_{\mu_0}(x_0) dx_0$$

$f_\psi(x_1|x_0, \mu_0)$ est donnée par la solution (4) qui est le libre parcours depuis x_0 à Σ_t près et $f_{\mu_0}(x_0)$ par la densité de la source, ici 1. On obtient la densité $f(x_1)$

$$f(x_1|\mu_0) = \Sigma_t \int_0^1 \psi_{x_0}(x, \mu) dx = \Sigma_t \varphi(x, \mu)$$

Pour obtenir la densité de neutrons totale en un point x indépendamment de leur direction μ , il faut considérer les probabilités conditionnelles selon μ également. Comme le tirage de μ est uniforme entre -1 et 1 , sa densité est $\frac{1}{2}$. On intègre sur μ pour obtenir la densité moyenne $\tilde{\varphi}(x) = \int_{-1}^1 \varphi(x, \mu) d\mu$. On a alors

$$f(x_1) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(x_1|\mu_0) d\mu_0 = \frac{\Sigma_t}{2} \int_{-1}^1 \varphi(x_1, \mu) d\mu = \Sigma_t \tilde{\varphi}(x)$$

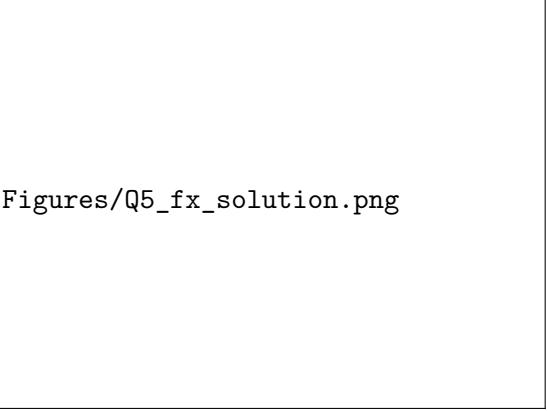
Nous sommes donc capable d'approximer φ mais aussi $\tilde{\varphi}$ par méthode Monte-Carlo

$$\varphi(x, \mu_0) = \frac{\mathbb{P}(x_1 \in [x - dx/2, x + dx/2] | \mu_0)}{\Sigma_t dx} \quad \tilde{\varphi}(x) = \frac{\mathbb{P}(x_1 \in [x - dx/2, x + dx/2])}{\Sigma_t dx} \quad (5)$$

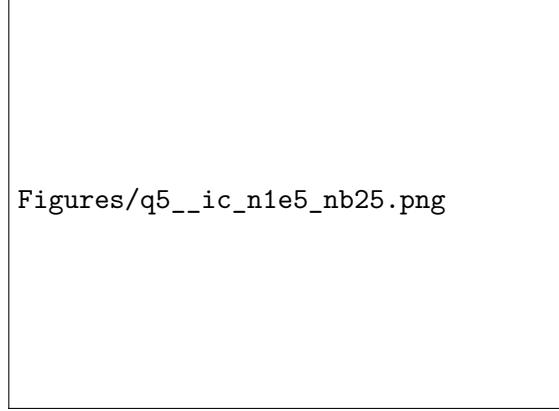
Comme pour le cas de la source ponctuelle on regarde d'abord l'allure de la solution en fonction de $\mu > 0$ (figure (5)). Pour $\mu < 0$ le cas est symétrique par rapport au centre de l'intervalle.

La solution est toujours nulle en $x = 0$ comme imposé par la condition de flux entrant nul. La limite quand $\mu \rightarrow 0$ est un flux constant égal à 1 sur tout l'intervalle et nul en 0. Encore une fois la situation est symétrique et $\mu < 0$.

On regarde ensuite les résultats de la simulation Monte-Carlo et encore une fois l'intervalle de confiance (4b). Comme l'intervalle de confiance fait apparaître l'estimation de $\varphi(x, \mu)$, quand cette valeur est petite l'intervalle de confiance l'est également. C'est ce qu'on remarque sur cette figure : pour x proche de 1 l'intervalle de confiance est plus large et la variance des points plus grande.



(a) Allures de $\varphi(x, \mu)$



(b) Simulation et intervalle de confiance

FIGURE 4 – Etude de la simulation de $\psi(x, \mu = 1)$

1.2.3 Matériaux non homogènes avec source ponctuelle

On peut se poser la question de ce qui se passe dans le cas d'un matériau où Σ_t est une fonction de x . On se place dans le cas d'une source homogène avec un matériau de Σ_t

$$\Sigma_t(x) = \begin{cases} 1 & x \in S_1 = [0; 0.3], \\ 3 & x \in S_2 = [0.3; 0.7], \\ 1 & x \in S_3 = [0.7; 1], \end{cases}$$

et une source ponctuelle en 0.

On commence par résoudre cette équation sur $[0; 0.3]$ avec $\mu > 0$ puisque il n'y a pas de source autre qu'en 0. La solution est donnée par le calcul de la partie précédente

$$\varphi_1(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{x}{\mu}} \quad \forall x \in [0; 0.3] \quad (\text{S1})$$

Pour l'intervalle $[0.3; 0.7]$ on peut considérer une source ponctuelle en $x = 0.3$

$$S_2(x, \mu) = \varphi_1(0.3, \mu) \delta_{0.3}(x) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{0.3}{\mu}} \delta_{0.3}(x)$$

On résout le problème exactement de la même façon et on obtient

$$\varphi_2(x, \mu) = S_2(0.3, \mu) e^{-\frac{3(x-0.3)}{\mu}} = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{0.3}{\mu}} e^{-\frac{3(x-0.3)}{\mu}} \quad (\text{S2})$$

Le même raisonnement donne

$$\varphi_3(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{0.3}{\mu}} e^{-\frac{3(0.7-0.3)}{\mu}} e^{-\frac{x-0.7}{\mu}} \quad (\text{S3})$$

On est donc capable d'écrire la solution théorique dont on voit deux allures pour deux valeurs de μ différentes sur la figure (5).

Pour calculer la solution avec une méthode Monte-Carlo il faut mettre en oeuvre la méthode de Woodcock qui permet de prendre en compte les variations de Σ_t .

Figures/q6_sol_theorique.png

FIGURE 5 – $\varphi(x, \mu)$ théorique dans le cas Σ_t non homogène

1.3 Matériaux diffusants

1.3.1 Calcul de l'estimateur de φ

Nous abandonnons maintenant l'hypothèse d'un matériau purement absorbant et considérons les collisions ($\Sigma_s \neq 0$). Nous utilisons la suite des flux n fois collisionnés φ^n et les différences entre deux itérations $\epsilon^n = \varphi^n - \varphi^{n-1}$ avec $\epsilon^0 = \varphi^0$. Les flux collisionnés vérifient le système

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \varphi^0}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \varphi^0(x, \mu) = S(x, \mu) \\ \mu \frac{\partial \varphi^n}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \varphi^n(x, \mu) = S(x, \mu) + \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \varphi^{n-1}(x, \mu') d\mu' \quad \forall n \geq 1 \end{cases} \quad (6)$$

et les ϵ^n le même système sans source.

Pour simplifier l'étude on considère ici que l'absorption est négligeable, i.e. $\Sigma_t = \Sigma_s$ et $\Sigma_a = 0$.

Nous n'allons ici considérer que le flux moyen en μ , fonction uniquement de l'espace $\tilde{\varphi}(x)$. Le flux non collisionné $\tilde{\varphi}^0$ est donné par la partie précédente équation (5).

Nous cherchons maintenant à estimer $\tilde{\varphi}^1$, c'est à dire trouver la densité de probabilité d'un point x_2 après une collision et 2 libres parcours. ϵ^1 est solution de

$$\mu \frac{\partial \epsilon^1}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \epsilon^1(x, \mu) = \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \varphi^0(x, \mu') d\mu' = \Sigma_s \tilde{\varphi}^0(x)$$

On utilise encore une fois le fait que $\tilde{\varphi}^0(x) = \int_0^1 \tilde{\varphi}^0(t) \delta_x(t) dt$ pour obtenir par linéarité

$$\epsilon^1(x, \mu) = \Sigma_s \int_0^1 \tilde{\varphi}^0(x_1, \mu) \psi_{x_1}(x, \mu) dx_1 \quad (7)$$

Pour mieux différencier les densités, on ajoute les indices x et μ pour indiquer sur quelle variable porte la densité f .

On utilise la formule de Bayes avec les densités qui donne (en notant $f(0 \rightarrow 1)$ la densité

de probabilité de continuer entre l'état 0 et l'état 1)

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_x(x_2) &= f(0 \rightarrow 1) \int_{-1}^1 f_\mu(\mu_1) \int_0^1 f_x(x_2|x_1, \mu_1) \tilde{f}_x(x_1) dx_1 d\mu_1 \\
&= \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \int_0^1 f_\psi(x_2|x_1, \mu_1) \times \frac{\Sigma_t}{2} \tilde{\varphi}^0(x_1) dx_1 d\mu_1 \\
&= \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \int_0^1 \Sigma_t \psi_{x_1}(x_2, \mu_1) \tilde{\varphi}^0(x_1) dx_1 d\mu_1 \\
&= \frac{\Sigma_t}{2} \int_{-1}^1 \epsilon^1(x_2, \mu_1) \quad \text{par l'équation (7)} \\
&= \Sigma_t \tilde{\epsilon}^1(x_2)
\end{aligned}$$

Comme $\tilde{\epsilon}^1 = \tilde{\varphi}^1 - \tilde{\varphi}^0$, on peut directement calculer $\tilde{\varphi}^1$ dès qu'on a tiré les trajectoires. On itère pour tout n et le calcul est identique puisque il s'agit d'un processus Markovien, l'état n ne dépend que de l'état $n - 1$. On a

$$\tilde{\varphi}^n = \tilde{\epsilon}^n + \tilde{\varphi}^{n-1} = \sum_{k=1}^n \tilde{\epsilon}^k + \tilde{\varphi}^0$$

On peut donc calculer tous les flux collisionnés. Comme la solution de l'équation de transport neutronique est donnée par la limite des flux quand $n \rightarrow \infty$ on a

$$\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{\epsilon}^k + \tilde{\varphi}^0$$

Dans la pratique on procède par *batch* de particules. On choisit un nombre N de particules au départ. On détermine le flux non collisionné issu, puis le flux une fois collisionné des particules encore dans l'intervalle et on ajoute cette contribution à celle du flux non collisionné.

Pour ce faire, pour chaque particule, on calcule une nouvelle position. Une fois la particule arrêtée et si elle est encore dans le domaine $[0, 1]$, on regarde si elle s'est arrêté à cause d'une absorption ou d'une collision en effectuant un test de Bernoulli de probabilité $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$. Pour simuler cette loi, on tire un nombre aléatoire b dans $[0, 1]$ et si $b > \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$, la particule est absorbée et sinon elle reste dans la simulation.

Tant qu'il reste des particules (non absorbées ou sorties) on continue les itérations et on ajoute les contributions à ce qui précède. Une fois qu'il n'y a plus de particules on a calculé $\tilde{\varphi}(x)$.

En intégrant sur un petit intervalle autour de x on obtient une formule explicite pour calculer $\tilde{\varphi}$ avec une simulation Monte-Carlo

$$\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbb{P}(x_{k+1} \in [x; x + dx])}{\Sigma_t dx} \tag{8}$$

L'indice $k + 1$ vient du fait que l'on note x_k la position de départ de l'itération k et x_{k+1} sa position d'arrivée.

1.3.2 Résultats

Contrairement aux cas précédents on ne connaît pas la solution analytique, mais on sait que la solution doit être symétrique par rapport à $x = 1/2$. Il serait possible de tester que notre code fonctionne bien en prenant une solution manufacturée. Il faut alors déterminer la source à l'origine de ce flux neutronique puis tirer les particules de départ selon la densité de

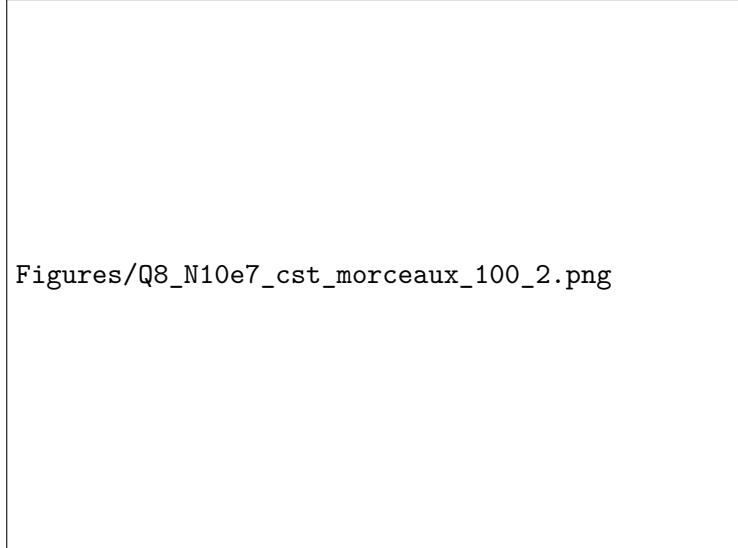


FIGURE 6 – Simulation de $\varphi(x, \mu)$ pour $N = 10^7$ tirages

cette source et enfin comparer les résultats. Nous avons cependant manqué de temps pour ce rapport préliminaire pour mettre en oeuvre cette méthode.

La figure (6) montre la simulation pour $N = 10^7$ tirages et 100 intervalles. Elle est bien symétrique et régulière (sans sursaut lié à un point aberrant).

1.3.3 Conclusion Monte-Carlo

La méthode Monte-Carlo permet de calculer φ et $\tilde{\varphi}$ dans plusieurs cas 1D. Cependant la taille de l'intervalle de confiance réduisant en $\frac{1}{\sqrt{N}}$, le temps de calcul nécessaire pour une précision donnée augmente au carré du nombre de particules. Ainsi il nous a été difficile sans paralléliser le calcul de faire plus de 10^8 particules dans des temps de calculs raisonnables.

Ceci justifie de tenter à une approche itérative pour voir si elle réduirait les temps de calculs à précision fixée.

2 Solveur itératif

Nous allons procéder à la mise en place de la méthode itérative dans le même ordre que la méthode Monte-Carlo ce qui permet de construire le solveur brique par brique et de comparer chaque étape aux résultats Monte-Carlo.

2.1 Matériau purement absorbant

2.1.1 Source ponctuelle = courant entrant unitaire

On commence par le cas d'une source ponctuelle, qui équivaut au cas sans source mais avec un courant entrant unitaire. Pour μ positif, la solution est donnée par

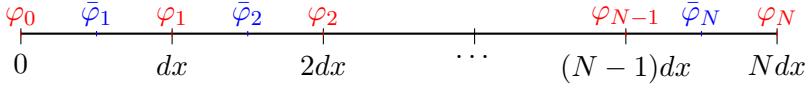
$$\psi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t x}{\mu}}$$

Dans le cas μ négatif, la solution est $\psi(x, \mu) = \psi(1 - x, -\mu)$.

Dans ce cas précis on peut calculer ψ aussi bien que $\tilde{\psi} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu) d\mu$. Il n'y a pas besoin de discréteriser l'espace de μ pour calculer ces deux fonctions. Comme dans la suite nous

sommes intéressés par le flux moyen en angle, nous allons directement nous concentrer sur $\tilde{\psi}$ ici.

Pour résoudre le problème spatial général en φ qui est $\mu\varphi'(x) + \Sigma_t\varphi(x) = Q(x)$, on utilise un schéma de type volumes finis. On découpe l'intervalle $[0, 1]$ en N intervalles M_i de taille régulière $dx = 1/N$. φ est définie sur les extrémités des intervalles et $\bar{\varphi}$ comme la moyenne spatiale de φ sur chacun de ces intervalles (cf figure). On considère que Σ_t et Q sont constants sur chaque maille M_i et on note respectivement Σ_t^i et \tilde{Q}^i leurs valeurs sur l'intervalle M_i .



On intègre l'équation spatiale sur chaque maille ce qui donne N relations

$$\mu(\varphi_{i+1} - \varphi_i) + \Sigma_t^i dx \bar{\varphi}_i = \tilde{Q}^i \quad (9)$$

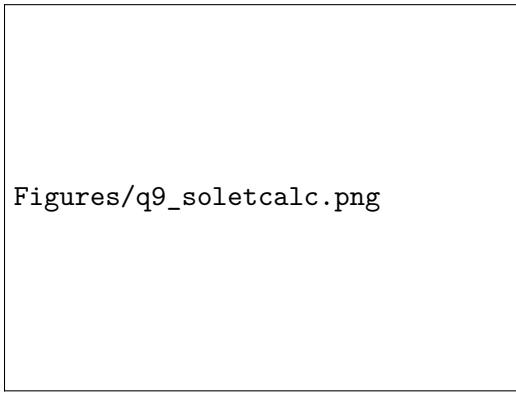
Pour avoir le bon nombre de relations ($2N$) comme le nombre de degrés de liberté inconnus (les conditions de flux entrant imposent une des valeurs φ_0 ou φ_N selon le signe de μ), on ajoute une relation de fermeture. Cette relation impose que φ soit affine par morceaux

$$\bar{\varphi}_i = \frac{1}{2}(\varphi_{i+1} - \varphi_i) \quad (10)$$

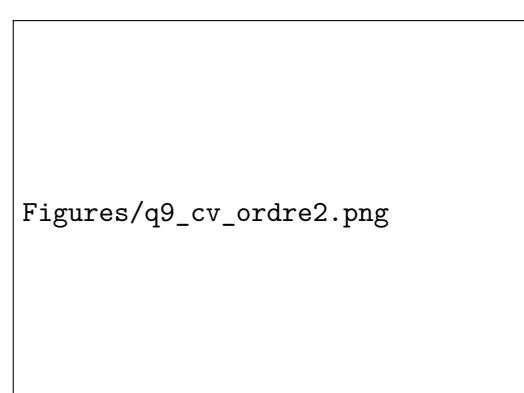
On peut donc transformer l'équation (9) en une équation contenant uniquement φ . Comme le sens de propagation change en fonction de μ , on veut une expression de φ_i en fonction de son antécédent, que ce soit φ_{i-1} ou φ_{i+1} . On note φ_i^+ le terme qu'on cherche à calculer et φ_i^- le terme précédent selon le sens de propagation.

$$\varphi_i^+ = \frac{2dx\tilde{Q}^i + (2|\mu| - dx\Sigma_t^i)\varphi_i^-}{2|\mu| + dx\Sigma_t^i} \quad (11)$$

On en déduit ensuite $\bar{\varphi}_i$ grâce à la relation de fermeture. C'est la grandeur à laquelle nous allons nous intéresser car c'est l'unique que l'on peut calculer quand il y a de la dispersion, et nous voulons un solveur général pour tous les cas physiques. Ce que nous appelons donc la *solution calculée* i.e. la sortie de notre algorithme est l'approximation constante par morceaux $\varphi(x \in [(i-1)dx; idx], \mu \text{ fixé}) = \bar{\varphi}_i$.



(a) Comparaison de la solution théorique et calculée



(b) Erreur \mathcal{L}^2 en fonction de N

FIGURE 7 – Etude de la simulation de $\bar{\psi}(x)$, source ponctuelle en 0

En fixant μ , on utilise ce processus une unique fois et on obtient ψ_t pour tous les intervalles souhaités. On peut comparer visuellement la solution obtenue avec la solution théorique avant

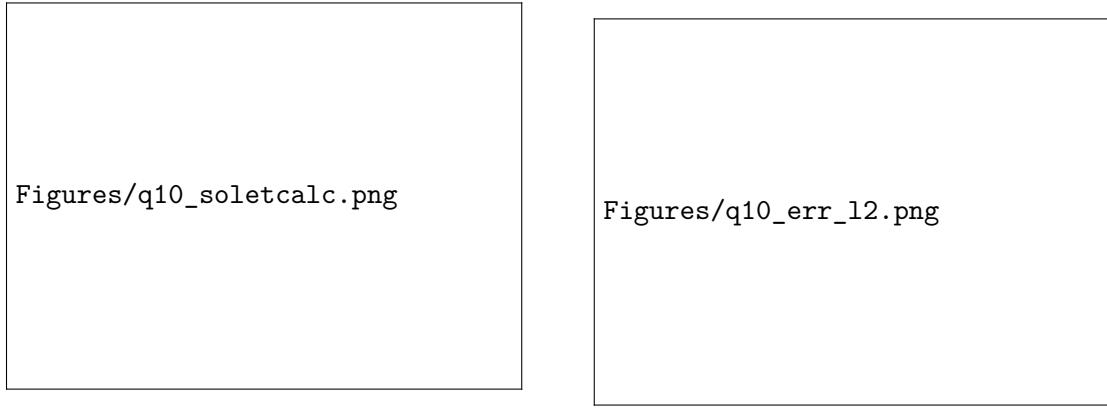
de regarder la convergence de l'erreur en faisant diminuer le pas de discréétisation dx . En effet on commet une erreur en assimilant φ à une fonction affine par morceaux, erreur qui diminue cependant avec dx la largeur des intervalles comme sur la figure (7b). La vitesse de convergence est de 2 ce qui est une vitesse satisfaisante pour une méthode numérique.

2.1.2 Source uniforme

On peut utiliser exactement la même méthode pour trouver la solution dans le cas d'une source homogène. On rappelle le résultat de la partie 1 : dans ces conditions la solution vaut

$$\phi(x, \mu) = \begin{cases} \frac{1}{\mu}(1 - e^{-\Sigma_t x / \mu}) & \text{si } \mu > 0 \\ \frac{1}{\mu}(1 - e^{-\Sigma_t(x-1) / \mu}) & \text{si } \mu < 0 \end{cases}$$

On peut faire les mêmes analyses que dans le cas de la source ponctuelle. On affiche la solution obtenue pour $N_x = 25$ et l'erreur en fonction de N_x sur les graphes de la figure (8).



(a) Comparaison de la solution théorique et calculée

(b) Erreur L^2 en fonction de N

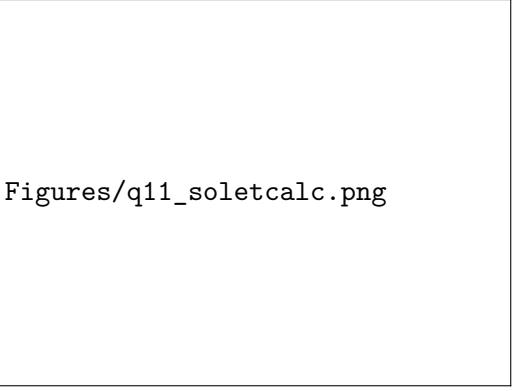
FIGURE 8 – Etude de la simulation de $\tilde{\varphi}(x)$ source uniforme

2.1.3 Matériaux non homogènes

On reprend le cas du matériau non homogène de la partie 1.2.3. La solution théorique est toujours la même mais cette fois-ci nous n'avons plus besoin de modifier le solveur pour prendre en compte les variations de Σ_t puisque l'équation (11) est déjà écrite avec Σ_t^i .

Il faut bien attention à fournir au solveur une liste de Σ_t^i de la taille du nombre de mailles et à couper le domaine de façon à conserver Σ_t^i constant par maille. Comme ici Σ_t change de valeur en 0.3 et 0.7, il suffit de prendre un nombre de mailles multiple de 10 en x pour être certain d'éviter tout problème avec la définition des Σ_t^i .

Voici les résultats obtenus sur la figure (9). On peut remarquer que dans l'intervalle $[0.3; 0.7]$ l'erreur commise par l'approximation constante par morceaux est plus grande. Ceci est lié à la pente de la solution qui augmente avec Σ_t . Ceci se ressent dans l'erreur \mathcal{L} , qui converge toujours en $O(dx^2)$ mais avec un facteur 10 par rapport aux cas précédents. Si on étudie les cas précédents à $\Sigma_t = 3$ constant ou avec $\mu < 1$ on trouve des résultats similaires.



(a) Comparaison de la solution théorique et calculée



Figures/q11_err_12.png

(b) Erreur \mathcal{L}^2 en fonction de N

FIGURE 9 – Etude de la simulation de $\tilde{\varphi}(x)$ avec Σ_t non homogène

2.2 Matériaux diffusants

On se place maintenant dans le cas d'un matériau diffusant. Nous ne pouvons plus maintenant nous placer à μ fixé et regarder $\varphi(x, \mu)$ mais seulement la valeur moyennée en angle $\tilde{\varphi}(x)$. Il faut donc discréteriser l'espace $[-1; 1]$ des angles possibles et sommer les contributions de chaque arc de cercle pour obtenir $\tilde{\varphi}(x)$.

On met en place la méthode des ordonnées discrète qui est une méthode de collocation : on choisit un nombre fini de directions N_μ pour lesquelles l'équation (1) sera vérifiée. L'intégrale en angle est alors approchée par une formule de quadrature. Nous choisissons ici pour méthode de quadrature la méthode des rectangles qui nous permet de répartir les μ_k de manière homogène sur tout l'intervalle $[-1; 1]$. On a alors $\mu_k = (k + 1/2)d\mu - 1$ où $d\mu = \frac{2}{N_\mu}$ et $k \in \{0, \dots, N_\mu - 1\}$. Le poids associé à chaque μ_k est le même : $d\mu$.

On a alors $\forall 0 \leq k \leq N_\mu - 1$

$$\mu_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x}(x) + \Sigma_t \varphi_k(x) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \sum_{l=0}^{N_\mu-1} \frac{d\mu}{2} \varphi_l(x) + S(x) \quad (12)$$

Pour découpler les différents termes d'angles on utilise l'itération sur les sources qui donne le problème : $\forall n \geq 1, \forall 0 \leq k \leq N_\mu - 1$

$$\mu_k \frac{\partial \varphi_k^n}{\partial x}(x) + \Sigma_t \varphi_k^n(x) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \sum_{l=0}^{N_\mu-1} \frac{d\mu}{2} \varphi_l^{n-1}(x) + S(x) \quad (13)$$

Il faut donc à chaque étape résoudre un problème spatial comme précédemment avec pour source $Q(x) = S(x) + \sum_{l=0}^{N_\mu-1} \frac{d\mu}{2} \varphi_l^{n-1}(x)$. On utilise donc le solveur précédent, englobé dans une double boucle, en n pour l'itération sur les sources et en k pour tous les angles.

On a démontré que la différence entre deux itérations en n , $e^n = \varphi^n - \varphi^{n-1}$ converge vers 0 en norme \mathcal{L}^1 en l'injectant dans l'équation. Donc φ^n est une suite de Cauchy dans \mathcal{L}^1 qui est un Banach : elle converge. On utilise donc un critère de Cauchy pour arrêter l'algorithme d'itération sur les sources. On se fixe une erreur maximale η et on continue les itérations en n tant que $\|\varphi^n - \varphi^{n-1}\| > \eta$.

Dans ce cas-ci nous n'avons pas la solution analytique de l'équation. Une méthode de vérification est toutefois de comparer qualitativement avec la solution obtenue dans le cas Monte-Carlo. Parler de convergence d'une solution vers l'autre alors qu'elles sont toutes les deux approchées n'est pas envisagé. La figure (??) montre les résultats par simulation Monte-Carlo et déterministe. Nous avons fixé $\eta = 10^{-9}$ et l'algorithme avait convergé en 46 itérations.

La courbe déterministe est bien plus lisse que la courbe Monte-Carlo et obtenue en un temps bien inférieur : 3 secondes pour Monte-Carlo et 0.2 secondes pour le code déterministe.

Pour étudier l'impact des paramètres du calcul déterministe on peut se donner un cas très raffiné (N_x et N_μ très grands), prendre cette simulation comme référence et regarder l'erreur commise par rapport à cette référence pour des paramètres bien plus petits. Pour faire varier N_x cela demande d'interpoler notre solution moins raffinée sur le maillage plus raffiné. Comme nous avons déjà regardé l'impact de N_x sur les simulations nous préférons nous concentrer sur N_μ .

On prend $N_\mu = 10^4$ de référence et on regarde pour des N_μ au moins 10 fois plus petits. On remarque d'abord que le nombre d'itérations reste globalement le même. On a ensuite une convergence de cette pseudo-erreur comme visible sur la figure (10). Il nous est difficile d'expliquer la pente de $\frac{3}{2}$.

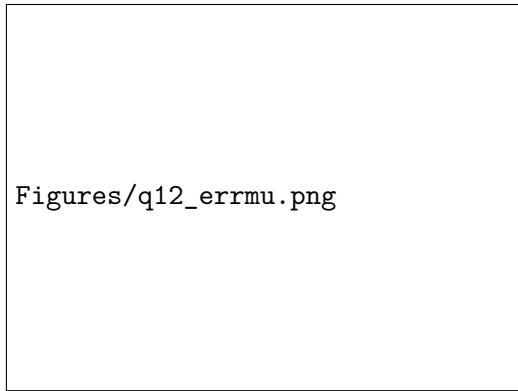


FIGURE 10 – Erreur en fonction de N_μ par rapport à la solution à $N_\mu = 10^4$

2.3 Limite de diffusion

Nous avons considéré deux cas : $\Sigma_s = 0$ et $\Sigma_a = 0$. On se place maintenant dans un cas intermédiaire où aucun des deux coefficients n'est nul et on regarde la limite de diffusion pour ϵ tendant vers 0.

$$\Sigma_a(x) = \epsilon \sigma_a, \quad \Sigma_t(x) = \sigma_t/\epsilon, \quad \Sigma_s = \Sigma_t - \Sigma_a, \quad S(x) = \epsilon$$

On s'intéresse à $\tilde{\varphi}_\epsilon(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \varphi_\epsilon(x\mu) d\mu$ le flux moyenné en angle pour un certain ϵ . On cherche l'équation vérifiée par cette grandeur. Pour ce faire on postule la décomposition de $\varphi_\epsilon = \sum_{n=0}^{+\infty} \varphi_\epsilon^n \epsilon^n$. On injecte cette forme dans l'équation du transport neutronique et on regarde chaque équation pour chaque puissance de ϵ^n . On obtient pour les 4 premières puissances de ϵ :

$$\varphi_\epsilon^0 = \tilde{\varphi}_\epsilon^0 \quad (\epsilon^{-1})$$

$$\mu \frac{\partial \varphi_\epsilon^0}{\partial x} + \sigma_t \varphi_\epsilon^1 = \sigma_t \tilde{\varphi}_\epsilon^1 \quad (\epsilon^0)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi_\epsilon^1}{\partial x} + \sigma_t \varphi_\epsilon^2 = \sigma_t \tilde{\varphi}_\epsilon^2 - \sigma_a \tilde{\varphi}_\epsilon^0 + 1 \quad (\epsilon^1)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi_\epsilon^2}{\partial x} + \sigma_t \varphi_\epsilon^3 = \sigma_t \tilde{\varphi}_\epsilon^3 - \sigma_a \tilde{\varphi}_\epsilon^1 \quad (\epsilon^2)$$

Au delà les équations en puissances plus élevées de ϵ reprennent l'équation (ϵ^2) avec un décalage des indices.

On utilise (ϵ^{-1}) dans $\mu \times (\epsilon^0)$ qu'on moyenne en μ

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu \varphi_\epsilon^1(x, \mu) d\mu = \frac{-1}{3\sigma_t} \frac{d\varphi_\epsilon^0}{dx}$$

On moyenne (ϵ^1) en μ et on utilise le résultat précédent, et on moyenne aussi (ϵ^2)

$$\begin{aligned} \frac{-1}{3\sigma_t} \frac{d^2 \tilde{\varphi}_\epsilon^0}{dx^2} + \Sigma_a \tilde{\varphi}_\epsilon^0 &= 1 \\ \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu \frac{\partial \varphi_\epsilon^2}{\partial x} d\mu + \Sigma_a \tilde{\varphi}_\epsilon^1 &= 0 \end{aligned}$$

Cette dernière équation fait apparaître une intégrale avec φ_ϵ^2 que l'on fait aussi apparaître dans $\frac{\mu}{\sigma_t} \frac{\partial(\epsilon^1)}{\partial x}$. En joignant les deux on obtient

$$\frac{-1}{2} \int_{-1}^1 \frac{\mu}{\sigma_t} \frac{\partial^2 \varphi_\epsilon^1}{\partial x^2} d\mu + \Sigma_a \tilde{\varphi}_\epsilon^1 = 0$$

On utilise l'expression de φ_ϵ^1 dans (ϵ^0) pour faire disparaître l'intégrale. En utilisant aussi l'équation en $\tilde{\varphi}_\epsilon^0$ on obtient l'équation de diffusion neutronique à un $O(\epsilon^2)$ près avec une source unitaire

$$\frac{-1}{3\sigma_t} \frac{d^2 \tilde{\varphi}_\epsilon}{dx^2} + \Sigma_a \tilde{\varphi}_\epsilon = 1 \quad (14)$$

On peut maintenant regarder la solution de ce problème pour $\sigma_a = 0$ et $\sigma_t = 1$ qui est le cas sans absorption étudié auparavant. On trouve

$$\frac{-1}{3} \tilde{\varphi}_0(x)'' = 1 \quad (15)$$

soit $\tilde{\varphi}_0(x)$ un polynôme d'ordre 2 en x de la forme $\tilde{\varphi}_0(x) = -\frac{3}{2}x^2 + bx + c$. Pour déterminer les coefficients on utilise la symétrie de la solution par rapport à la droite $x = \frac{1}{2}$ qui donne $b = \frac{3}{2}$. L'ordonnée à l'origine est donnée par les conditions aux limites de Dirichlet homogène. On obtient donc la solution théorique à la limite de diffusion

$$\tilde{\varphi}_0(x) = \frac{3}{2}x(1-x) \quad (16)$$

On regarde la solution obtenue pour plusieurs ϵ ainsi que le nombre d'itérations nécessaires pour converger à $\nu = 10^{-7}$ près avec $N_x = 1000$ points en x et $N_\mu = 100$ arcs de cercles. Nous avons choisi ce paramètre de manière à avoir une solution le plus précise possible dans des temps de calcul raisonnables. Voici les résultats dans le tableau ci-dessous

ϵ	1	0.1	0.01
Nombre d'itérations	32	505	25243

Le nombre d'itérations nécessaires pour arriver à la précision souhaitée augmente très rapidement avec ϵ qui diminue. On voit donc bien l'intérêt de mettre en place une méthode d'accélération comme par exemple l'accélération par diffusion synthétique.

Avant de passer à l'accélération regardons l'impact des paramètres N_x et N_μ sur l'erreur.

2.4 Accélération par diffusion synthétique

Pour accélérer le code dans la limite de diffusion on utilise la méthode d'accélération par diffusion synthétique.

Cette méthode consiste à utiliser une approximation de l'équation (1) dans le cas de la limite de diffusion par une équation de diffusion de la forme :

$$-\operatorname{div} \left(\frac{1}{3\Sigma_t} \nabla \tilde{\varphi} \right) + \Sigma_a \tilde{\varphi} = Q \quad (17)$$

On reprend la méthode itérative des flux collisionnés, mais à la différence de précédemment, on suppose que le flux moyen en angle n'est plus qu'une *demi-itération* $\tilde{\varphi}^{n+1/2}$. Ainsi, le $(n+1)$ -ième flux collisionné s'exprime en fonction du n -ième flux collisionné par la relation

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

Et ainsi δ_φ^{l+1} vérifie l'équation de transport :

$$\mu \frac{\partial \delta_\varphi^{l+1}}{\partial x} + \Sigma_t \delta_\varphi^{l+1} = \frac{\Sigma_S}{2} \int_{-1}^1 \delta_\varphi^{l+1} d\mu' + \Sigma_S (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n)$$

Ainsi, l'équation de diffusion qui nous permet de calculer δ_φ^{l+1} et par la suite $\tilde{\varphi}^{n+1}$, pour notre cas 1D, est

$$-\frac{1}{3\Sigma_t} \frac{\partial^2 \delta_\varphi^{l+1}}{\partial x^2} + \Sigma_a \delta_\varphi^{l+1} = \Sigma_S (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n) \quad \text{sur }]0, 1[\quad (18)$$

qu'on complète par des conditions de Dirichlet sur les bords : $\delta_\varphi^{l+1}(0) = \delta_\varphi^{l+1}(1) = 0$.

Cette équation très classique est ici résolue en utilisant une méthode de type éléments finis P^1 . Pour alléger les notations, on notera dans la suite $f = \delta_\varphi^{l+1}$, Ainsi on écrit la formulation variationnelle de (18) :

$$\int_{-1}^1 \left(\frac{1}{3\Sigma_t} f' g' + \Sigma_a f g \right) dx = \Sigma_S \int_{-1}^1 (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n) g dx \quad (19)$$

Cela nous amène à résoudre un système linéaire $\mathbb{A}F = L$ où

- \mathbb{A} est une matrice tridiagonale, dont la diagonale est constante et égale à $\frac{2}{3\Delta x \Sigma_t} + \frac{\Sigma_a \Delta x}{3}$ et les diagonales supérieure et inférieure sont constantes et égales à $-\frac{1}{3\Delta x \Sigma_t} + \frac{\sigma_a \Delta x}{6}$,
- F est la discrétisation de δ_φ^{l+1} ,
- L est le second membre, calculé à partir de $\Sigma_S (\tilde{\varphi}^{n-1/2} - \tilde{\varphi}^n)$.

La résolution du système linéaire est effectuée par une méthode de décomposition de Cholesky, de sorte que la matrice EF ne soit décomposée qu'une seule fois pour toute au début l'algorithme. Ainsi, même si le calcul de la décomposition de Cholesky est effectué en $\mathcal{O}(N_x^3)$ opérations, la résolution de ce système est effectuée en $\mathcal{O}(N_x^2)$ opérations pendant l'algorithme.

L'accélération synthétique permet d'accélérer¹ grandement le calcul dans le cas de la limite de diffusion comme cela peut être vu dans le tableau (1).

1. heureusement

ϵ	1 (sans absorption)	0.1	0.01
Sans DSA	32	505	25243
Avec DSA	24	27	23

TABLE 1 – Nombre d’itération avec et sans accélération. Les paramètres de simulations sont $\nu = 10^{-7}$, $N_x = 1000$ points, et $N_\mu = 100$ arcs de cercles.