

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 surface efficace macroscopique Σ caractérise la probabilité d'interaction 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

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

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

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

Pour l'inverser on résoud $y = F(x)$

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

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

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

Pour simuler ce flux neutronique avec un solveur Monte-Carlo on commence par tirer une direction de départ μ_0 avec une loi uniforme $\mathcal{U}[-1, 1]$. Le point de départ est $x_0 = 0$ puisque la seule source se trouve en ce point. Puis on tire la distance parcourue par ce neutron selon la loi du libre parcours établie précédemment. Le neutron finit sa trajectoire au point x_1 avec toujours la direction μ_0 . Ceci donne alors une distributions de neutrons avec une densité f_ψ égale au libre parcours.

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

La probabilité pour un neutron de se trouver dans un intervalle $[a, b]$ est donc donnée par l'intégrale de φ sur cet interval 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

$$\psi(x, \mu) = \frac{\mathbb{P}(x_1 \in [x, x + dx])}{\Sigma_t dx} \quad (3)$$

En approximant la probabilité par la fréquence lors d'un grand nombre de tirage, nous sommes bien capables de trouver $\psi(x, \mu)$ pour tout x .

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 rap-

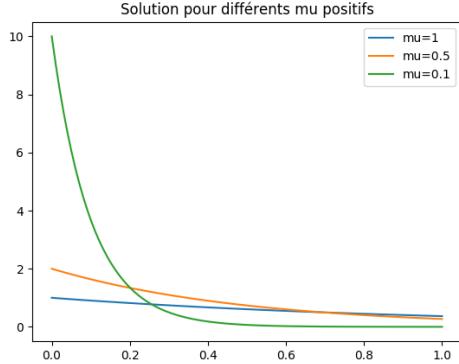
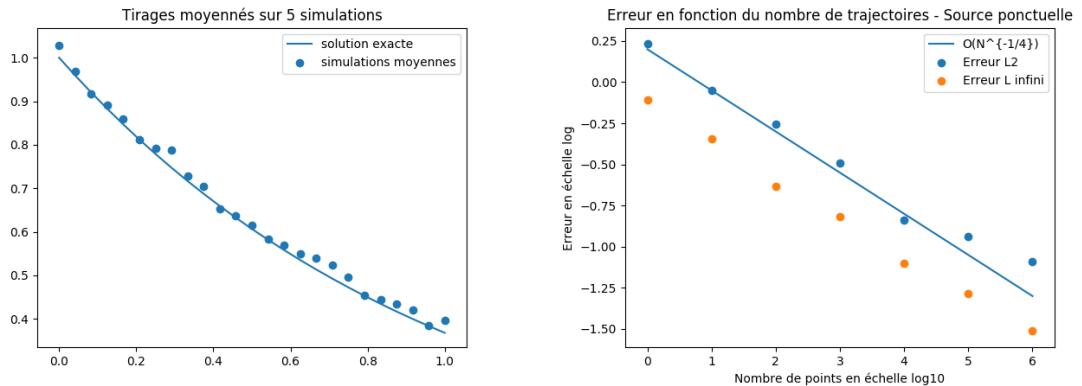


Figure 1: $\psi(x, \mu)$

proche 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 $[x; x + dx]$. Nous avons choisi ici de prendre $dx = \frac{1}{\sqrt{N}}$ après quelques essais.



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

(b) Vitesses de convergence

Figure 2: Etude de la simulation de $\psi(x, \mu = 1)$

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

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

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

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

1.2.3 Matériau non homogène 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 $\mu > 0$ puisqu'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 résoud le problème exactement de la même façon et on obtient

$$\varphi_2(x, \mu) = S_2(0.3, \mu) \frac{1}{\mu} e^{-\frac{3(x-0.3)}{\mu}} = \frac{1}{\mu^2} e^{-\frac{0.3}{\mu}} e^{-\frac{3(x-0.3)}{\mu}} \quad (\text{S2})$$

Le même raisonnement donne

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

1.3 Matériaux diffusants

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 collisif $\tilde{\varphi}^0$ 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

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

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 puisqu'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 collisinnés. 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 détermine un critère d'arrêt à $n = m$ dès que deux contributions sont "suffisemment proches", i.e. dès que $\tilde{\epsilon}^m < \eta$ où η est un paramètre fixé à l'avance qui caractérise la précision de notre simulation.

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

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

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.

- faire l'explication de l'estimateur du flux neutronique
- Cas homogène ponctuel : faire des plots et erreurs
- Cas homogène uniforme : faire des plots et erreurs
- Cas non homogène : pas de simulation : juste faire le calcul (je l'ai fait c'est dégueu mais izi)
- Cas scattering : le plus dur il faut coder les n rebonds des particules : fait mais des questions sur la théorie
- Etudier les temps de calcul
- Etudier la convergence (\sqrt{N} théoriquement) : en quelle norme ? J'ai 1/4 pour l'instant en norme L2.
- Etudier la complexité ??