

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'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

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

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 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.

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

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

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

Pour approcher numériquement ψ , on commence par discréteriser l'intervale $[0, 1]$ en sous-intervalles $[x_i, x_{i+1}]$, de longueur h . Puis on simule un grand nombre de particules Monte-Carlo, suivant le principe suivant :

1. toutes les particules Monte-carlo ont pour position initiale $x = 0$,
2. pour chaque particule, on tire une distance de libre parcours suivant la loi f_ψ et on note la position d'arrivée de chaque particule,
3. on retient C_0^i égal au nombre de particule dans l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$,
4. on relance les particules encore dans l'intervalle, puis on compte à nouveau le nombre de particule dans chaque intervalle, qu'on retiens dans C_1^i et ainsi de suite...

Finalement, la fréquence totale est $freq^i = \frac{1}{N} \sum_n C_n^i$. On peut ainsi approximer $\psi(x_{i+1/2}, \mu)$ par $\frac{1}{\Sigma_t h} freq^i$.

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

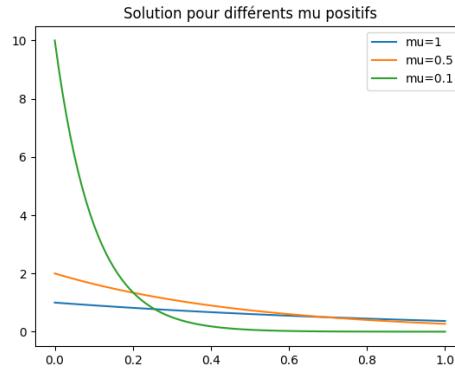


FIGURE 1 – $\psi(x, \mu)$

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.

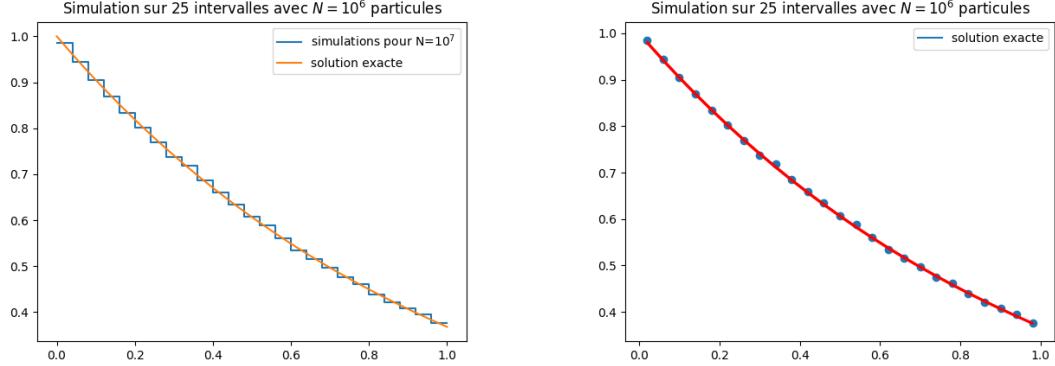
Enfin, il faut une estimation de la fiabilité de nos résultats. Pour ce faire, on va procéder par intervalle de fluctuation à 95%. L'intervalle de fluctuation à 95% donne l'intervalle de valeurs dans lequel 95% de nos mesures doivent être, en postulant que la théorie (notre code est juste) est vrai.

Pour ce faire on prend un point x et l'intervalle $[x - dx/2; x + dx/2]$ centré sur ce point sur lequel on approxime la solution par sa valeur en x . On peut considérer la variable aléatoire de Bernoulli de probabilité p : suis-je dans l'intervalle ou non ? On a $p = dx\tilde{\varphi}(x)$. Après N tirages de particules

La variance de notre résultat est donné par l'estimateur $Var_i \frac{freq^i(1-freq^i)}{N}$. Par ailleurs, on connaît la solution exacte de notre problème, donc on va centrer l'intervalle autour de la solution exacte. Cela nous donne un intervalle de confiance de la forme :

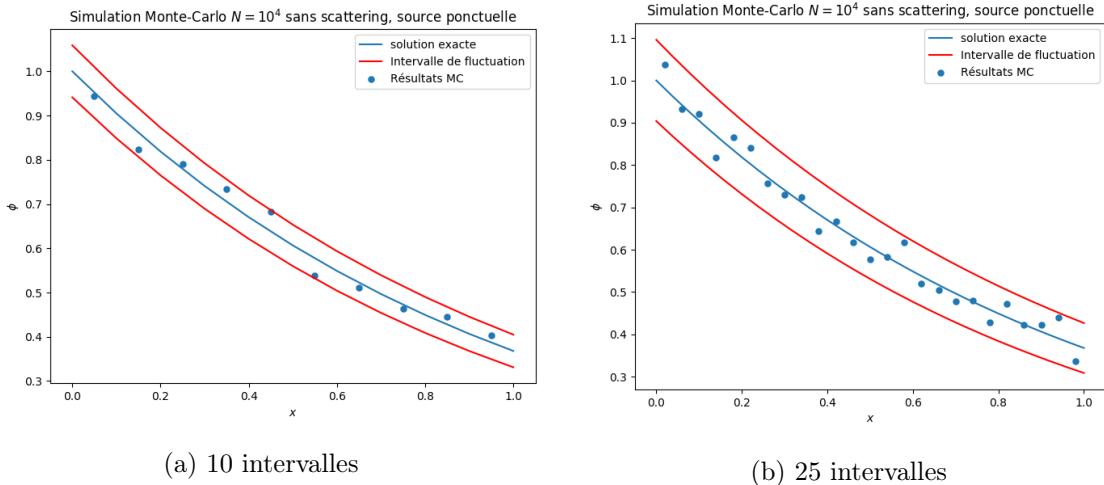
$$I_c^i = [\psi - 1.96\sqrt{Var_i}, \psi + 1.96\sqrt{Var_i}].$$

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.

(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 invisible sur la figure puisque de largeur évoluant en l'inverse de \sqrt{N} , il est ici de largeur de l'ordre de 10^{-3} . Les points donnent toutefois l'impression d'être compris dedans ou très proches. Nous avons tracé l'intervalle de confiance à 95% pour une gaussienne puisque par théorème central limite la moyenne empirique que nous calculons tend vers l'espérance.

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



(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 (4a)). 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.

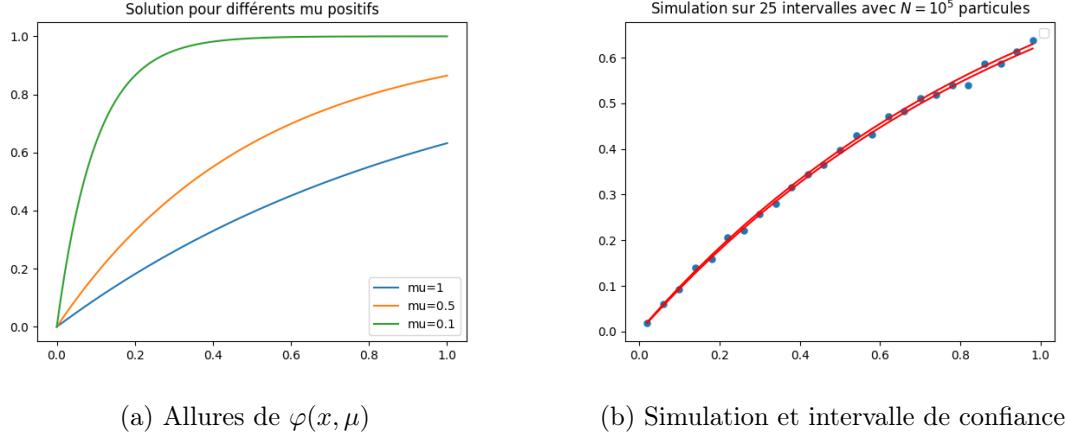


FIGURE 4 – Etude de la simulation de $\psi(x, \mu = 1)$

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 $\mu > 0$ 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

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

1.3 Matériau diffusant

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 $\tilde{\epsilon}^1$, 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. 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

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

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.

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

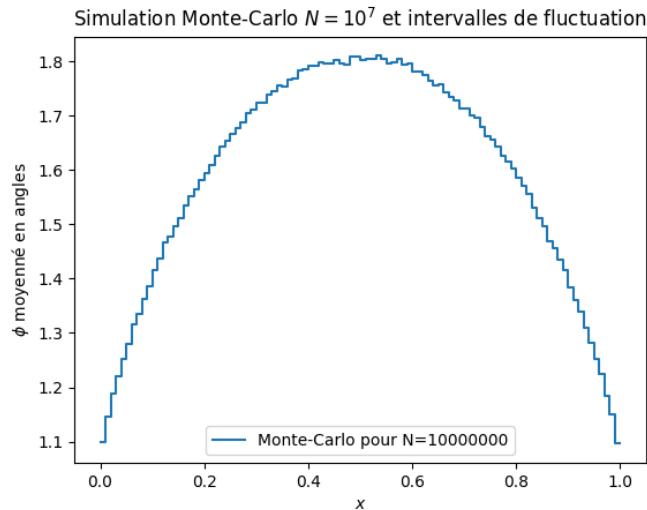


FIGURE 5 – Simulation de $\varphi(x, \mu)$ pour $N = 10^7$ tirages

La figure (5) 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 Matériaux purement absorbants

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.