

Rapport de TP  
AMS302

---

Solveur Déterministe  
pour le transport de particules neutres

---

*Benoît Sohet*  
✉  
*Aurélien Valade*

# 1 Introduction

Dans ce TP on cherche à résoudre le problème différentiel suivant

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, \mu) + \Sigma_t \Phi(x, \mu) = \frac{1}{2} \Sigma_s(x) \int_1^{-1} \Phi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu) & \forall (x, \mu) \in [0, 1] \times [-1, 1] \\ \mu n(x) < 0 & \forall (x, \mu) \in \{0, 1\} \times [-1, 1] \end{cases} \quad (1)$$

- $\Phi(x, \mu)$  le flux neutronique
- $\Sigma_t$  la section efficace totale
- $n(x)$  la normale sortante :  $n(0) = -1$ ,  $n(1) = 1$

On fixe pour cela deux types de conditions aux limites

- Flux entrant à gauche

$$\begin{cases} \Phi^-(0, \mu) = \frac{1}{\mu} & \forall \mu \in [0, 1] \\ \Phi^-(1, \mu) = 0 & \forall \mu \in [-1, 0] \end{cases} \quad (2)$$

- Source nulle ou unitaire

$$S(x) = 0 \quad \forall x \in [0, 1] \quad (3)$$

$$S(x) = 1 \quad \forall x \in [0, 1] \quad (4)$$

On utilisera dans la suite l'erreur pour une fonction  $f$  et son approximation  $\tilde{f}$  :

$$e_{L^2}(f, \tilde{f}) = \frac{\|f - \tilde{f}\|_{L_2}}{\|f\|_{L_2}} \quad (5)$$

*L'utilisation des codes nécessite gnuplot ainsi qu'un système d'exploitation respectant la norme POSIX.*

**Question 9.1** – *Rappeler la solution analytique au problème suivant Équation 1 avec  $S = \delta(0)$ ,  $\Sigma_s = 0$ .*

On peut donc réécrire Équation 1

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\Sigma_t}{\mu} \Phi = \frac{1}{\mu} \delta(x) \quad (6)$$

Une fois soumis à la transformée de Fourier on a

$$i\omega \tilde{\Phi} + \frac{\Sigma_t}{\mu} \tilde{\Phi} = \frac{1}{\mu} \quad (7)$$

$$\tilde{\Phi} = -\frac{i}{\mu \left( \omega - \frac{i\Sigma_t}{\mu} \right)} \quad (8)$$

on peut donc écrire

$$\Phi(x, \mu) = -\frac{i}{2\pi\mu} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{i\omega x}}{\omega - \frac{i\Sigma_t}{\mu}} d\omega \quad (9)$$

or d'après le théorème des résidus appliqué sur le contour fermé autour du point singulier  $\omega = i\frac{\Sigma_t}{\mu}$

$$\gamma_r = [-r, r] \cup \left\{ r e^{-i\theta}, \theta \in [0, \pi] \right\} \quad \text{avec } r \rightarrow \infty \quad (10)$$

on trouve que

$$\Phi(x, \mu) = -(2\pi i) \frac{i}{2\pi\mu} e^{i\frac{\Sigma_t}{\mu} x} \quad (11)$$

$$= \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} x} \quad (12)$$

FIGURE 1 – Fonctions  $\Phi$  pour différent  $\mu$ .

**Question 9.2** – Implémenter la méthode diamant de résolution.

La structure du code est la suivante (pour  $\mu > 0$ ), pour une discrétisation en  $N_x$  points en espace et  $N_\mu$  en direction.

- Récupération et vérification des arguments
- Allocation de la mémoire
- $m = 0, \quad Q = S, \quad \tilde{Q} = Q$

Tant que  $||\tilde{Q} - Q|| > \varepsilon_s$

- $\tilde{\Phi} = 0 \ [N_x]$

Pour  $k \in [1, N_\mu]$

- $\Phi^- = 0$

Pour  $i \in [1, N_x - 1]$

- $\Phi^+ = \frac{2\Delta i Q_i + (2|\mu_k| - \Delta \Sigma_{t,i})\Phi^-}{2|\mu_k| - \Delta \Sigma_{t,i}}$
- $\tilde{\Phi}_i = \tilde{\Phi}_i + \frac{1}{2}w_k(\Phi^+ + \Phi^-)$
- $\Phi^- = \Phi^+$

Fin pour  $i$

Fin pour  $k$

- $\tilde{Q} = Q$
- $Q = S + \frac{\Sigma_s}{2}\tilde{\Phi}$

Fin tant que

## 2 Matériau purement absorbant

### 2.1 Matériau homogène - source ponctuelle

**Question 3** – Trouver la solution analytique au problème Équation 1 avec les conditions suivantes :

$$\Sigma_s = 0, \quad \frac{\partial \Sigma_t}{\partial x} = 0, \quad S(x, \mu) = \delta(x) \quad (13)$$

Ces fonctions sont représentés dans la Figure 1.

**Question 4-6** – Implémenter le code Monte-Carlo pour ce modèle

Cf code commenté.

FIGURE 2 – Courbes théoriques et résultats des simulations Monte Carlo pour différents cas de figure. **Haut** : source ponctuelle en 0 avec  $\mu = 0.5$  et  $\Sigma_t = 2$  pour  $10^6$  particules avec une erreur  $e_{L_2} = 3 \cdot 10^{-6}$ . 18260 particules sont sorties du segment unitaire par la droite. **Milieu** : source constante sur  $[0, 1]$  avec  $\mu = 0.5$  et  $\Sigma_t = 3$  pour  $10^6$  particules avec une erreur  $e_{L_2} = 3 \cdot 10^{-6}$ . **Bas** : source constante sur  $[0, 1]$  avec  $\mu = -0.5$  et  $\Sigma_t = 3$  pour  $10^6$  particules avec une erreur  $e_{L_2} = 3 \cdot 10^{-6}$ .

FIGURE 3 – Fonctions  $\Phi$  pour différent  $\mu$ .

## 2.2 Matériau homogène - source uniforme

**Question 5** – Trouver la solution analytique au problème Équation 1 avec les conditions suivantes :

$$\Sigma_s = 0, \quad \frac{\partial \Sigma_t}{\partial x} = 0, \quad S(x, \mu) = 1 \quad (14)$$

On a donc en considérant un flux entrant nul à gauche

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\Sigma_t}{\mu} \Phi = \frac{1}{\mu} \quad (15)$$

$$\begin{cases} \Phi(x, \mu) = \frac{1}{\Sigma_t} \left( 1 - e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} x} \right) & \text{si } \mu > 0 \\ \Phi(x, \mu) = \frac{1}{\Sigma_t} \left( 1 - e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} (x-1)} \right) & \text{si } \mu < 0 \end{cases} \quad (16)$$

Ces résultats sont visibles en Figure 3, et les résultats des Monte-Carlo sont rassemblés en Figure 2.

## 2.3 Matériau hétérogène - source ponctuelle

**Question 6** – Trouver la solution analytique au problème Équation 1 avec les conditions suivantes :

$$\Sigma_s = 0, \quad \Sigma_t = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0.3 \\ 3 & \text{si } 0.3 < x < 0.7 \\ 1 & \text{si } 0.7 < x \end{cases}, \quad S(x, \mu) = \delta(x) \quad (17)$$

On pose l'intégrale continue de  $\Sigma_t(x)$

$$\tilde{\Sigma}(x) = \begin{cases} x & \text{si } x < 0.3 \\ 3(x - 0.3) + 0.3 & \text{si } 0.3 < x < 0.7 \\ (x - 0.7) + 1.5 & \text{si } 0.7 < x \end{cases} \quad (18)$$

On résout sur l'intervalle  $x \in [0, 0.3]$  comme dans la question 3 :

$$\Phi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t(x)}{\mu}} \quad \text{si } x < 0.3 \quad (19)$$

et on prolonge sur tout le segment grâce à  $\tilde{\Sigma}(x)$

$$\Phi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\tilde{\Sigma}(x)}{\mu}} \quad (20)$$

que l'on peut voir représentée en Figure 4.

**Attention** : ce raisonnement ne fonctionne que pour des particules partant de  $x = 0$  ! La loi de probabilité d'aller à une distance  $x$  a une toute autre forme si la source est quelconque.

FIGURE 4 – Fonction  $\Phi(x, \mu = 1)$  pour  $\Sigma_t$  variable avec une source ponctuelle en 0.FIGURE 5 – Courbes théorique et expérimentale pour une source ponctuelle en  $x = 0$ ,  $\Sigma_t$  continu par morceaux, et  $\mu = 0.75$ . On a une erreur de  $10^{-4}$  pour  $10^6$  particules lancées.

**Question 7** – Implémenter un solveur Monte-Carlo utilisant la méthode de Woodcock pour échantillonner le libre parcours de neutrons dans un tel matériau. On fournira les mêmes résultats que pour la question 4.

Suite à notre incompréhension de la méthode de Woodcock nous avons choisi d'implémenter un autre méthode pour résoudre ce problème. Elle est plus mathématique et ne fonctionne que pour une source ponctuelle en  $x = 0$ .

On normalise pour obtenir une loi de probabilité

$$P(x) = \frac{\lambda}{\mu} \begin{cases} \exp(-x/\mu) & x < 0.3 \\ \exp(-(3x - 0.6)/\mu) & 0.3 < x < 0.7 \\ \exp(-(x + 0.8)/\mu) & 0.7 < x \end{cases} \quad (21)$$

et on y associe une fonction de répartition

$$\mathcal{F}(x) = \lambda \begin{cases} C_1 - \exp(-x/\mu) & x < 0.3 \\ C_2 - 1/3 \exp(-(3x - 0.6)/\mu) & 0.3 < x < 0.7 \\ C_3 - \exp(-(x + 0.8)/\mu) & 0.7 < x \end{cases} \quad (22)$$

avec

$$C_1 = 1 \quad \mathcal{F}(0) = 0 \quad (23)$$

$$C_2 = 1 - 2/3 \exp(0.3/\mu) \quad \text{continuité en } x = 0.3 \quad (24)$$

$$C_3 = C_2 + 2/3 \exp(-1.5/\mu) \quad \text{continuité en } x = 0.7 \quad (25)$$

$$\lambda = 1/C_3 \quad \mathcal{F}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1 \quad (26)$$

On trace le résultat de cette simulation pour  $\mu = 0.75$  en Figure 5. Le résultat semble largement satisfaisant.

### 3 Matériau diffusif

On travaille maintenant avec un matériau diffusif. Pour cela on considère  $\Sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$ . L'algorithme est le suivant :

```
particule = [] // Coordonnées de chaque rebond (tableau initialement vide)
x=source() // La source génère une particule
proba_abs = ranf() // On tire une variable aléatoire (pour absorption)

tantque ( proba_abs>sigma_a/sigma_t ) {
  si ( x<0 ou x>1 ) fin
  sinon {
    proba_abs = ranf() // On tire une variable aléatoire (pour absorption)
    proba_diff = ranf() // On tire une variable aléatoire (pour diffusion)
    si ( proba_diff<sigma_s/sigma_t ) {
      ajoute_a_la_fin(x, particule)
      mu = 2*ranf()-1 // On retire mu dans [0,1]
    }
  }
}
```

FIGURE 6 – Courbes expérimentales pour deux types de sources. Haut : source constante sur  $[0, 1]$ , bas : source ponctuelle en 0. Lancer de  $2 \cdot 10^6$  particules avec  $\Sigma_a = 1, \Sigma_s = 5$ .

FIGURE 7 – Distribution du nombre de particules en fonction du nombre de sauts pour un lancer de  $2 \cdot 10^6$  particules, avec  $\Sigma_a = 1, \Sigma_s = 5$ , et un source constante sur  $[0, 1]$ .

```

    x = x + propagateur(mu, sigma) // On propage la particule
  }
}
```

Des résultats de ce code pour différents types de source sont donnés en Figure 6. On trace aussi en Figure 7 la distribution du nombre de sauts par particules dans un système à source constante sur  $[0, 1]$ . Cette répartition semble qualitativement être une exponentielle décroissant proportionnellement à  $\Sigma_a/\Sigma_t$  et sensible au type de source (non tracé ici).

## 4 Étude de la vitesse de convergence

On étudie pour le cas simple sans diffusion à source ponctuelle en 0 avec  $\Sigma_t = 1, \mu = 1$  la vitesse de convergence vers la solution en fonction du nombre de particules. On trace en Figure 8 la courbe  $e_{L^2}(N_{\text{part}})$  à l'aide du script `convergence.sh`. On remarque une convergence d'ordre un par rapport au nombre de particules.

FIGURE 8 – Erreur entre solution exacte et solution approximée en fonction du nombre de particules.