

Rapport de TP
AMS302

Solveur Monte-Carlo
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
- Σ_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 1 – *Quelle est la densité de probabilité du libre parcours d'un neutron dans un matériau de section efficace totale Σ ? Comment échantillonner une variable aléatoire suivant cette loi ?*

Densité p : Nous allons d'abord calculer la fonction de répartition correspondant :

$$F(l) = \int_a^{a+l} p(x) dx, \quad (6)$$

(avec a une constante quelconque), puis on déduira :

$$p(l) = \left\| \frac{\partial F}{\partial l}(l) \right\|. \quad (7)$$

$F(l)$ est la probabilité qu'un neutron n'ait pas interagi (ni absorption ni diffusion) lors d'un parcours de longueur l selon l'axe $(0x)$, autrement dit la probabilité que ce neutron ait un libre parcours de longueur $\frac{l}{\mu}$.

Or, la probabilité qu'il n'y ait pas d'interaction sur une longueur infinitésimal δl est :

$$1 - \frac{\Sigma_t}{\mu} \delta l. \quad (8)$$

Il suffit alors de multiplier cette expression autant de fois qu'il y a δl dans l , c'est-à-dire $N = \frac{l}{\delta l}$, pour parvenir à $F(l)$, puisqu'on peut considérer ces événements comme indépendants :

$$\left(1 - \frac{\Sigma_t}{\mu} \delta l\right)^N = \left(1 - \frac{\Sigma_t}{\mu} \frac{l}{N}\right)^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} l}. \quad (9)$$

De là, la probabilité $p(l)dl$ d'interaction entre l et $l + dl$ (sachant qu'il n'y en a pas eu jusqu'à présent) vaut :

$$p(l)dl = \frac{\Sigma_t}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} l} dl. \quad (10)$$

Échantillonnage : Pour reproduire cette densité de probabilité numériquement par une variable aléatoire X , il suffit d'explicitier F^{-1} , car :

$$P(a \leq X \leq b) = F(b) - F(a) = P(F(a) \leq U \leq F(b)) = P(a \leq F^{-1}(U) \leq b), \quad (11)$$

où U est une variable aléatoire uniforme. Or :

$$F^{-1}(y) = -\frac{\mu}{\Sigma_t} \log(y). \quad (12)$$

Il suffit donc d'utiliser une fonction *random* numérique à valeurs dans l'image de la fonction de répartition F , $[0; 1]$, puis d'appliquer l'inverse de cette fonction, F^{-1} . On obtient ainsi la variable aléatoire suivant la loi $p(l)dl$.

Remarque : Lorsque $\mu < 0$, $dl < 0$ et $N < 0$, mais dans chaque formule se fait le produit (ou le rapport) de deux de ces quantités, ce qui redevient alors positif.

Question 2 – *Connaissant les trajectoires (marches aléatoires) d'une population neutronique, comment construire un estimateur du flux neutronique ?*

Le flux neutronique en x d'une population de neutrons est par définition le nombre de ces neutrons dont la trajectoire s'est arrêtée en x (c'est-à-dire lorsqu'il y a eu interaction).

2 Matériau purement absorbant

2.1 Matériau homogène - source ponctuelle

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

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

On a donc

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\Sigma_t}{\mu} \Phi = \frac{1}{\mu} \delta(x) \quad (14)$$

Une fois soumis à la transformée de Fourier on a

$$i\omega \tilde{\Phi} + \frac{\Sigma_t}{\mu} \tilde{\Phi} = \frac{1}{\mu} \quad (15)$$

$$\tilde{\Phi} = -\frac{i}{\mu \left(\omega - \frac{i\Sigma_t}{\mu} \right)} \quad (16)$$

on peut donc écrire

$$\Phi(x, \mu) = -\frac{i}{2\pi\mu} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{i\omega x}}{\omega - \frac{i\Sigma_t}{\mu}} d\omega \quad (17)$$

FIGURE 1 – Fonctions Φ pour différent μ .

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 $e_{L_2} = 3 \cdot 10^{-6}$.

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

$$\gamma_r = [-r, r] \cup \left\{ r e^{-i\theta}, \theta \in [0, \pi] \right\} \quad \text{avec } r \rightarrow \infty \quad (18)$$

on trouve que

$$\Phi(x, \mu) = -(2\pi i) \frac{i}{2\pi\mu} e^{i \frac{\Sigma_t}{\mu} x} \quad (19)$$

$$= \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} x} \quad (20)$$

Ces fonctions sont représentées dans la Figure 1.

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

Cf code commenté.

2.2 Matériau homogène - source uniforme

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

$$\Sigma_s = 0, \quad \frac{\partial \Sigma_t}{\partial x} = 0, \quad S(x, \mu) = 1 \quad (21)$$

On a donc en considérant un flux entrant nul à gauche

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\Sigma_t}{\mu} \Phi = \frac{1}{\mu} \quad (22)$$

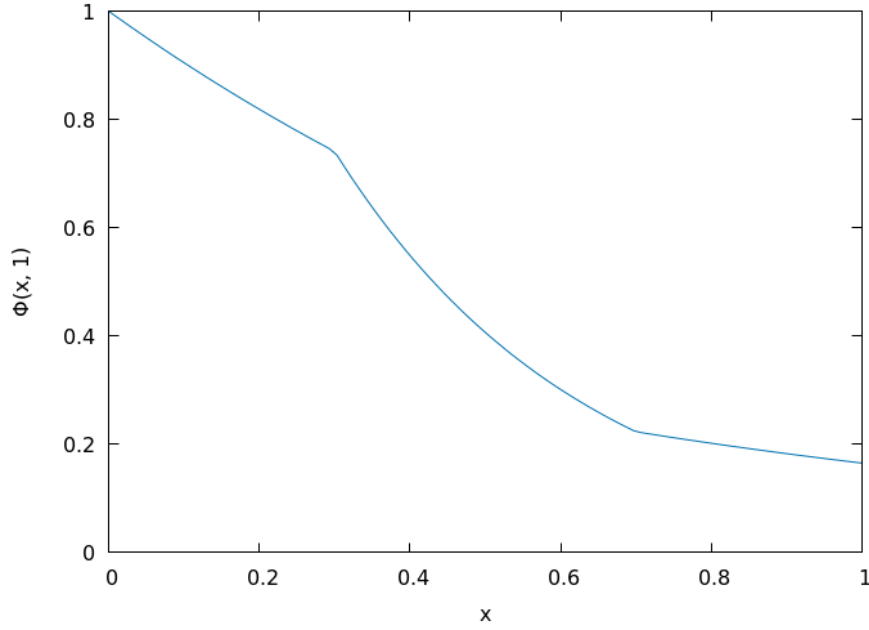
$$\begin{cases} \Phi(x, \mu) = \frac{1}{\Sigma_t} \left(1 - e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} x} \right) & \text{si } \mu > 0 \\ \Phi(x, \mu) = \frac{1}{\Sigma_t} \left(1 - e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu} (x-1)} \right) & \text{si } \mu < 0 \end{cases} \quad (23)$$

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 :

FIGURE 3 – Fonctions Φ pour différent μ .

FIGURE 4 – Fonction $\Phi(x, \mu = 1)$ pour Σ_t variable avec une source ponctuelle en 0.

$$\Sigma_s = 0, \quad \Sigma_t = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0.3 \\ 3 & \text{si } 0.3 < x < 0.7, \\ 1 & \text{si } 0.7 < x \end{cases}, \quad S(x, \mu) = \delta(x) \quad (24)$$

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

$$\tilde{\Sigma}(x) = \begin{cases} x & \text{si } x < 0.3 \\ 3(x - 0.3) + 0.3 & \text{si } 0.3 < x < 0.7 \\ (x - 0.7) + 1.5 & \text{si } 0.7 < x \end{cases} \quad (25)$$

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

$$\Phi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\Sigma_t(x)}{\mu}} \quad \text{si } x < 0.3 \quad (26)$$

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

$$\Phi(x, \mu) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\tilde{\Sigma}(x)}{\mu}} \quad (27)$$

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.

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 une autre méthode pour résoudre ce problème. Elle est plus mathématique et ne fonctionne que pour une source ponctuelle en $x = 0$.

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

On normalise pour obtenir une loi de probabilité

$$P(x) = \frac{\lambda}{\mu} \begin{cases} \exp(-x/\mu) & x < 0.3 \\ \exp(-(3x - 0.6)/\mu) & 0.3 < x < 0.7 \\ \exp(-(x + 0.8)/\mu) & 0.7 < x \end{cases} \quad (28)$$

et on y associe une fonction de répartition

$$\mathcal{F}(x) = \lambda \begin{cases} C_1 - \exp(-x/\mu) & x < 0.3 \\ C_2 - 1/3 \exp(-(3x - 0.6)/\mu) & 0.3 < x < 0.7 \\ C_3 - \exp(-(x + 0.8)/\mu) & 0.7 < x \end{cases} \quad (29)$$

avec

$$C_1 = 1 \quad \mathcal{F}(0) = 0 \quad (30)$$

$$C_2 = 1 - 2/3 \exp(0.3/\mu) \quad \text{continuité en } x = 0.3 \quad (31)$$

$$C_3 = C_2 + 2/3 \exp(-1.5/\mu) \quad \text{continuité en } x = 0.7 \quad (32)$$

$$\lambda = 1/C_3 \quad \mathcal{F}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 1 \quad (33)$$

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]
    }
    x = x + propageur(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 Σ_a/Σ_t et sensible au type de source (non tracé ici).

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 $[0, 1]$.

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.