Master de physique fondamentale et appliquée d'Orsay

Option :Processus stochastiques et neutronique
Correction de l'examen du 23 novembre 2018

1 Monte Carlo : tirage uniforme dans un tronc de cône (3 points)

1. Plusieurs méthodes sont possibles, en voici une en choisissant un repère cylindrique (ρ, θ, z) centré à la base du cône. On tire trois nombres aléatoires $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in [0; 1]^3$. Puis on choisit z uniforme dans $[0; h]$, soit $z = \xi_1 h$. A la hauteur z on tire uniformément dans le disque de rayon $r = r_2 + (1 - \xi_1)(r_1 - r_2)$ correspondant à la hauteur z. En coordonnée cylindrique : $\rho = r\sqrt{\xi_2}$ et $\theta = 2\pi\xi_3$. Au final :$(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in [0; 1]^3$, ensuite
$$\begin{cases} z = h\xi_1 \\ \rho = [r_2 + (1 - \xi_1)(r_1 - r_2)]\sqrt{\xi_2} \\ \theta = 2\pi\xi_3 \end{cases}$$
2. Pour la méthode de rejet, on place le tronc de cône dans une boîte de base $(2r_1)^2$ et de hauteur h. La méthode est d'autant plus mauvaise que la différence entre les deux rayons r_1 et r_2 est grande. Le cas extrême correspondant au cylindre lorsque $r_2 = 0$. Dans ce cas, le taux d'acceptance vaut : Volume du cylindre/ Volume de la boîte, soit $(1/3\pi r_1^2 h)/((2r_1)^2 h) = \pi/12 \approx 0.26$. Le taux de rejet vaut $\approx 74\%$ et l'algorithme est peu efficace.

2 Simulation d'une densité de probabilité (2 pts)

$$f(x) = \frac{2}{3}\left(1 - \frac{x}{2}\right)\mathbf{1}_{[0;2]}(x) + e^{3(1-x)}\mathbf{1}_{[1;\infty[}(x) \tag{1}$$

L'inversion de la fonction de répartition va être difficile, d'autant que les fonctions se chevauchent. Il vaut mieux considérer $f(x)$ comme la composition de deux fonctions, de poids respectifs $\int_0^2 \frac{2}{3}\left(1 - \frac{x}{2}\right)dx = 2/3$ et $\int_1^\infty \frac{1}{2}e^{3(1-x)}\mathbf{1}_{[1;\infty[}(x) = 1/3$.

Échantillonner suivant $f_1(x) = (\frac{2}{3}\left(1 - \frac{x}{2}\right)\mathbf{1}_{[0;2]}(x))/(2/3) = \left(1 - \frac{x}{2}\right)\mathbf{1}_{[0;2]}(x)$ se fait suivant
$$\xi = \int_0^x \left(1 - \frac{y}{2}\right)dy = x - \frac{x^2}{4}$$
Dans l'intervalle $[0; 2]$, l'équation du second degré à une seule solution : $x = 2(1 - \sqrt{1 - \xi})$.

Échantillonner suivant $f_2(x) = (e^{3(1-x)}\mathbf{1}_{[1;\infty[}(x))/(1/3) = 3e^{3(1-x)}\mathbf{1}_{[1;\infty[}(x)$ se fait suivant
$$\xi = \int_1^x 3e^{3(1-y)}dy = 1 - e^{3(1-x)},$$
soit $x = 1 - \frac{1}{3}\log(1 - \xi)$.

Au final, voici un algo possible :
On tire deux nombres aléatoires $(\xi_1, \xi_2) \in [0; 1]^2$.

Si $\xi_1 < 2/3$ alors $x = 2(1 - \sqrt{1 - \xi_2})$, sinon $x = 1 - \frac{1}{3}\log(1 - \xi_2)$.

3 Équation Maîtresse : décroissance radioactive (4 pt)

1. L'équation Maîtresse s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial t}(n,t) &= W(n+1 \to n)P(n+1,t) - W(n \to n-1)P(n,t)\\ &= \gamma(n+1)P(n+1,t) - \gamma n P(n,t)\end{aligned}$$

2. En multipliant par z^n puis en sommant sur n, on trouve immédiatement l'équation aux dérivées partielles satisfaite par $G(z,t)$.

3. $$\left(\frac{\partial G}{\partial z}\right)_{z=1} = \sum_{n=0}^{\infty} nP(n,t) = \langle n(t)\rangle \tag{2}$$

   et

   $$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial z^2}\right)_{z=1} = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)P(n,t) = \langle n(t)^2\rangle - \langle n(t)\rangle \tag{3}$$

4. Conditions initiales sur $G(z,t)$:

   $$G(z,t=0) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n P(n,t=0) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \delta_{n,n_0} = z^{n_0} \tag{4}$$

   Par ailleurs, $G(z,t=0) = [c(z-1)+1]^d$. On a donc $c=1$ et $d=n_0$, par conséquent :

   $$G(z,t) = \left[(z-1)e^{-\gamma t}+1\right]^{n_0} \tag{5}$$

   Les crochets $\langle\rangle$ indiquent une moyenne sur les réalisations du processus.
   En dérivant une et deux fois $G(z,t)$ par rapport à z en $z=1$, on obtient facilement :

   $$\langle n(t)\rangle = n_0 e^{-\gamma t} \quad \text{et} \quad \sigma^2(t) = \langle n(t)^2\rangle - \langle n(t)\rangle^2 = n_0 e^{-\gamma t}(1-e^{-\gamma t}) \tag{6}$$

5. Une autre méthode pour obtenir les moments consiste à multiplier l'équation maîtresse par n ou n^2 puis à sommer sur n afin d'obtenir directement une équation différentielle pour les moments (une méthode vue de nombreuses fois en cours/TDs). On peut aussi calculer directement les $P(n,t)$ puis les différents moments, comme vu en TD.

6. $$\begin{aligned}G(z,t) &= \left[(z-1)e^{-\gamma t}+1\right]^{n_0}\\ &= \left[ze^{-\gamma t}+(1-e^{-\gamma t})\right]^{n_0}\\ &= \sum_{n=0}^{n_0}\binom{n_0}{n} z^n e^{-\gamma n t}(1-e^{-\gamma t})^{n_0-n} \qquad \text{(formule du binome)}\\ &= \sum_{n=0}^{n_0} z^n \underbrace{\left[\binom{n_0}{n} e^{-\gamma n t}(1-e^{-\gamma t})^{n_0-n}\right]}_{P(n,t)} \qquad \text{(definition de G(z, t)).}\end{aligned}$$

   Donc :

   $$\begin{cases} P(n,t) &= \binom{n_0}{n} e^{-\gamma n t}(1-e^{-\gamma t})^{n_0-n} \quad \text{si } n \le n_0\\ P(n,t) &= 0 \quad \text{si } n > n_0.\end{cases}$$

4 Marches aléatoires en 1 dimension (3 points)

1. Le processus est markovien, la position à l'instant $t+\tau$ ne dépend que de la position à l'instant t.
2. $N(x)+R(x)+L(x)=1$.
3. $p(x,t+\tau) = N(x)p(x,t) + R(x-a)p(x-a,t) + L(x+a)p(x+a,t)$.

4. limite $a \to 0$ et $\tau \to 0$:

$$
\begin{aligned}
p(x,t+\tau) &= p(x,t) + \tau \frac{\partial p}{\partial t} + \dots \\
p(x \pm a, t) &= p(x,t) \pm a \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \dots && (7) \\
R(x-a) &= R(x) - a\frac{\partial R}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \dots && (8) \\
L(x+a) &= L(x) + a\frac{\partial L}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + \dots
\end{aligned}
$$

En reportant ces expressions dans l'équation aux différences, on obtient Fokker-Planck

$$
\tau \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = a \frac{\partial}{\partial x}\left[(L(x) - R(x))p(x,t)\right] + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[(L(x)+R(x))p(x,t)\right],
$$

d'où $\beta(x) = a(R(x) - L(x))/\tau$ et $D(x) = a^2(R(x) + L(x))/(2\tau)$. β est un terme de dérive (ou de biais) et D un terme de diffusion.

5 Neutronique : équation de la diffusion (4 points)

1. Les invariances impliquent une solution de type $\Phi(x)$. Par symétrie on se limite à $x \geq 0$.

$$
\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} - k^2\Phi(x) = -\frac{S}{D} \tag{9}
$$

$$
\Phi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx} + \frac{S}{\Sigma_a} \tag{10}
$$

Pour le courant $J(x) = -D\frac{d\Phi(x)}{dx}$:

$$
J(x) = Dk\left[Ae^{-kx} - Be^{kx}\right] \tag{11}
$$

Conditions aux limites : $\Phi(a) = 0$, de plus par symétrie le courant au centre de la plaque est nul : $J(0) = 0$.

On a $\Phi(a) = Ae^{-ka} + Be^{ka} + \frac{S}{\Sigma_a} = 0$ et $\lim_{r\to 0} j(x) = \frac{S}{2}$ avec $j(x) = -D\frac{d\Phi(x)}{dx}$.

$$
\begin{aligned}
A - B &= \frac{S}{2kD} \\
Ae^{-ka} + Be^{ka} + \frac{S}{\Sigma_a} &= 0
\end{aligned}
$$

Solution,

$$
\boxed{\Phi(x) = \frac{S}{\Sigma_a}\left[1 - \frac{\cosh(kx)}{\cosh(ka)}\right]}
$$

2.

$$
\Phi_{maximum} = \Phi(0) = \frac{S}{\Sigma_a}\left[1 - \frac{1}{\cosh(ka)}\right]
$$

$$
\Phi_{moyen} = \int_0^a \Phi(x)\frac{\mathrm{d}x}{a} = \frac{S}{a\Sigma_a}\left[a - \frac{\sinh(ka)}{k\cosh(ka)}\right]
$$

$$
F = \frac{\Phi_{maximum}}{\Phi_{moyen}} = \frac{1 - \frac{1}{\cosh(ka)}}{1 - \frac{\sinh(ka)}{ka\cosh(ka)}}.
$$

6 Mouvement brownien d'une molécule diatomique (4 points)

1. En négligeant les termes d'accélération, les équations de Langevin deviennent :

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = -\frac{k}{\gamma}(x_1(t) - x_2(t)) + \frac{1}{\gamma}F_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = \frac{k}{\gamma}(x_1(t) - x_2(t)) + \frac{1}{\gamma}F_2(t) \end{cases} \tag{12}$$

Puis en faisant la somme et la différence :

$$\begin{cases} \dot{R}(t) = \frac{1}{2\gamma}(F_1(t) + F_2(t)) \\ \dot{r}(t) = -\frac{2k}{\gamma}r(t) + \frac{1}{\gamma}(F_1(t) - F_2(t)) \end{cases} \tag{13}$$

On a

$$R(t) = R_0 + \frac{1}{2\gamma}\int_0^t (F_1(t') + F_2(t'))dt' \tag{14}$$

et

$$\langle (R(t) - R_0)^2 \rangle = \frac{1}{(2\gamma)^2}\langle \int_0^t (F_1(t') + F_2(t'))dt' \int_0^t (F_1(t'') + F_2(t''))dt'' \rangle \tag{15}$$

$$= \frac{1}{(2\gamma)^2} 2 \times 2\gamma T \int_0^t dt' = \frac{Tt}{\gamma}. \tag{16}$$

Puis pour $r(t)$, en posant $\alpha = k/\gamma$:

$$r(t) = r_0 e^{-2\alpha t} + \int_0^t dt' \frac{1}{\gamma}(F_1(t') - F_2(t'))e^{-2\alpha(t-t')} \tag{17}$$

Donc :

$$\begin{aligned}
\langle (r - r_0)^2 \rangle &= \langle \Big[r_0(e^{-2\alpha t} - 1) + \int_0^t dt' \frac{1}{\gamma}(F_1(t') - F_2(t'))e^{-2\alpha(t-t')} \Big]^2 \rangle \\
&= r_0^2(e^{-2\alpha t} - 1)^2 + \frac{1}{\gamma^2}\int_0^t \int_0^t dt'dt'' \langle \big[F_1(t') - F_2(t')\big]\big[F_1(t'') - F_2(t'')\big] \rangle e^{-2\alpha(2t - t' - t'')} \\
&= r_0^2(e^{-2\alpha t} - 1)^2 + \frac{4T}{\gamma}\int_0^t \int_0^t dt'dt'' \delta(t' - t'')e^{-2\alpha(2t - t' - t'')} \\
&= r_0^2(e^{-2\alpha t} - 1)^2 + \frac{4T}{\gamma}\int_0^t dt' e^{-2\alpha(2t - 2t')} \\
&= r_0^2(e^{-2\alpha t} - 1)^2 + \frac{T}{\alpha\gamma}e^{-4\alpha t}(e^{4\alpha t} - 1) \\
&= r_0^2(e^{-\frac{2kt}{\gamma}} - 1)^2 + \frac{T}{k}(1 - e^{-\frac{4kt}{\gamma}})
\end{aligned} \tag{18}$$

2. Les forces dans les différentes directions sont indépendantes les unes des autres, pour chaque direction le résulat est le même qu'en une dimension, donc :

$$\langle (\vec{R(t)} - \vec{R_0})^2 \rangle = 3 \times \frac{Tt}{\gamma} \tag{19}$$

7 Marche aléatoire anisotrope avec une trappe (question bonus)

La méthode des images consiste à trouver une combinaison linéaire adéquate de $c_{x_0}(x,t)$ et de $c_{-x_0}(x,t)$ qui satisfasse la condition aux limites $c(0,t) = 0$ à tous les temps. On cherche donc $c(x,t) = c_{x_0}(x,t) + Kc_{-x_0}(x,t)$ où K est une constante permettant d'avoir $c(0,t) = 0$. Cette hypothèse permet d'obtenir immédiatement K et au final :

$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\left[\exp\left(-\frac{(x - x_0 + \nu t)^2}{4Dt}\right) - \exp\left(\frac{\nu x_0}{D}\right)\exp\left(-\frac{(x + x_0 + \nu t)^2}{4Dt}\right)\right].$$