

THÈSE

Présentée pour l'obtention du titre de

DOCTEUR

de

L'ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET
CHAUSSEES

Spécialité: Mathématiques Appliquées et Informatique

Par

Jean Marc DEPINAY

Sujet: **Automatisation de méthodes de réduction de variance
pour la résolution de l'équation de transport.**

Soutenue le 29 Mai 2000, devant le jury composé de :

Président:	Mme Agnès Sulem	I.N.R.I.A.,
Rapporteur:	Mme Agnès Sulem	I.N.R.I.A.,
Rapporteur:	M. Jean-Claude Nimal	C.E.A.,
Examineur:	M. Rémy Sentis	C.E.A.,
Examineur:	M. Michel Caillaud	C.E.A.,
Examineur:	M. Serge Cohen	E.N.P.C.,
Directeur de Thèse:	M. Bernard Lapeyre	E.N.P.C.

Remerciements

L'environnement scientifique et technique dont j'ai bénéficié au Commissariat à l'Energie Atomique a été exceptionnel et je suis très reconnaissant à Michel Caillaud de m'y avoir accueilli au sein de son laboratoire et d'avoir été toujours disponible. Je suis aussi très reconnaissant à Rémy Sentis de m'avoir accordé une bonne partie de son temps, je lui dois beaucoup dans les aspects théoriques.

Je suis conscient de tout ce que je dois à Bernard Lapeyre. Toute la profondeur de ce travail, la rigueur et la consistance n'y seraient sans lui.

Je remercie vivement Agnès Sulem et Jean-Claude Nimal pour avoir pris le temps de rapporter cette thèse. Je suis également très reconnaissant de pouvoir compter Serge Cohen dans le jury.

J'ai une pensée pour Benjamin Morillon qui bien plus qu'un collègue de travail a été un véritable ami.

La liste est longue de tous ceux qui m'ont apporté leur aide, et il m'est difficile de les nommer tous. Je voudrais cependant remercier Monsieur Ledanois qui m'a beaucoup aidé dans les différentes techniques de biaisage, et tous les compagnons thésard de travail (je ne parle pas de belote) du bâtiment J.

Enfin, je dédie tout ce travail à ma femme et mes parents qui y voient une certaine récompense aux efforts qu'ils ont consenti à mon égard.

Merci Rose de m'avoir supporter (à tous les sens du terme).

Ce travail est pour mes enfants Alexandre, celui en cours... CH.

Table des matières

Introduction	4
1 Propriétés des Équations de transport	7
1.1 Équation de transport : le modèle physique	7
1.1.1 Les équations de transport: l'approche physique	9
1.1.2 Mise en groupe de l'équation de transport	13
1.2 Équation de transport : Approche stochastique	15
1.2.1 Construction du processus markovien de transport	16
1.2.2 Formules de Feynman Kac et équations de transport	18
2 Mise en oeuvre de la méthode de Monte Carlo	21
2.1 Implémentation de la méthode de Monte-Carlo	21
2.2 Variantes de la simulation du processus	23
2.2.1 Simulation naturelle	24
2.2.2 Diffusion imposée et conditionnement	24
2.2.3 La simulation avec un opérateur de collision markovien	26
2.3 Techniques d'échantillonnage préférentiel	27
2.3.1 Échantillonnage préférentiel	28
2.3.2 Le Biaisage de l'équation de transport	28
2.3.3 Les fonctions d'importance	30
2.3.4 Détermination des directions d'importances	34
3 Le cas monoénergétique	39
3.1 Calcul de la fonction d'importance	39
3.2 L'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision	45
3.3 Le cas monoénergétique isotrope	46
3.4 Applications	47
3.4.1 Traversée d'une plaque	47
3.4.2 L'exemple du tuyau	56
4 Le cas multigroupe	63
4.1 Calcul de la fonction d'importance	63
4.2 Applications	74
4.2.1 Le cas multigroupe isotrope	74
4.2.2 Le cas multigroupe anisotrope	80
Conclusion	100

A	Existence et unicité du paramètre de biaisage	101
A.1	Rappel sur les valeurs propres	101
A.2	Démonstration de l'existence et unicité du paramètre K	101
A.3	Dépendance et monotonie de λ_K par rapport à K	108

Table des figures

1.1	Le neutron dans son système de coordonnées.	8
1.2	Trajectoire d'une particule.	16
2.1	Représentation des directions d'intérêt dans une maille.	35
2.2	L'importance au détecteur vaut 1.	36
2.3	Détermination des importances des mailles voisines.	36
2.4	Détermination des importances par itération.	37
2.5	Amélioration en raffinant certaines mailles.	37
3.1	Le cas Test de traversée de plaque.	47
3.2	Loi naturelle de renvoi.	51
3.3	Loi Biaisée de renvoi.	52
3.4	Traversée de plaque: Simulation naturelle.	53
3.5	Traversée de plaque: Biaisage exponentiel seul.	54
3.6	Traversée de plaque: Biaisage exponentiel et angulaire.	54
3.7	Tuyau: vue de haut.	56
3.8	Tuyau: coupe d'une vue de face.	56
3.9	Directions d'intérêt de la traversée d'un tuyau.	57
3.10	Traversée de plaque: Simulation naturelle.	58
3.11	Traversée de plaque: Biaisage exponentiel seul.	59
3.12	Traversée de plaque: Biaisage exponentiel et angulaire.	59
3.13	Marche aléatoire d'une particule: Biai. Exp et Ang.	60
4.1	Traversée de plaque (Tous groupes d'énergie): Simulation naturelle.	83
4.2	Traversée de plaque (1er groupe d'énergie): Simulation naturelle.	83
4.3	Traversée de plaque (2ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.	84
4.4	Traversée de plaque (3ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.	84
4.5	Traversée de plaque (Tous groupes): Biaisage exponentiel seul.	85
4.6	Traversée de plaque (groupe 1): Biaisage exponentiel seul.	85
4.7	Traversée de plaque (2ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel seul.	86
4.8	Traversée de plaque (3ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel seul.	86
4.9	Traversée de plaque (Tous les groupes d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.	87
4.10	Traversée de plaque (1er groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.	87

4.11	Traversée de plaque (2ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.	88
4.12	Traversée de plaque (3ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.	88
4.13	Traversée du tuyau (Tous les groupes d'énergie): Simulation naturelle.	91
4.14	Traversée du tuyau (1er groupe d'énergie): Simulation naturelle.	91
4.15	Traversée du tuyau (2ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.	92
4.16	Traversée du tuyau (3ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.	92
4.17	Traversée du tuyau (Tous groupes): Simulation Exponentielle.	93
4.18	Traversée du tuyau (groupe 1): Simulation Exponentielle.	93
4.19	Traversée du tuyau (2ème groupe d'énergie): Simulation Exponentielle.	94
4.20	Traversée du tuyau (3ème groupe d'énergie): Simulation Exponentielle.	94
4.21	Traversée du tuyau (Tous les groupes d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.	95
4.22	Traversée du tuyau (1er groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.	95
4.23	Traversée du tuyau (2ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.	96
4.24	Traversée du tuyau (3ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.	96

Résumé

Les méthodes de Monte-Carlo sont souvent utilisées pour la résolution des problèmes de neutroniques. La grande dimension du problème et la complexité des géométries réelles rendent, en effet, les méthodes numériques traditionnelles difficiles à implémenter. Ces méthodes sont relativement faciles à mettre en oeuvre mais ont le défaut de converger lentement, la précision du calcul étant en $1/\sqrt{n}$, où n est le nombre de simulations.

Des nombreuses études ont été menées en vue d'accélérer la convergence de ce type d'algorithme. Ce travail s'inscrit dans cette mouvance et vise à rechercher et décrire des techniques d'accélération de convergence facilement implémentables et automatisables. Dans cette thèse, nous nous intéressons à des méthodes d'échantillonnage préférentiel. Ces techniques classiques pour les équations de transport utilisent des paramètres qui sont usuellement fixés de façon empirique par des spécialistes. La principale originalité de notre travail est de proposer des méthodes qui s'automatisent facilement. L'originalité de l'algorithme tient d'une part à l'utilisation d'un échantillonnage préférentiel sur la variable angulaire (biaisage angulaire), utilisé en plus de l'échantillonnage de la variable de position, d'autre part en la description d'une technique de calcul explicite de tous les paramètres utiles dans la réduction de variance. Ce dernier point permet l'automatisation quasi-complète de la procédure de réduction de variance.

Abstract

Monte-Carlo methods are often used for the resolution of neutronic problems. Geometry complexity makes the traditional numeric methods difficult to implement. Monte-Carlo methods are easy to implement but converge slowly, the computational precision being $1/\sqrt{n}$, where n is the number of simulations.

Various studies have been made in order to accelerate the convergence of this type of algorithm. This work is in this same direction and outlines some convergence accelerating techniques that are easy to implement and make automatic.

In this work we focus on the sampling importance techniques. They are used for the transport equation with lots of parameters empirically fixed by specialists.

The originality of the algorithm derives on the one hand from the use of sampling importance on the angular variable (angular biasing) in addition to the sampling importance on the position variable, and on the other from the description of a technique for the explicit calculation of all the parameters used in this variance reduction methods.

This last feature permits the variance reduction procedure to be almost entirely automatic.

Introduction

Cette thèse est consacrée à la résolution numérique d'équations de transport de particules neutres par des méthodes de Monte-Carlo. L'équation de transport traduit un bilan sur la population de particules dans un domaine fini, constitué de matériaux (dont la nature et la densité déterminent la nature des chocs subis par ces particules).

Les méthodes numériques pour résoudre les problèmes de transport se classent en deux grandes catégories. Les *méthodes déterministes* qui s'appuient sur une discrétisation du type différences finis ou éléments finis. Ces méthodes sont lourdes à mettre en oeuvre pour les domaines géométriques complexes, en particulier pour les problèmes tridimensionnels (la plupart des méthodes déterministes sont utilisées en dimension 1 voire 2, avec une géométrie assez simple).

Ce sont les principales raisons qui font des *méthodes stochastiques ou Monte-Carlo* une alternative très intéressante et nécessaire aux méthodes déterministes. Dans notre cadre de transport de particules neutres, l'utilisation de méthodes de Monte-Carlo sera naturelle puisque tous ses paramètres sont directement donnés comme des quantités probabilistes régissant la vie des particules. Les méthodes de Monte Carlo ont l'avantage d'être pratiquement insensibles à la complexité géométrique et à la dimension de l'espace des phases. La simulation de ces méthodes est proche de la physique des phénomènes, ce qui permet de pouvoir visualiser directement et comprendre le comportement des particules dans le domaine d'étude considéré.

Lorsque l'on utilise des méthodes de Monte-Carlo, dans la résolution de ces problèmes, deux types de difficultés sont rencontrés:

- le libre parcours moyen des particules est relativement petit (cas faisant intervenir un grand nombre de collisions de particules) ou le taux d'absorption est très grand par rapport au taux de diffusion (milieu absorbant). On parle alors de problèmes "opaques".
- les solutions sont recherchées dans des régions de peu d'importance car peu accessibles (grande distance et forte absorption par rapport aux sources de particules).

Ces difficultés imposent, le plus souvent, l'utilisation de techniques de réduction de variance si l'on souhaite obtenir de résultat raisonnablement précis. Cette thèse propose une méthode de construction automatique d'une telle méthode de réduction de variance.

Elle est organisée de la façon suivante. Dans un premier chapitre, nous présentons des équations de transport de particules, en précisant la signifi-

tion physique des paramètres. Nous montrons comment, en pratique, on utilise l'équation de transport en discrétisant le domaine d'énergie en un nombre fini de groupes. Nous expliquons ensuite comment réinterpréter les équations de transport à l'aide d'une équation différentielle aléatoire à sauts. Les paramètres des lois des processus de sauts sont reliés à ceux de l'équation de transport et la solution de l'équation de transport sera alors exprimée comme l'espérance d'une fonctionnelle du processus de saut.

Dans le deuxième chapitre nous présentons la mise en oeuvre de la méthode de simulation à l'aide des processus markoviens. On montre pourquoi, certains types de simulation classique permettent de réduire la variance des calculs de neutronique, et donc d'accélérer la convergence de la méthode. Nous introduisons de plus la technique centrale et classique de fonction d'importance et expliquons la méthodologie générale de notre algorithme.

Le troisième chapitre est consacré à la mise en oeuvre de cette technique dans le cadre monoénergétique et le quatrième au cas multigroupe en énergie. On compare, en particulier, les méthodes couramment utilisées avec celle proposée dans notre étude.

Chapitre 1

Propriétés des Équations de transport

1.1 Équation de transport : le modèle physique

Cette section est consacrée à des rappels sur l'approche physique de l'équation de transport. Le comportement d'un système de particules interagissant avec un milieu peut être caractérisé par une distribution dépendant de l'espace, l'énergie (ou la vitesse) et le temps. Cette densité de particule est une solution d'une équation de transport (voir [4], [19], [13]). Ce travail étant consacré à l'étude de neutrons, nous avons restreint notre présentation à ce cas.

Un neutron est représenté à un instant t , par sa position $\vec{x} \in \mathcal{D}$ (où \mathcal{D} est le domaine d'étude) et sa vitesse \vec{v} , ($v = |\vec{v}|$).

En neutronique on a l'habitude de paramétrer le vecteur \vec{v} , par son énergie cinétique $E = \frac{1}{2}mv^2$ et le vecteur unitaire $\vec{\Omega}$ de la sphère unité de \mathbf{R}^3 , S , donnant la direction de la vitesse (voir fig. 1.1) :

$$\vec{\Omega} = \frac{\vec{v}}{v}.$$

Notons que la connaissance de la norme de la vitesse v est équivalente (dans le cas des neutrons) à celle de l'énergie cinétique E . On aura parfois besoin de passer de la représentation en v à celle en E , dans ce cas on notera :

$$E(v) = \frac{1}{2}mv^2, \text{ et } v(E) = \sqrt{2mE}.$$

Introduisons les notations suivantes:

- $N(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$ la *densité de neutrons* à la position \vec{x} , de direction $\vec{\Omega}$, d'énergie E au temps t ,
- $\vec{n}(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) = \vec{v}N(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$ le *courant angulaire*,
- $\psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) = vN(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t)$ le *flux*.

La *section efficace* est un paramètre central du modèle. Nous noterons $\sigma_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)$ la section efficace totale de collision d'un neutron de position \vec{x} et de direction $\vec{\Omega}$ et d'énergie E . C'est la probabilité d'interaction d'un neutron avec le milieu par *unité de distance parcourue*. L'inverse de σ_t s'interprète comme le libre parcours

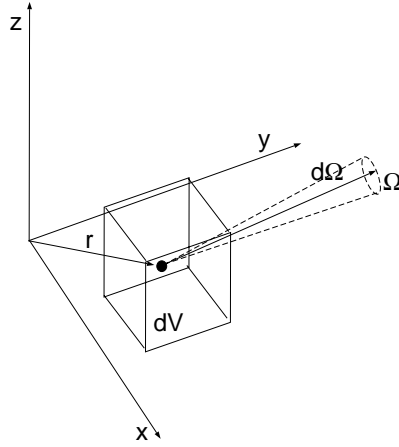


FIG. 1.1 – Le neutron dans son système de coordonnées.

moyen du neutron. Ainsi, la probabilité qu'un neutron n'entre pas en collision dans une période de temps Δt , supposée petite, est donné par :

$$1 - \sigma_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)v\Delta t. \quad (1.1)$$

Notez l'apparition de v dans cette formule : localement le temps de saut suit une loi exponentielle de paramètre $\lambda_t = \sigma_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)v$.

La section efficace totale σ_t est la somme de la section efficace de collisions neutrons-noyaux $\sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)$ (diffusions élastiques, diffusions inélastiques, captures radiatives, fissions, etc...) et de la section efficace d'absorption $\sigma_a(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)$.

Lors d'un choc qui ne correspond pas à une absorption, le saut de la vitesse du neutron est décrit par sa *loi de saut* :

$$k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)d\vec{\Omega}dE.$$

k_r qui représente la probabilité qu'un neutron subissant un choc de type r , au point \vec{x} , de direction $\vec{\Omega}'$ et d'énergie E' , ressorte dans un angle solide $d\vec{\Omega}$ autour de $\vec{\Omega}$ et dans l'intervalle d'énergie dE autour de E .

Remarque 1 Noter que si l'on cherche à décrire la transition en $\vec{v} = (v, \vec{\Omega})$ la transition doit être alors décrite par le noyau de transition :

$$\bar{k}(\vec{x}, \vec{v}' \rightarrow \vec{v}),$$

\bar{k}_r étant définie par la relation :

$$\bar{k}(\vec{x}, \vec{v}' \rightarrow \vec{v})dv = k(\vec{x}, \frac{\vec{v}'}{v'}, E(v') \rightarrow \frac{\vec{v}}{v}, E(v))dE(v),$$

où $E(v) = \frac{1}{2}mv^2$.

Cette remarque s'avérera utile pour faire le lien avec la construction mathématique classique du processus sous jacent que l'on fait naturellement en considérant le couple (\vec{x}, \vec{v}) et l'approche physique faisant plutôt intervenir $(\vec{x}, E, \vec{\Omega})$.

Les sections efficaces σ_a , σ_s et la fonction de saut k sont des caractéristiques physiques du milieu. Elles sont décrites dans des banques de données, constituées à partir de données expérimentales ou de modélisations physiques.

1.1.1 Les équations de transport: l'approche physique

Nous allons maintenant présenter les équations régissant le comportement de la densité des particules dans le matériau.

L'équation directe

L'équation de Boltzmann linéaire directe, ou équation de transport prend la forme suivante ([4], [13], [19]), avec les relations implicites $v = v(E)$, $\vec{v} = v(E)\vec{\Omega}$ et $v' = v(E')$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} N(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_x N(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) + v\sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)N(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \\ = \int v' N(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega}' dE'. \end{aligned}$$

Remarque 2 Cette équation est obtenue en utilisant le principe de conservation de la masse totale des neutrons sortants des collisions. En effet, le membre de gauche représente les termes de dissipation des neutrons :

- le premier terme $\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_x N$, représente la somme des contributions de la variation de la densité de neutrons due au temps, et celle due au mouvement des neutrons par le transport,
- le deuxième terme $-v\sigma N$, représente l'atténuation due aux neutrons disparaissant dans les collisions.

La somme de ces deux termes est égale au terme source :

$$\int v' \sigma' k N' dE'$$

avec ($N' = N(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t)$), qui représente les neutrons provenant des réactions de collisions. L'équation de transport traduit, ainsi, l'égalité de ces deux termes.

Nous retrouverons dans la section 2 cette équation à partir de la modélisation probabiliste microscopique de la dynamique des particules.

Dans les applications en neutronique on utilise souvent l'équation de transport pour le flux neutronique donné par :

$$\psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = v(E)N(\vec{x}, \vec{\Omega}, E).$$

On obtient alors, l'équation :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) + \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \\ = \int \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', t) \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega}' dE'. \end{aligned}$$

L'équation adjointe

Une autre forme de l'équation de transport sera utilisée, l'équation adjointe que nous introduisons comme suit. Soit le produit scalaire sur l'espace $L^2(\mathcal{D} \times \mathcal{V})$:

$$(\Psi, \Phi) = \int \Psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \Phi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) d\vec{x} d\vec{\Omega} dE,$$

L^* est dit opérateur adjoint de L , si pour toutes fonctions Φ^* et Ψ de \mathbf{L}^2 , on a :

$$(L\Psi, \Phi^*) = (\Psi, L^*\Phi^*). \quad (1.2)$$

Notons L l'opérateur de transport :

$$\begin{aligned} L\Psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) = & \\ & \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \Psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \Psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & - \int \int \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E') k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) \Psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE', \end{aligned}$$

avec cette notation l'équation de transport se réécrit $LN = 0$. La définition formelle de l'opérateur conduit à définir L^* par :

$$\begin{aligned} -L^*\Psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) = & \\ & - \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, v, t) - v\sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \Psi^*(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & + \int \int \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) k(\vec{x}, \vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E') \Psi^*(t, \vec{x}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' \end{aligned}$$

L'équation de transport adjointe s'écrit ([4], [27]) alors :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) + \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \Psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, t) \\ & = \int \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) k(\vec{x}, \vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E') \Psi^*(t, \vec{x}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' \quad (1.3) \end{aligned}$$

avec des conditions aux limites adaptées au problème. On verra au chapitre 2.3 qu'une solution de cette équation adjointe permet de construire une fonction d'importance pour le processus.

Remarque 3 De même que précédemment, cette équation peut être obtenue en utilisant le principe de conservation de la masse totale des neutrons entrants dans les collisions.

Conditions aux limites

Pour qu'un problème du type instationnaire soit bien posé, il faut se donner une condition initiale, $\psi(t = 0, \cdot) = \psi_0$ et des conditions aux limites.

Considérons l'équation de transport, avec condition initiale, sur le domaine d'étude $\mathcal{D} \times \mathbf{R}^3$, où le domaine \mathcal{D} admet une frontière notée Γ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla_x \Psi + \sigma \Psi - \int \sigma' \Psi' &= 0 \text{ pour } (x, v) \in \mathcal{D} \times \mathbf{R}^3 \quad (1.4) \\ \Psi(0, \cdot) &= g \end{aligned}$$

Pour que le problème 1.4 soit bien posé, il convient de se donner une condition pour tout couple (\vec{x}, \vec{v}) tel que \vec{x} est sur la frontière Γ et tel que :

$$\vec{v} \in Z_x = \{ \vec{v} \mid \vec{n}_x \cdot \vec{v} \geq 0 \}$$

sachant que l'on note \vec{n}_x la normale en \vec{x} à Γ dirigée vers l'intérieur. Nous allons présenter ici seulement les 3 types de conditions aux limites que l'on rencontre dans la pratique :

1. Condition absorbante :

$$\Psi(t, \vec{x}, \vec{v}) = 0, \quad \vec{x} \in \Gamma, \vec{v} \in Z_x$$

2. Condition de réflexion :

$$\Psi(t, \vec{x}, \vec{v}) = \Psi(t, \vec{x}, \vec{v} - 2\vec{n}_x(\vec{n}_x \cdot \vec{v})), \quad \vec{x} \in \Gamma, \vec{v} \in Z_x$$

3. Condition de flux entrant imposé :

$$\Psi(t, \vec{x}, \vec{v}) = h(\vec{x}, \vec{v}), \quad \vec{x} \in \Gamma, \vec{v} \in Z_x$$

où h est une fonction positive donnée.

Les équations stationnaires

La forme dite "stationnaire" des équations de transport directe et adjointe est obtenue en supposant que la densité neutronique ne dépend pas du temps.

L'équation directe stationnaire prend donc la forme :

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & = \int \int \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega}' dE' \end{aligned} \quad (1.5)$$

et l'équation adjointe stationnaire :

$$\begin{aligned} & -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & = \int \int \sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) k^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E') \psi^*(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' \end{aligned} \quad (1.6)$$

Remarque 4 Les caractéristiques souvent très différentes des matériaux mis en jeu dans le problème à traiter, font que les paramètres dans l'équation de transport varient beaucoup (sections efficaces, réactions possibles,...) suivant les matériaux que traverse le neutron.

Lorsque nous étudions un domaine composé de plusieurs matériaux, nous subdivisons ce domaine en zones de matériaux homogènes, et nous appliquons l'équation de transport à chaque zone en restreignant les conditions initiales du problème respectivement à chaque zone, et en ajoutant un terme de source dû aux particules provenant des zones voisines. Nous prenons en compte dans chaque zone les particules issues, soit des conditions initiales, soit d'une source extérieure, soit des autres mailles. Nous traitons alors le transport de ces particules jusqu'à une nouvelle frontière. Autrement dit nous résolvons simultanément pour chaque zone l'équation de transport avec toutes ces conditions jusqu'à la frontière, ce qui constituera les conditions initiales des zones voisines.

Nous pouvons d'après ce principe découper en autant de sous zones que nous voulons pour résoudre l'équation de transport. Ce sous-découpage sera souvent fait dans des géométries simples à traiter (cube, sphère, cylindre, ...), auxquelles on donnera le nom de *mailles*.

Limitations de l'équation de transport

Les principales limitations de l'équation de transport sont les suivantes (voir [4] pour plus de précisions) :

- Les sections efficaces et leur variation en fonction principalement de l'énergie du neutron, sont compliquées, et mal connues.
- Les dispositions matérielles et géométriques sont aussi souvent complexes, ce qui rend difficile la résolution de l'équation de transport.
- On utilise souvent aussi des approximations dans l'équation de transport de façon à rendre sa résolution possible (résolution 1D ou 2D, utilisation de symétries sphériques, cylindriques, mise en groupe de l'énergie, etc...).

Nous avons supposé qu'à tout moment la position et l'énergie du neutron sont parfaitement connues. Cependant la relation de Heisenberg prouve, qu'il n'est possible de connaître les paramètres qu'avec une précision telle que $\Delta x \Delta p \simeq h$ (avec x la position, p la quantité de mouvement, h constante de planck). En général cette précision sera suffisante, mais pour *des neutrons du domaine des basses énergies*, la quantité de mouvement est très petite, et on ne peut pas localiser les neutrons de façon acceptable. On ne pourra donc utiliser l'équation du transport sous sa forme développée ici. Mais là encore, une quantité négligeable de neutrons notamment dans un réacteur nucléaire sont dans une zone de basse énergie, ce qui nous permet d'obtenir des résultats assez précis.

En dérivant les équations de transport, nous travaillons sur des *valeurs probables* ou moyennes de densité de neutrons, et les écarts possibles de ces valeurs moyennes ne sont pas prises en compte. En effet, en général ces écarts seront relativement faibles, et même les légères variations des paramètres de sections efficaces qui se produisent au cours du temps par exemple dans un réacteur nucléaire, ont un effet négligeable sur les résultats obtenus par ces valeurs probables. Cependant, il existe des situations où la différence de comportement ne peut plus être négligée. En particulier des écarts importants se produisent lors de la phase de démarrage d'une réaction nucléaire, surtout avec une source faible. Le système est amené alors au delà de sa phase critique, et des événements rares alors apparaissent plus fréquemment. C'est le cas des collisions entre neutrons que l'on a négligé, mais dans la phase de surcriticalité du système la densité de neutrons par cm^3 devient telle dans certaines zones, que nous devons prendre ces collisions en compte. Cela nous amène alors à une équation de transport de type équation de Boltzmann, avec des termes de collisions non linéaires modélisant les collisions de n neutrons.

Néanmoins, le fait de négliger les réactions entre neutrons dans l'équation de transport est parfaitement justifié. En effet, même dans un réacteur thermal où la densité de neutrons avoisine les 10^{11} neutrons par cm^3 , elle est moindre que la densité de l'ordre de 10^{22} particules par cm^3 dans les matériaux solides. Les réactions entre neutrons sont alors négligeables par rapport à celles entre neutrons et noyau. Comme conséquence de cette approximation, nous pouvons dériver une équation de transport linéaire plus simple et plus facile à résoudre.

Enfin on peut évoquer les *neutrons retardés*, ce sont des neutrons qui sont émis par les noyaux des matériaux assez longtemps après une collision. Ils n'entrent donc pas dans le cadre de notre modélisation des sections efficaces.

En général, ils pourront être considérés comme une simple diffusion ou fission si la différence de leur déplacement réel est relativement faible par rapport à leur déplacement en cas de réaction non retardée.

1.1.2 Mise en groupe de l'équation de transport

Un traitement possible de l'équation de transport consiste à discrétiser les valeurs d'énergies en *groupes d'énergies*. Dans les sections précédentes nous avons considéré l'équation de transport avec une énergie qui prend ses valeurs dans \mathbf{R}^+ . En pratique, on fait souvent l'hypothèse simplificatrice que l'énergie prend ses valeurs dans un nombre fini G de "groupes" (voir [27] [19]):

$$[E_0, E_1[, \dots, [E_{g-1}, E_g[, \dots, [E_{G-1}, E_G].$$

A l'intérieur de l'intervalle d'indice g , on cherche une approximation ψ_g de la fonction ψ sur les intervalles d'énergie g :

$$\forall E \in [E_{g-1}, E_g], \quad \psi(t, \vec{x}, E, \vec{\Omega}) = f_g(E) \psi_g(t, \vec{x}, \vec{\Omega}), \quad (1.7)$$

où la fonction $f_g(E)$, appelée *spectre partiel*, d'indice g est choisie d'après les caractéristiques physiques du milieu et $f_g(E)$ est supposée normalisée ($\int_{E_{g-1}}^{E_g} f_g(E) dE = 1$).

L'équation multigroupe directe

En cherchant une solution de la forme (1.7) de l'équation de transport et en intégrant l'équation de transport sur $[E_{g-1}, E_g[$ par rapport à l'énergie, nous obtenons (voir [27]) pour l'équation directe :

$$\begin{aligned} & \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} \frac{f_g(E)}{v(E)} dE \right] \frac{\partial \psi_g}{\partial t}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_g(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) + \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} \sigma(t, \vec{x}, E, \vec{\Omega}) f_g(E) dE \right] \psi_g(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) \\ & = \int_S \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}', t) \left\{ \int_{E'_0}^{E'_G} \sigma(t, \vec{x}, E', \vec{\Omega}') f_{g'}(E') \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} k(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) dE \right] dE' \right\} d\vec{\Omega}' \end{aligned}$$

On introduit alors les notations suivantes :

1. $\int_{E'_0}^{E'_G} = \sum_{g'=1}^G \int_{E_{g'-1}}^{E_{g'}}$
2. $k(g', \vec{\Omega}' \rightarrow g, \vec{\Omega}/g', \vec{\Omega}') = \int_{E_{g'-1}}^{E_{g'}} \sigma(t, \vec{x}, E', \vec{\Omega}') f_{g'}(E') \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} k(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) dE \right] dE'$: la section de renvoi partielle de groupe à groupe.
3. $\sigma_g(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} \sigma(\vec{x}, E, \vec{\Omega}) f_g(E) dE \right]$: la section efficace totale de groupe.
4. $\frac{1}{v_g} = \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} \frac{f_g(E)}{v(E)} dE \right]$: la vitesse harmonique "moyenne" de groupe.

On obtient donc ainsi, le système d'équations dont les inconnues sont $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_G$:

pour tout $g \in [1, \dots, G]$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial \psi_g}{\partial t}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_g(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) + \sigma_g(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) \psi_g(t, \vec{x}, \vec{\Omega}) = \\ = \sum_{g'=1}^G \int_S \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}', t) k(g', \vec{\Omega}' \rightarrow g, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}'. \end{aligned}$$

Pour séparer la coordonnée d'angle et celle de l'énergie, on pose alors:

$$P_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}') = \int_S k(\vec{x}, g', \vec{\Omega}' \rightarrow g, \vec{\Omega}/g', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}, \quad (1.8)$$

$$k_{g',g}(\vec{x}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{k(\vec{x}, g', \vec{\Omega}' \rightarrow g, \vec{\Omega}/g', \vec{\Omega}')}{P_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}')} . \quad (1.9)$$

On obtient le système d'équations de transport multigroupe :

$$\begin{aligned} \forall g \in [1, \dots, G] \\ \frac{1}{v_g} \frac{\partial \psi_g}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_g + \sigma_g \psi_g \\ = \sum_{g'=1}^G \int_S \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}', t) P_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}') k_{g',g}(\vec{x}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}'. \quad (1.10) \end{aligned}$$

Remarque 5 On suppose souvent que $P_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}')$ ne dépend pas de \vec{x} et $\vec{\Omega}'$. C'est une hypothèse que nous ferons par la suite dans les applications.

L'équation multigroupe adjointe

On peut aussi définir de la même façon que pour le transport direct, le système d'équations de transport multigroupe adjoint (voir [27]).

$$\begin{aligned} \forall g \in [1, \dots, G] \\ -\frac{1}{v_g} \frac{\partial \psi_g^*}{\partial t} - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_g^* + \sigma_g^* \psi_g \\ = \sum_{g'=1}^G \int_S \psi_{g'}^*(\vec{x}, \vec{\Omega}', t) k^*(g, \vec{\Omega} \rightarrow g', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \quad (1.11) \end{aligned}$$

Avec :

$$k^*(g, \vec{\Omega} \rightarrow g', \vec{\Omega}') = \left[\int_{E_{g-1}'}^{E_{g'}} f_{g'}(E') \left[\int_{E_{g-1}}^{E_g} \sigma(\vec{x}, E, \vec{\Omega}) k^*(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') dE \right] dE' \right]$$

De même on utilise la formule de probabilité de Bayes pour séparer la coordonnée d'angle et celle de l'énergie:

$$P_{g' \rightarrow g}^*(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \int_S f^*(\vec{x}, g, \vec{\Omega} \rightarrow g', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (1.12)$$

$$k_{g',g}^*(\vec{x}, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') = \frac{k^*(\vec{x}, g, \vec{\Omega} \rightarrow g', \vec{\Omega}')}{P_{g' \rightarrow g}^*(\vec{x}, \vec{\Omega})} \quad (1.13)$$

Et on obtient :

$$\begin{aligned} \forall g \in [1, \dots, G] \\ -\frac{1}{v_g} \frac{\partial \psi_g^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} - \vec{\Omega} \vec{\nabla} \psi_g^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) + \sigma_g^* \psi_g^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) \\ = \sum_{g'=1}^G \int_S \psi_{g'}^*(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) P_{g' \rightarrow g}^*(\vec{x}, \vec{\Omega}) k_{g, g'}^*(\vec{x}, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'. \end{aligned} \quad (1.14)$$

1.2 Équation de transport : Approche stochastique

Dans cette section nous nous intéressons aux processus stochastiques permettant de représenter la solution de l'équation de transport et de construire une méthode de Monte Carlo adaptée. Nous ferons quelques rappels sur la théorie des processus de Markov puis nous construirons le processus de transport. Enfin nous relierons les équations de transport au processus ainsi construit.

Rappel sur les processus de Markov

Les principes de la mécanique nous enseignent que si une particule matérielle se meut dans un champ de forces, l'avenir de la trajectoire ne dépend de la trajectoire passée que par la position et la vitesse à l'instant présent. La notion de processus de Markov est la transposition probabiliste de la même idée. Un système dont l'évolution dépend du hasard est un *processus de Markov* si la loi de probabilité qui gouverne les états futurs du système ne dépend du passé que par l'état présent.

Soit Ω un espace et \mathcal{A} une tribu, sur lequel on a défini une probabilité \mathbf{P} . Soit un ensemble F muni d'une tribu \mathcal{F} , on dira qu'une application Z de $\mathbf{R}_+ \times \Omega \rightarrow F$ est un *processus stochastique* si pour $t \geq 0$ fixé $\omega \rightarrow Z_t(\omega)$ est une application mesurable (ou variable aléatoire) de F . On notera $\mu_t(dx)$ la loi de la variable aléatoire Z_t pour un t fixé.

Définition 1 *Un processus $(Z_t; t \geq 0)$ à valeurs dans (F, \mathcal{F}) est un Processus de Markov, si pour tous temps $t, u \geq 0, \forall B \in \mathcal{F}$,*

$$\mathbf{P}(Z_{t+u} \in B / Z_s, s \leq t) = \mathbf{P}(Z_{t+u} \in B / Z_t) \quad \mathbf{P}p.s. \quad (1.15)$$

(\mathbf{P} p.s. = \mathbf{P} presque sûrement).

Cette définition est équivalente à la proposition suivante :

Proposition 1 *Si \mathbf{E} désigne l'espérance, un processus $(Z_t; t \geq 0)$ à valeurs (F, \mathcal{F}) est un Processus markovien, si pour tous $t, u \geq 0$, et pour toute fonction f continue et bornée de F dans \mathbf{R}*

$$\mathbf{E}(f(Z_{t+u}) / Z_s, s \leq t) = \mathbf{E}(f(Z_{t+u}) / Z_t) \quad \mathbf{P}p.s.$$

On n'étudiera dans la suite que des processus markoviens homogènes de semi-groupe donné dont voici la définition.

Définition 2 On dit qu'un processus $(Z_t; t \geq 0)$ est un processus de Markov de semi-groupe de transition $(P_t, t \geq 0)$ si, $\forall t \geq 0, P_t$ est une application de $F \times \mathcal{B}$ dans $[0, 1]$ telle que

1. l'application $z \mapsto P_t(z, B)$ est mesurable, pour tous $z \in F, B \in \mathcal{F}$,
2. l'application $B \mapsto P_t(z, B)$ est une probabilité,
3. $P_t P_s = P_{t+s}$, c'est à dire :

$$P_{t+s}(z, B) = \int_F P_t(z, dz') P_s(z', B) = \int_F P_s(z, dz') P_t(z', B),$$

4. pour toute application mesurable, bornée f de F dans \mathbf{R} ,

$$\mathbf{E}[f(Z_{t+h}) / Z_s, s \leq t] = P_h f(Z_t).$$

Remarque 6 La loi d'un processus de Markov homogène $(Z_t, t \geq 0)$ est caractérisé par sa famille de noyaux de transition $(P_t, t \geq 0)$.

1.2.1 Construction du processus markovien de transport

Nous noterons par \vec{X}_t la position à l'instant t de la particule considérée et par \vec{V}_t sa vitesse. Nous allons construire un processus $Z_t = (\vec{X}_t, \vec{V}_t; t \geq 0)$ dont nous verrons qu'il s'agit d'un processus de Markov. Le processus $(Z_t, t \geq 0)$ nous permettra alors de représenter la solution de certaines équations de transport (voir [6], [8]).

Nous simulons un neutron caractérisé par les paramètres suivants: position, vitesse (ou énergie) à un instant donné. Physiquement on sait que la position du neutron varie continuellement. La vitesse est constante sauf en un nombre discret de temps aléatoires (les instants de chocs). La figure 1.2 p16 nous montre un exemple de trajectoire où \vec{X}_i représente les positions des chocs, et les \vec{V}_i les vecteurs vitesses après chocs. Entre les chocs la particule est libre et son

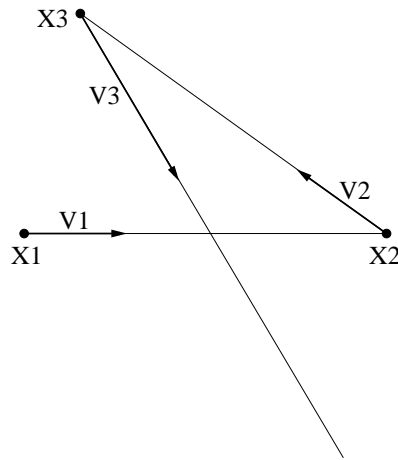


FIG. 1.2 – Trajectoire d'une particule.

déplacement est modélisé par l'équation:

$$\frac{d\vec{X}_t}{dt} = \vec{v}. \quad (1.16)$$

En particulier, avant le premier choc, si $\vec{X}_0 = \vec{x}$ et $\vec{V}_0 = \vec{v}$, alors $\vec{X}_t = \varphi_{x,v}(t) = x + \vec{v}t$.

Pour construire le processus de transport nous aurons besoin des paramètres suivants :

- l'intensité de saut $\lambda(\vec{x}, \vec{v}) = v\sigma(\vec{x}, \vec{v})$, supposée positive, dépendant de la position et de la vitesse de la particule.
- le noyau de transition lors d'un choc au point \vec{x} : $\bar{k}(\vec{x}, \vec{v} \rightarrow \vec{v}')$ qui est la densité de probabilité qu'un processus dans l'état \vec{x}, \vec{v} ressorte d'un saut dans l'état \vec{x}, \vec{v}' .

Ces deux notions d'intensité de saut et de noyau de transition sont directement liées respectivement, à la section efficace de probabilité de collision, et à la fonction de saut de la section précédente.

En vue de simplifier l'exposé et de nous rapprocher du contexte de la simulation nous supposerons que l'on connaît une fonction de trois variables $\phi(\vec{x}, \vec{v}, u)$ (ceci est toujours possible, en principe et nécessaire en pratique) telle que :

Si U suit une loi uniforme sur $[0, 1]^d$ alors la loi de $\phi(\vec{x}, \vec{v}, U)$ est donné par $\bar{k}(\vec{x}, \vec{v} \rightarrow \vec{v}')d\vec{v}'$.

ϕ est un *procédé de simulation* du saut si l'on connaît la position \vec{x} et la vitesse \vec{v} avant le saut.

D'autre part, pour \vec{x} et \vec{v} fixés, considérons la variable aléatoire $T^{\vec{x}, \vec{v}}$ de loi donnée par sa fonction de répartition :

$$\mathbf{P} \left(T^{\vec{x}, \vec{v}} \geq t \right) = e^{-\int_0^t \lambda(\vec{x} + \vec{v}s, \vec{v}) ds}. \quad (1.17)$$

Nous supposerons, de même, que l'on connaît une méthode de simulation de la famille de variable aléatoire $T^{\vec{x}, \vec{v}}$, c'est à dire une fonction $T(\vec{x}, \vec{v}, u)$ telle que :

Si U suit une loi uniforme sur $[0, 1]^d$ alors la loi de $T(\vec{x}, \vec{v}, U)$ est identique à celle de $T^{\vec{x}, \vec{v}}$.

Nous pouvons maintenant construire un processus $\{\vec{X}_t, \vec{V}_t, t \geq 0\}$ à valeur dans $\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3$.

On se donne deux suites indépendantes de variables aléatoires indépendantes: $(U_i, i \geq 0)$ suivant une loi uniforme sur $[0, 1]^d$ et $(U'_i, i \geq 0)$ suivant une loi uniforme sur $[0, 1]^d$. Puis on définit par récurrence les variables aléatoires $(\vec{X}_n, \vec{V}_n, T_n, n \geq 0)$ par :

- $\vec{X}_0 = \vec{x}, \vec{V}_0 = \vec{v}, T_0 = 0$.
- pour $n \geq 0$:

$$\begin{cases} T_{n+1} &= T_n + T(\vec{X}_n, \vec{V}_n, U_{n+1}), \\ \vec{X}_{n+1} &= \vec{X}_n + \vec{V}_n(T_{n+1} - T_n), \\ \vec{V}_{n+1} &= \phi(\vec{X}_n, \vec{V}_n, U'_{n+1}). \end{cases}$$

On définit alors le processus $(\vec{X}_t, \vec{V}_t, t \geq 0)$, sur l'intervalle $[T_n, T_{n+1}[$ par :

$$\begin{cases} \vec{V}_t &= \vec{V}_n, \\ \vec{X}_t &= \vec{X}_n + \vec{V}_n(t - T_n). \end{cases}$$

On notera $(Z_t^{\vec{x}, \vec{v}}, t \geq 0)$ le processus ainsi construit issu de (\vec{x}, \vec{v}) à l'instant 0. On peut alors démontrer le résultat suivant :

Proposition 2 *Le processus $(Z_t^{\vec{x}, \vec{v}}; t \geq 0)$ ainsi défini est un processus markovien.*

Pour la démonstration on pourra se référer à [21]. De plus on peut identifier son "générateur infinitésimal".

Proposition 3 *Soit f une fonction de classe C_b^1 , alors :*

$$\begin{aligned} (Af)(\vec{x}, \vec{v}) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(\mathbf{E} \left(f(Z_t^{\vec{x}, \vec{v}}) \right) - f(\vec{x}, \vec{v}) \right) \\ &= \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}(\vec{x}, \vec{v}) \\ &\quad + \lambda(\vec{x}, \vec{v}) \int_{\Omega(=R^d)} [f(\vec{x}, \vec{v}') - f(\vec{x}, \vec{v})] \bar{k}(\vec{x}, \vec{v} \rightarrow \vec{v}') d\vec{v}' \end{aligned} \quad (1.18)$$

De plus, le processus

$$M_t = f(Z_t^{\vec{x}, \vec{v}}) - \int_0^t Af(Z_s^{\vec{x}, \vec{v}}) ds,$$

est une martingale par rapport à la filtration $(\mathcal{F}_t, t \geq 0)$ avec :

$$\mathcal{F}_t = \sigma \left(Z_s^{\vec{x}, \vec{v}}, 0 \leq s \leq t \right)$$

Notons que l'on peut définir l'adjoint formel de A par la formule :

$$\int (Af)(\vec{x}, \vec{v}) g(\vec{x}, \vec{v}) d\vec{x} = \int f(\vec{x}, \vec{v}) (A^*g)(\vec{x}, \vec{v}) d\vec{x},$$

pour f et g deux fonctions de classe C_b^1 . On obtient alors pour A^* la formule :

$$\begin{aligned} (A^*f)(\vec{x}, \vec{v}) &= -\vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}(\vec{x}, \vec{v}) \\ &\quad + \int \lambda(\vec{x}, \vec{v}') [f(\vec{x}, \vec{v}') - f(\vec{x}, \vec{v})] \bar{k}(\vec{x}, \vec{v}' \rightarrow \vec{v}) d\vec{v}'. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Maintenant que nous avons défini le processus de sauts et ses propriétés, nous pouvons énoncer deux théorèmes qui permettent de relier le processus précédent à des équations de transport.

1.2.2 Formules de Feynman Kac et équations de transport

Équation de Kolmogorov-rétrograde et équation de transport adjointe

Ce premier théorème nous donne une représentation probabiliste de l'équation de transport adjointe (1.3 p.10) [21].

Théorème 1 Soit $c, f \in C_b(\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d)$, et $g \in C_b^1(\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d)$. Alors :

$$u(t, \vec{x}, \vec{v}) = \mathbf{E} \left[e^{-\int_0^t c(Z_s^{\vec{x}, \vec{v}}) ds} g(Z_t^{\vec{x}, \vec{v}}) + \int_0^t e^{-\int_0^s c(Z_r^{\vec{x}, \vec{v}}) dr} f(Z_s^{\vec{x}, \vec{v}}) ds \right],$$

est l'unique solution de classe $C_b^1(\mathbf{R}_+ \times \mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d)$ de l'équation :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \vec{x}, \vec{v}) &= (Au)(t, \vec{x}, \vec{v}) - c(\vec{x}, \vec{v})u(t, \vec{x}, \vec{v}) + f(\vec{x}, \vec{v}), \quad t > 0, \vec{x} \in \mathbf{R}^d, \vec{v} \in \mathbf{R}^d, \\ u(0, \vec{x}, \vec{v}) &= g(\vec{x}, \vec{v}), \quad \vec{x} \in \Gamma, \vec{v} \in \mathbf{R}^d \end{cases}$$

dite équation de Kolmogorov-rétrograde. On peut réécrire cette équation sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \vec{x}, \vec{v}) &= \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} u(\vec{x}, \vec{v}) - [c(\vec{x}, \vec{v}) + \lambda(\vec{x}, \vec{v})] u(t, \vec{x}, \vec{v}) \\ &\quad + \lambda(\vec{x}, \vec{v}) \int u(t, \vec{x}, \vec{v}') \bar{k}(\vec{x}, \vec{v}, \vec{v}') d\vec{v}' + f(\vec{x}, \vec{v}), \\ u(0, \vec{x}, \vec{v}) &= g(\vec{x}, \vec{v}), \quad \vec{x}, \vec{v} \in (\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d). \end{aligned}$$

Remarque 7 Noter que l'on retrouve l'équation adjointe (1.3) en posant $\lambda(\vec{x}, \vec{v}) = v\sigma_s(\vec{x}, \vec{v})$, $c(\vec{x}, \vec{v}) = v\sigma_a(\vec{x}, \vec{v})$ et en remarquant que le noyau de transition est ici noté en vitesse alors qu'il l'est en énergie au début du chapitre.

Equation de Kolmogorov-rétrograde stationnaire Comme pour les équations de transport générales, on obtient une représentation probabiliste des équations de transport stationnaires.

Ce théorème va nous donner une représentation probabiliste de l'équation stationnaire de transport adjointe (1.6 p.11) [21]. Dans ce qui suit on considère que E est un ouvert borné de \mathbf{R}^d de bord supposé régulier noté Γ .

Théorème 2 :

Soit $c, f \in C_b(\mathbf{R}^d \times E)$, et $g \in C_b^1(\mathbf{R}^d \times E)$. Alors, si, soit $c(t, \vec{x}, \vec{v}) \geq \alpha > 0$ soit $\mathbf{P}(\tau^{\vec{x}, \vec{v}} < +\infty) = 1$, et si l'on pose :

$$u(\vec{x}, \vec{v}) = \mathbf{E} \left(e^{-\int_0^{\tau^{\vec{x}, \vec{v}}} c(Z_s^{\vec{x}, \vec{v}}) ds} g(Z_{\tau^{\vec{x}, \vec{v}}}^{\vec{x}, \vec{v}}) + \int_0^{\tau^{\vec{x}, \vec{v}}} e^{-\int_0^s c(Z_r^{\vec{x}, \vec{v}}) dr} f(Z_s^{\vec{x}, \vec{v}}) ds \right),$$

avec $\tau^{\vec{x}, \vec{v}} = \inf \{ t \geq 0, X_t^{\vec{x}, \vec{v}} \in \Gamma \}$, u est l'unique solution de classe $C_b^1(\mathbf{R}_+ \times \mathbf{R}^d \times E)$ de l'équation :

$$\begin{cases} (Au)(\vec{x}, \vec{v}) - c(\vec{x}, \vec{v})u(\vec{x}, \vec{v}) + f(\vec{x}, \vec{v}) = 0, & \vec{x}, \vec{v} \in E \times \mathbf{R}^d, \\ u(\vec{x}, \vec{v}) = g(\vec{x}, \vec{v}), & \vec{x}, \vec{v} \in \Gamma \times \mathbf{R}^d, \end{cases}$$

dite équation de Kolmogorov-rétrograde stationnaire. On peut réécrire cette équation sous la forme :

$$\begin{cases} \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} u(\vec{x}, \vec{v}) - [c(\vec{x}, \vec{v}) + \lambda(\vec{x}, \vec{v})] u(\vec{x}, \vec{v}) \\ \quad + \lambda(\vec{x}, \vec{v}) \int u(\vec{x}, \vec{v}') \bar{k}(\vec{x}, \vec{v}, \vec{v}') d\vec{v}' + f(\vec{x}, \vec{v}) = 0, & \vec{x} \in E, \vec{v} \in \mathbf{R}^d \\ u(\vec{x}, \vec{v}) = g(\vec{x}, \vec{v}), & \vec{x} \in \Gamma, \vec{v} \in \mathbf{R}^d. \end{cases}$$

Remarque 8 Comme dans le cas non stationnaire, on retrouve l'équation adjointe stationnaire (1.6) en posant $\lambda(\vec{x}, \vec{v}) = v\sigma_s(\vec{x}, \vec{v})$ et $c(\vec{x}, \vec{v}) = v\sigma_a(\vec{x}, \vec{v})$.

Un exemple d'équation de transport en neutronique L'un des problèmes typique de la neutronique, qui sera illustré dans les chapitres 3 et 4, est le suivant. On considère un ouvert E de \mathbf{R}^3 . On suppose que le bord $\partial E = \Gamma$ de E se décompose sous la forme $\Gamma = D_0 \cup \bar{D}_0$ (D_0 représente dans les applications le lieu où se trouve le détecteur de neutron. Pour simplifier, on peut supposer que la source de neutron est ponctuelle en x_0 (tous les neutrons partent du point x_0) et la vitesse est distribuée selon une loi connue donnée à l'avance. On note alors :

$$\tau = \inf \{t \geq 0, X_t \notin E\},$$

(on peut souvent prouver que $\mathbf{P}(\tau < +\infty) = 1$). τ est l'instant de sortie du système étudié par le neutron. La quantité d'intérêt est alors, la probabilité que le neutron sorte en l'instant τ en D_0 . L'exemple typique est celui de la traversée d'une plaque. La quantité d'intérêt est alors de la forme :

$$\mathbf{P}(X_\tau \in D_0).$$

On notera $u(\vec{x}, \vec{v})$ la fonction définie par :

$$u(\vec{x}, \vec{v}) = \mathbf{P}(X_{\tau}^{\vec{x}, \vec{v}} \in D_0).$$

On a alors le résultat suivant.

Proposition 4 Si $u(\vec{x}, \vec{v})$ est une fonction "régulière" de l'équation :

$$\begin{cases} Au(\vec{x}, \vec{v}) = 0, & \vec{x} \in E, \vec{v} \in \mathbf{R}^3 \\ u(\vec{x}, \vec{v}) = 1, & \vec{x} \in D_0, \vec{v} \in \mathbf{R}^3 \\ u(\vec{x}, \vec{v}) = 0, & \vec{x} \in \bar{D}_0, \vec{v} \in \mathbf{R}^3. \end{cases}$$

Alors $u(\vec{x}, \vec{v}) = \mathbf{P}(X_{\tau}^{\vec{x}, \vec{v}} \in D_0)$.

Démonstration : Nous donnons ici un schéma de démonstration ignorant complètement les difficultés techniques dues à la régularité de u .

On commence par établir que comme u est régulière :

$$M_t = u(X_t, V_t) - \int_0^t Au(X_s, V_s) ds,$$

est une martingale avant l'instant τ . On en déduit que pour le temps d'arrêt borné $\tau \wedge N$ on a :

$$\mathbf{E}(M_{\tau \wedge N}) = \mathbf{E}(M_0) = u(\vec{x}, \vec{v}).$$

Comme $Au(X_s, V_s) = 0$ avant l'instant τ , on a :

$$u(\vec{x}, \vec{v}) = \mathbf{E}(u(X_{\tau \wedge N}, V_{\tau \wedge N})).$$

Il faut alors vérifier que l'on peut faire tendre N vers l'infini en utilisant la régularité de u , on obtient alors :

$$u(\vec{x}, \vec{v}) = \mathbf{E}(u(X_\tau, V_\tau)) = \mathbf{E}(\mathbf{1}_{\{X_\tau \in D_0\}}),$$

puisque u vaut 1 sur D_0 et 0 ailleurs. ■

Chapitre 2

Mise en oeuvre de la méthode de Monte Carlo

Les résultats du chapitre précédent nous permettent d'écrire les solutions des deux équations de transport (adjointe et directe cf. théorèmes 1 p.18), sous la forme de l'espérance d'une fonctionnelle d'un processus de Markov $Z_t = (X_t, V_t)$, modélisant le comportement des particules :

$$\mathbf{E} [h (X_t, V_t, t \geq 0)].$$

Il suffit alors de simuler un grand nombre N de particules de noyau de collision $k(x, v \rightarrow v')dv'$, avec une probabilité de diffusion $\sigma(x, v)$ et une probabilité d'absorption $c(x, v)$ et de calculer pour chaque tirage aléatoire la fonction $h(X_t(\omega_p), V_t(\omega_p), t \geq 0)$ pour obtenir, en faisant une moyenne sur les encaissements de chaque particule $\frac{1}{N} \sum_{p=1}^N u_p$ une approximation de u .

Nous précisons maintenant les bases permettant d'utiliser la méthode de Monte-Carlo.

2.1 Implémentation de la méthode de Monte-Carlo

Rappelons que la convergence de cette estimation est donné par la loi forte des grands nombres.

Théorème 3 (Loi forte des grands nombres) *Soit $(X_i)_{i \geq 1}$ une suite de variables aléatoires indépendantes suivant toutes la même loi qu'une variable aléatoire X . Si l'on suppose que $\mathbf{E}(|X|) < +\infty$, alors presque sûrement :*

$$\mathbf{E}(X) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(\omega).$$

On notera dans la suite, $\bar{X}_n = \frac{S_n}{n}$, avec $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$. En pratique, la taille de l'échantillon simulé est fini et le théorème précédent n'indique pas à quelle vitesse la quantité \bar{X}_n converge vers $\mathbf{E}(X)$. Cette vitesse est donnée par le théorème de la limite centrale.

Théorème 4 (Théorème de la limite centrale) *Soit $(X_i)_{i \geq 1}$ une suite de variables aléatoires indépendantes suivant toutes la même loi qu'une variable*

aléatoire X . On suppose que $\mathbf{E}(X^2) < +\infty$. On note $m = \mathbf{E}(X)$ et σ^2 la variance de X . Alors $\frac{\sqrt{n}}{\sigma}(\bar{X}_n - \mathbf{E}(X))$ converge en loi vers une variable aléatoire gaussienne centrée réduite G .

Cela implique que $\forall a < b \in \mathbf{R}$,

$$P\left(a \leq \frac{S_n - nm}{\sigma\sqrt{n}} \leq b\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} dx. \quad (2.1)$$

Ce théorème ne comporte aucune autre restriction que d'avoir des moments d'ordre 2. Et l'on voit que le nombre de tirages aléatoires nécessaires pour une précision donnée dépend directement de la variance. On utilise souvent ce théorème pour obtenir un intervalle de confiance.

Intervalle de confiance Nous venons de voir que si $(X_i)_{i \in N}$ est une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi, alors :

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \quad (2.2)$$

est un estimateur de la moyenne de $\mathbf{E}(X)$. De même un estimateur sans biais s^2 de la variance σ^2 est donné par :

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2. \quad (2.3)$$

Le théorème de la limite centrale permet d'affirmer que :

$$P\left(\bar{X}_n - k \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq m \leq \bar{X}_n + k \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-k}^{+k} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \alpha(k). \quad (2.4)$$

Ainsi la valeur moyenne m est élément de l'intervalle centré sur \bar{m} de demi-largeur $k \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ avec une probabilité $\alpha(k)$. Rappelons quelques valeurs de la grandeur α en fonction de k : $\alpha(1) \simeq 0.683$, $\alpha(2) \simeq 0.954$, $\alpha(3) \simeq 0.997$.

Pour appliquer ce résultat on utilise l'estimation s^2 de la variance σ^2 donnée en (2.3) et l'on admet que la probabilité pour que la valeur m soit comprise dans l'intervalle centré sur \bar{m} de demi-largeur $k \frac{s}{\sqrt{n}}$ est proche de $\alpha(k)$:

$$P\left(\bar{m} - k \frac{s}{\sqrt{n}} \leq m \leq \bar{m} + k \frac{s}{\sqrt{n}}\right) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-k}^{+k} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \alpha(k). \quad (2.5)$$

On note alors :

$$s_{\bar{m}} = \frac{s}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \left[\sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n X_i \right)^2 \right]}, \quad (2.6)$$

Cette valeur est proche de l'écart-type de l'estimateur de m , $s_{\bar{m}}$. Cette quantité est souvent rapportée à la valeur moyenne \bar{m} et exprimée en pourcentage. Ce rapport représente la précision de l'estimation de la moyenne, et est notée s_r :

$$s_r = \frac{s_{\bar{m}}}{\bar{m}} = \sqrt{\frac{n}{n-1} \left(\frac{\sum_{i=1}^n X_i^2}{n} - \frac{1}{n} \right)}. \quad (2.7)$$

Efficacité Notons que le temps de calcul par cette méthode de Monte Carlo, est proportionnel au nombre de variables aléatoires générées. Pour comparer les performances de diverses méthodes, on doit prendre en compte le temps de calcul $T \approx nt$, où t est le temps mis pour générer une variable aléatoire. On définit le *facteur de qualité* ou *figure de mérite* de la méthode par :

$$\text{Facteur de Qualité} = \frac{1}{s_{\bar{m}}^2 T} = \frac{1}{s^2 t}. \quad (2.8)$$

Ce facteur, indépendant du nombre de tirages, quantifie d'une manière simple la méthode de Monte Carlo utilisée (on parle également de facteur de défaut qui est l'inverse du facteur de qualité). Pour comparer deux méthodes de Monte Carlo, on calcule pour chacune d'entre elle le facteur de qualité. Celle qui possède le facteur le plus grand est la plus performante.

Pour comparer différentes méthodes, on rapporte le facteur de qualité de ces méthodes à celui d'une des méthodes que l'on prendra comme référence. On définit alors le *gain* d'une méthode de Monte Carlo comme le rapport du facteur de qualité de cette méthode sur le facteur de qualité de la méthode de référence :

$$G_{ain} = \frac{\frac{1}{s_{\bar{m}}^2 T}}{\frac{1}{s_{\bar{m}_{Ref}}^2 T_{Ref}}}.$$

2.2 Variantes de la simulation du processus

Maintenant que nous avons déterminé les quantités à estimer, nous devons présenter la simulation Monte-Carlo des processus stochastiques permettant de les effectuer ([22]).

En particulier, on montre qu'il y a deux types de simulations possibles à partir d'une même équation de transport. Ces deux simulations proviennent de la façon de prendre en compte la réaction d'absorption: elle est soit intégrée directement dans l'opérateur de collision, soit considérée uniquement comme un facteur d'atténuation de la densité de particules. Le choix de la façon de simuler peut avoir une grande importance sur l'efficacité de la méthode.

On notera dans ce qui suit :

- $\sigma_a(x, v)$ la section efficace d'absorption par le milieu des neutrons.
- $\sigma_s(x, v)$ la section efficace de scattering ou de diffusion.
- $\sigma_t(x, v) = \sigma_a(x, v) + \sigma_s(x, v)$ la section efficace totale.

- $p_a(x, v) = \sigma_a(x, v)/\sigma_t(x, v)$ la probabilité d'absorption conditionnellement à un choc,
- $p_s(x, v) = \sigma_s(x, v)/\sigma_t(x, v)$ la probabilité de scattering conditionnellement à un choc.

Bien sûr $p_a + p_s = 1$.

2.2.1 Simulation naturelle

La simulation naturelle peut être décrite de la façon suivante :

1. On simule un instant T_1 qui représente un événement de section efficace σ_t , en utilisant la méthode décrite dans l'équation (1.17).
2. On tire de façon indépendante une variable aléatoire W uniforme sur $[0, 1]$. Si $W \leq p_a(X_{T_1}, V_{T_1})$ alors $(X_t, Y_t) = \delta$, δ étant un point cimetièr, pour $t > T_1$.
3. Sinon (donc avec probabilité $p_s(X_{T_1}, V_{T_1})$) on tire une transition selon la loi $\bar{k}_s(x, v \rightarrow v')dv'$.

Il est bien connu que cette façon de procéder permet de générer un processus selon la loi prescrite. On formalise ceci en rajoutant à l'espace naturel du processus F le point δ et en étendant la définition de \bar{k} à δ :

- $\bar{k}(x, v \rightarrow, v') = p_s(x, v)k_s(x, v \rightarrow v')$, pour $(x, v) \neq \delta$ et $(x, v') \neq \delta$,
- $\bar{k}(x, v \rightarrow, v') = p_a(x, v)$, pour $(x, v) \neq \delta$ et $(x, v') = \delta$,
- $\bar{k}(\delta \rightarrow \delta) = 1$.

2.2.2 Diffusion imposée et conditionnement

Le théorème suivant permet de construire une méthode de réduction de variance pour certaines fonction de $(Z_t, t \geq 0)$. Pour cela on commence par construire un processus $(\bar{Z}_t, t \geq 0)$ en refusant les cas de mort, plus précisément :

- On simule un instant T_1 qui représente un événement de section efficace σ_t , en utilisant la méthode décrite dans l'équation (1.17).
- on tire une transition selon la loi $\bar{k}_s(x, v \rightarrow v')dv'$.

Remarque 9 Notons qu'il est facile de construire un processus selon la loi naturelle, en posant :

$$\begin{cases} Z_t = \bar{Z}_t & \text{Si } \prod_{i=1}^{N_t(\bar{Z})} \mathbf{1}\{W_i \leq p_s(\bar{Z}_{T_i})\} = 1, \\ Z_t = \delta & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec :

- $N_t(\bar{Z})$ qui est le nombre de saut de \bar{Z} avant t ,
- $T_1, \dots, T_{N_t(\bar{Z})}$ étant les instants de sauts,
- $(W_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de \bar{Z} .

Ceci ne fait en effet que reproduire la façon de simuler de Z .

Remarque 10 Cette façon de construire le processus Z se réinterprète en remarquant qu'une particule à une probabilité α de ressortir d'une collision. La façon naturelle de simuler le déplacement des particules avec cet opérateur se décompose en deux cas :

- Premièrement si $\alpha = 1$, dans ce cas la collision est directement simulée suivant les lois correspondant au matériau. Ensuite le transport de la particule est effectué jusqu'à la prochaine collision, et ainsi de suite.
- Deuxièmement si $\alpha < 1$, alors avec la probabilité α la particule ressort de la collision suivant les lois correspondantes, et avec la probabilité $1 - \alpha$ on élimine la particule de la simulation.

On a alors la proposition suivante.

Proposition 5 Soit $h(Z_s, s \leq \tau)$, τ étant un temps d'arrêt presque sûrement fini, une fonction des trajectoires du processus telle que, si à un instant $t < \tau$, $Z_t = \delta$ alors $h(Z_s, s \leq \tau) = 0$. Alors :

$$\mathbf{E}(X) = \mathbf{E}(\bar{X}),$$

avec :

$$\begin{aligned} X &= h(Z_s, s \leq \tau) \\ \bar{X} &= h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) \prod_{i=1}^{N_t(\bar{Z})} \frac{\sigma_s(\bar{Z}_{T_i})}{\sigma_t(\bar{Z}_{T_i})}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

De plus $\text{Var}(\bar{X}) \leq \text{Var}(X)$.

Démonstration : Clairement, comme $h(Z_s, s \leq \tau)$ est nulle si il existe un instant inférieur à τ tel que $Z_t = \delta$ et vue la construction, trajectorielle de Z à partir de \bar{Z} on a :

$$h(Z_s, s \leq \tau) = h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) \prod_{i=1}^{N_t(\bar{Z})} \mathbf{1}_{\{W_i \leq p_s(\bar{Z}_{T_i})\}}.$$

Donc :

$$\mathbf{E}(h(Z_s, s \leq \tau)) = \mathbf{E} \left(h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) \mathbf{E} \left(\prod_{i=1}^{N_t(\bar{Z})} \mathbf{1}_{\{W_i \leq p_s(\bar{Z}_{T_i})\}} \mid \bar{Z}_s, s \leq \tau \right) \right).$$

Mais comme $(W_n, n \geq 1)$ est indépendante de $(\bar{Z}_s, s \geq 0)$ on obtient :

$$\mathbf{E}(h(Z_s, s \leq \tau)) = \mathbf{E} \left(h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) \prod_{i=1}^{N_t(\bar{Z})} \frac{\sigma_s(\bar{Z}_{T_i})}{\sigma_t(\bar{Z}_{T_i})} \right).$$

Il est clair que la variance \bar{X} est plus petite que celle de X puisque $\bar{X} = \mathbf{E}(X \mid \bar{Z}_s, s \geq 0)$ et que l'espérance conditionnelle diminue la variance. ■

Remarque 11 C'est en fait la façon usuelle de simuler l'équation de transport, en utilisant la section efficace totale pour simuler la collision, puis en imposant la diffusion (c'est en particulier le cas dans le code TRIPOLI [25]) en appliquant une correction de poids $\frac{\sigma_s(\bar{Z}(T_i))}{\sigma_t(\bar{Z}(T_i))}$ à chaque nouvelle collision.

Cette méthode est, pratiquement bien meilleure, que la simulation naturelle éliminant les particules ayant fait une réaction d'absorption.

2.2.3 La simulation avec un opérateur de collision markovien

On peut trouver une autre représentation du processus Z_t permettant de réduire la variance. Cette représentation est construite à partir d'un processus qui ne meurt jamais construit de la façon suivante. On construit $(\tilde{Z}_t, t \geq 0)$ processus de section efficace *totale* de saut $\sigma_s(z)$ et de loi de saut $\bar{k}(z, z')dz'$. $(\tilde{Z}_t, t \geq 0)$ est donc un processus de saut markovien de générateur infinitésimal :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}f(\vec{x}, \vec{v}) &= \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}(\vec{x}, \vec{v}) \\ &\quad + v \sigma_s(\vec{x}, \vec{v}) \int_{\mathbf{R}^3} [f(\vec{x}, \vec{v}') - f(\vec{x}, \vec{v})] \bar{k}(\vec{x}, \vec{v} \rightarrow \vec{v}') d\vec{v}'. \end{aligned}$$

On peut alors construire le processus $(Z_t, t \geq 0)$ de la façon suivante :

- on construit la trajectoire $(\tilde{Z}_t, t \geq 0)$,
- on tire une variable aléatoire τ_δ dont la loi conditionnelle sachant $(\tilde{Z}_t, t \geq 0)$ est donnée par :

$$\mathbf{P}(\tau_\delta \geq t | \tilde{Z}_t, t \geq 0) = e^{-\int_0^t V_s \sigma_a(\tilde{Z}_s, \tilde{V}_s) ds}, \quad (2.10)$$

- on définit Z_t par :

$$Z_t = \begin{cases} \tilde{Z}_t & \text{si } t < \tau_\delta, \\ \delta & \text{si } t \geq \tau_\delta. \end{cases}$$

Remarque 12 Pour simuler τ_δ selon la loi prescrite, on peut par exemple tirer V une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ et définir τ_δ comme l'unique solution de l'équation :

$$\int_{\tau_\delta}^{\infty} v \sigma_a(X_s, V_s) ds = -\log(V).$$

Cette représentation, mathématiquement commode, n'est cependant pas celle employée dans les simulations pratiques.

On peut alors montrer que le processus ainsi construit est un processus de Markov homogène de générateur infinitésimal :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}f(\vec{x}, \vec{v}) &= -v \sigma_a(\vec{x}, \vec{v}) f(\vec{x}, \vec{v}) + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}(\vec{x}, \vec{v}) \\ &\quad + v \sigma_s(\vec{x}, \vec{v}) \int_{\mathbf{R}^3} [f(\vec{x}, \vec{v}') - f(\vec{x}, \vec{v})] \bar{k}(\vec{x}, \vec{v} \rightarrow \vec{v}') d\vec{v}'. \end{aligned}$$

Cette construction permet donc de simuler un processus de loi souhaitée. Un argument très voisin de celui exposé dans la section précédente permet de construire une technique de réduction de variance.

Proposition 6 Soit $h(Z_s, s \leq \tau)$, τ étant un temps d'arrêt presque sûrement fini, une fonction des trajectoires du processus telle que, si à un instant $t < \tau$, $Z_t = \delta$ alors $h(Z_s, s \leq \tau) = 0$. Alors :

$$\mathbf{E}(X) = \mathbf{E}(\bar{X}),$$

avec :

$$\bar{X} = h(\tilde{Z}_s, s \leq \tau) e^{-\int_0^\tau \tilde{V}_s \sigma_a(\tilde{Z}_s) ds},$$

De plus $\text{Var}(\bar{X}) \leq \text{Var}(X)$.

Démonstration : Clairement, comme $h(Z_s, s \leq \tau)$ est nulle si il existe un instant inférieur à τ tel que $Z_t = \delta$ et vue la construction, trajectorielle de Z à partir de \bar{Z} on a :

$$h(Z_s, s \leq \tau) = h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) \mathbf{1}_{\{\tau_\delta \leq \tau\}}.$$

Donc :

$$\mathbf{E}(h(Z_s, s \leq \tau)) = \mathbf{E} \left(h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) \mathbf{E} \left(\mathbf{1}_{\{\tau_\delta \leq \tau\}} | \bar{Z}_s, s \leq \tau \right) \right).$$

Mais comme la loi conditionnelle de τ_δ connaissant $(\bar{Z}_t, t \geq 0)$ est donné par (2.10) on obtient :

$$\mathbf{E}(h(Z_s, s \leq \tau)) = \mathbf{E} \left(h(\bar{Z}_s, s \leq \tau) e^{-\int_0^\tau \bar{V}_s \sigma_a(\bar{Z}_s) ds} \right).$$

Comme dans le cas précédent, la variance \bar{X} est plus petite que celle de X puisque c'est une espérance conditionnelle. ■

Remarque 13 Aucune des deux techniques de réduction de variance que nous venons d'exposer n'est toujours meilleure que l'autre.

Cependant, dans tous les exemples que nous avons traités la simulation avec un opérateur de collision markovien avait une variance beaucoup plus réduite que la simulation avec la diffusion imposée.

2.3 Techniques d'échantillonnage préférentiel

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, nous devons calculer l'espérance d'une fonctionnelle h d'un processus stochastique Z . Ce processus suit une loi caractérisée par σ_t, σ_s, k .

La convergence de l'estimateur Monte-Carlo se fait à la vitesse $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, n étant le nombre d'échantillons et σ l'écart type de $h(Z)$. Cette méthode est très coûteuse en temps de calculs. Nous nous concentrerons dans ce chapitre sur des techniques permettant d'améliorer la précision de calculs. Pour cela nous allons chercher à diminuer l'écart type d'où le nom de techniques de réduction de variance.

Une des méthodes les plus performantes de réduction de variance est la technique d'échantillonnage préférentiel ou "importance sampling". Dans la littérature, on trouve de nombreuses formes de fonctions d'importance, cependant les paramètres de ces fonctions sont déterminés empiriquement. Dans ce chapitre qui est le point central de notre étude, nous proposons une nouvelle méthode pour déterminer automatiquement une fonction d'importance acceptable. La plupart des techniques de réduction de variance font intervenir une notion très importante de direction privilégiée de propagation. Nous considérons ici que nous connaissons une direction privilégiée de propagation, nous construisons alors de façon analytique une fonction d'importance adaptée à cette direction. Nous verrons dans un prochain chapitre comment peut être déterminée cette direction privilégiée.

Dans les problèmes que nous avons à traiter on cherche le flux de neutrons dans une partie strictement incluse dans le domaine d'étude. C'est le type de problèmes qui nécessitent plus particulièrement l'utilisation de techniques de

réduction de variance, ceci d'autant plus performante que la région de détermination (ou du détecteur) est petite devant le domaine d'étude. En effet dans ce cas les particules détectées sont en nombre faibles et les statistiques peu précises.

2.3.1 Échantillonnage préférentiel

Supposons que l'on cherche à évaluer:

$$u(t, z) = \mathbf{E}_z [h(t, Z(t))] = \int h(t, z') \mathbf{Q}(t, z') dz',$$

si $Q(t, z)$ est la densité de la loi de $Z(t)$ à l'instant t .

L'idée de la technique d'échantillonnage préférentielle ou biaisage, est de changer la loi du processus, donc son semi groupe, en conservant l'espérance recherchée mais en diminuant la variance.

Comme l'on a: $I > 0$,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_z [h(t, Z(t))] &= \int h(t, z') \cdot \mathbf{Q}(t, z') dz', \\ &= \int h(t, z') I(t, z') \cdot \mathbf{Q}(t, z') / I(t, z') dz', \\ &= \int \tilde{h}(t, z') \cdot \tilde{\mathbf{Q}}(t, z') dz', \\ &= \mathbf{E}_z [\tilde{h}(t, \tilde{Z}(t))], \end{aligned}$$

avec $\tilde{h}(t, z') = h(t, z') I(t, z')$, et $\tilde{\mathbf{Q}}(t, z') = \mathbf{Q}(t, z') / I(t, z')$.

On cherche alors à déterminer une fonction $I(t, z)$, de façon à ce que $\tilde{\mathbf{Q}}$ soit une densité de probabilité de variance moindre que celle de \mathbf{Q} .

2.3.2 Le Biaisage de l'équation de transport

Cas général

Nous allons maintenant appliquer cette modélisation stochastique ainsi que les résultats des théorèmes des deux chapitres précédents, à la forme la plus utilisée de l'équation de transport du flux. Pour cela on pose:

$$\vec{v} = v \vec{\Omega},$$

$$\begin{aligned} c(z) &= v \cdot \sigma_a(\vec{x}, \vec{\Omega}, E), \\ \lambda(z) &= v \cdot \sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \quad \text{l'intensité du saut,} \\ \sigma_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) &= \sigma_a(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E). \end{aligned}$$

L'équation de transport de la densité de particule prend alors la forme suivante:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ = \mathcal{L} \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) + S(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E), \end{aligned} \quad (2.11)$$

avec:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) &= \int l(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', \vec{\Omega}, E) \cdot \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE', \\ l(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', \vec{\Omega}, E) &= \sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', \vec{\Omega}, E).\end{aligned}$$

Dans ce cas l'intensité de saut vérifie la relation :

$$\sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = \int l(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}, E') d\vec{\Omega}, dE,$$

avec

$$\int k(\vec{x}, \vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}, E') d\vec{\Omega}, dE' = 1.$$

Nous allons introduire une fonction d'échantillonnage I dans l'équation. Cette fonction appelée **fonction d'importance**, si elle est bien choisie, pourra diminuer la variance de l'estimateur. Sa détermination sera l'objet de toute la suite de notre étude.

On pose: $\tilde{\psi}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) = I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)$, où $I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)$ est la fonction d'importance, et $\tilde{S}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) = S(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)$. On obtient l'équation dite "biaisée" de transport:

$$\begin{aligned}\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \tilde{\psi} + \tilde{\psi} \cdot [\sigma_t - \left\{ \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial I}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x I \right\} / I] \\ = \int \sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E') \cdot \frac{I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)}{I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E')} \cdot \tilde{\psi}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E') \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}, E) \cdot d\vec{\Omega}, dE' + \tilde{S}.\end{aligned}$$

On cherche alors à évaluer $\tilde{\psi}$ (ici par une méthode de Monte Carlo), et l'on en déduit ψ en posant: $\tilde{\psi}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) = \psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)$.

On remarque que $\tilde{\psi}$ est solution d'une équation de transport, en posant:

$$A(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') = \int I(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}', E', \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega}, dE, \quad (2.12)$$

$$\tilde{k}(\vec{x}, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}, E) = A(\vec{x}, \vec{\Omega}, E')^{-1} \cdot I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}, E), \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) &= \sigma_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) - \\ &\quad \left(\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \right) / I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E),\end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\tilde{\sigma}_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E)}{I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)} \cdot A(\vec{x}, \vec{\Omega}, E), \quad (2.15)$$

$$\tilde{\sigma}_a(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = \tilde{\sigma}_t(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) - \tilde{\sigma}_s(\vec{x}, \vec{\Omega}, E). \quad (2.16)$$

On simule alors le processus \vec{X} avec les paramètres correspondants $(\tilde{k}, \tilde{\sigma}_t, \dots)$, et on calcule $\tilde{\psi}$ à l'aide de cette simulation, puis l'on pose :

$\psi(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) = \tilde{\psi}(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) / I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E)$. En pratique, le nouveau processus \vec{X}

devra diminuer la variance de l'estimateur, être facilement "simulable" et avoir un temps de simulation raisonnable de façon à ce que le produit "**variance * temps de simulation**" soit effectivement réduit.

Remarque 14 Résolution du problème par zones : Dans la pratique, on découpe le domaine de résolution en zones (aussi appelées mailles) où les sections efficaces σ_t , σ_s , σ_a et k sont indépendantes de la position, et dépendent uniquement de la variable vitesse. Concrètement, une zone correspond à un matériau de densité déterminée.

Pour résoudre l'équation de transport dans tout le domaine, avec les conditions aux limites correspondantes, on résout une équation de transport avec des coefficients indépendants de la position, dans chaque zone. On rajoute alors aux conditions aux limites du problème, les conditions de conservation du flux des mailles voisines. C'est à dire que le flux ψ sortant d'une maille M_1 vers une maille M_2 est égale au flux entrant de M_2 vers M_1 . D'où si Γ_{12} représente la frontière entre M_1 et M_2 , $\forall z \in \Gamma_{12} : \psi_{M_1}(z) = \psi_{M_2}(z)$, d'où :

$$\frac{\tilde{\psi}_{M_1}(z)}{I_{M_1}(z)} = \frac{\tilde{\psi}_{M_2}(z)}{I_{M_2}(z)}.$$

En pratique, une particule passant de M_1 à M_2 verra, à cause de ce découpage, son poids multiplié par $\frac{I_{M_2}(z)}{I_{M_1}(z)}$.

Remarque 15 Dans le cadre de l'équation multigroupe en énergie, dans une zone, les sections efficaces ne dépendront que du groupe d'énergie.

Dans le cas monocinétique, elles seront complètement indépendantes de la position et de la vitesse, et donc constantes par zones.

2.3.3 Les fonctions d'importance

Dans cette section, nous nous proposons de choisir des formes particulières de la fonction d'importance, pour pouvoir la déterminer de façon commode.

Pour simplifier les calculs nous considérerons que les sections efficaces des matériaux σ_t , σ_s , σ_a ne dépendent pas de la position et de la direction du vecteur vitesse de la particule dans ce matériau. Elles sont donc constantes par mailles.

Dans la pratique, ceci ne constitue pas une réelle restriction d'application puisque les sections efficaces que nous disposerons, seront en fait constantes par zones de matériau.

D'après [22] [26] [14] [15] la fonction d'importance idéale, c'est à dire celle qui donne une variance nulle, est solution du problème adjoint. Cependant le calcul de cette solution est aussi difficile que celui de l'équation directe. Nous chercherons alors une bonne approximation de l'équation adjointe homogène. Cette approximation est qualifiée de bonne selon deux critères:

1. Elle est proche de la solution de l'équation adjointe.
2. Elle permet une simulation la plus simple possible de l'équation de transport.

Nous pouvons en effet avoir une approximation très proche de la solution de l'équation adjointe, mais qui cependant est pratiquement impossible à simuler.

Remarque 16 Le cas des équations instationnaires Nous ne traiterons pas dans le cadre de notre étude le cas des équations instationnaires, néanmoins nous nous ramènerons pour ces cas à la résolution du cas stationnaire. Rappelons la forme de l'équation adjointe homogène :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial}{\partial t} I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma_t(E) \cdot I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & = \int \sigma_s(E) \cdot I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}', E') \cdot k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE'. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Nous allons chercher des solutions de l'équation adjointe homogène sous la forme :

$$I(t, \vec{x}, \vec{\Omega}, E) \simeq \tilde{I}(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \cdot I_3(t),$$

où $I_3(t) = \exp(\alpha \cdot v \cdot t)$, α valeur propre principale de l'opérateur de transport.

D'après l'équation A.1 p101 ces solutions approchées seront proches des solutions exactes. En remplaçant l'expression de I dans l'équation 2.17 précédente, on obtient:

$$\begin{aligned} & -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \tilde{I}(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) + (\sigma_t(E) + \alpha) \cdot \tilde{I}(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & = \int \sigma_s(E) \cdot \tilde{I}(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') \cdot k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE'. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Le cas stationnaire

Dans le cas de l'équation stationnaire pour simplifier les calculs, nous prendrons une forme générale pour la fonction d'importance. Cette forme proposé déjà par ([25], [11]) permet des solutions assez proches de celles recherchées, simple à mettre en oeuvre et dans certains cas permettent même de trouver la solution exacte... Nous prendrons la fonction d'importance de la forme :

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = e^{\vec{K}(E) \cdot \vec{x}} \Phi_K(\vec{\Omega}, E).$$

Φ_K est une fonction que nous déterminerons.

On pose: $\vec{K}(E) = K(E) \vec{\Omega}_0(E)$, où $\vec{\Omega}_0(E)$ est un vecteur unitaire appelé direction d'intérêt. En effet, il correspond à la direction du gradient de la fonction d'importance.

Nous considérerons dorénavant le cas où $\vec{\Omega}_0(E)$ est fixée. Dans la pratique on se reportera à la section 2.3.4 pour sa détermination.

Nous cherchons cette fonction d'importance de telle façon qu'elle vérifie l'équation adjointe homogène :

$$\begin{aligned} & -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x I(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) + \sigma_t(E) I(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) \\ & = \int \sigma_s(E) \cdot I(\vec{x}, \vec{\Omega}', E') \cdot k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE'. \end{aligned}$$

En remplaçant par l'expression de I , on obtient une équation vérifiée par les fonctions $K(v)$ et $\Phi(\vec{\Omega}, E)$:

$$\Phi(\vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - \vec{K}(E) \cdot \vec{\Omega}} \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE', \quad (2.19)$$

avec :

$$\Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') = \frac{e^{\vec{K}(v') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(v) \cdot \vec{x}}} k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E').$$

Proposition 7 *Il existe une fonction paramètre optimale K et une unique fonction correspondante Φ_K solution de cette équation intégrale précédente.*

De plus, nous proposons une méthode pour trouver ces fonctions K et Φ_K .

Démonstration : La démonstration de cette partie centrale de notre étude est faite dans l'annexe A p101. ■

Le cas monocinétique

Comme nous l'avons vu, nous choisissons une fonction d'importance composée, de la forme:

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}) = I_1(\vec{x}) \cdot I_2(\vec{\Omega}).$$

Ce choix a été proposé dans le code Tripoli ([25], [11]). Pour la fonction $I_1(\vec{x})$, nous prendrons le biaisage exponentiel généralement utilisé (voir [25] [22] [12] [17]):

$$I_1(\vec{x}) = e^{\vec{K} \cdot \vec{x}}.$$

Le but de ce qui suit, et la particularité de notre étude, sera de trouver une forme adéquate et optimale de $I_2(\vec{\Omega})$ pour le biaisage de l'équation de transport, et de déterminer analytiquement le paramètre \vec{K} .

Nous posons $I_2(\vec{\Omega}) = \Phi_K(\vec{\Omega})$, soit :

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}) = e^{\vec{K} \cdot \vec{x}} \Phi_K(\vec{\Omega}),$$

avec \vec{K} paramètre à déterminer, qui dépend du milieu. On pose $K = \|\vec{K}\|$. La fonction $\Phi_K(\vec{\Omega})$ sera une fonction que nous déterminerons par la suite. Nous aurons besoin de définir le vecteur unitaire suivant:

$$\vec{\Omega}_0 := \frac{\vec{\text{grad}}_x I(\vec{x}, \vec{\Omega})}{\|\vec{\text{grad}}_x I(\vec{x}, \vec{\Omega})\|} = \frac{\vec{K}}{\|\vec{K}\|}. \quad (2.20)$$

Nous montrerons dans la suite l'importance de ce vecteur $\vec{\Omega}_0$ dans les techniques de réduction de variance. On l'interprète comme *le vecteur d'intérêt*. De même nous aurons besoin d'explicitier :

$$\frac{\|\vec{\text{grad}}_x I(\vec{x}, \vec{\Omega})\|}{I(\vec{x}, \vec{\Omega})} := \frac{\|\vec{\text{grad}}_x (e^{\vec{K} \cdot \vec{x}})\|}{e^{\vec{K} \cdot \vec{x}}} = K. \quad (2.21)$$

Considérons l'équation stationnaire dont les paramètres $\tilde{\sigma}_s, \tilde{\sigma}_a, \tilde{\sigma}_t, \tilde{k}, \dots$, sont déterminés dans le paragraphe 2.3.2.

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \cdot \text{grad}_x \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}) + \tilde{\sigma}_a(\vec{x}, \vec{\Omega}) \cdot \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}) \\ &= \int_{V^{z_0}} \tilde{\sigma}_s(\vec{x}, \vec{\Omega}') \cdot \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \cdot \tilde{k}(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}' + \tilde{\sigma}_s(\vec{x}, \vec{\Omega}) \cdot \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}). \end{aligned}$$

Notons que si on pose :

$$A_1(\vec{x}) = I_1(\vec{x}) \quad \text{et} \quad A_2(\vec{x}, \vec{\Omega}') = \int_{\vec{\Omega}} I_2(\vec{\Omega}) k(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega},$$

on a alors:

$$A(\vec{x}, \vec{\Omega}') = \int_{\vec{\Omega}} I(\vec{x}, v) \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = A_1(\vec{x}) \cdot A_2(\vec{x}, \vec{\Omega}').$$

Alors les paramètres de l'équation biaisée de transport 2.12 p29 deviennent :

$$\tilde{k}(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = A(\vec{x}, \vec{\Omega}')^{-1} \cdot I(\vec{x}, \vec{\Omega}) \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = A_2(\vec{x}, \vec{\Omega}')^{-1} \cdot I_2(\vec{\Omega}) \cdot k(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}),$$

et :

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_t(\vec{x}, \vec{\Omega}) &= \sigma_t - \vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{\text{grad}}_x I(\vec{x}, \vec{\Omega})}{I(\vec{x}, \vec{\Omega})}, \\ &= \sigma_t - \vec{\Omega} \cdot \frac{I_2(\vec{\Omega}) \cdot \vec{\text{grad}}_x (I_1(\vec{x}))}{I_1(\vec{x}) \cdot I_2(\vec{\Omega})}, \\ &= \sigma_t - \vec{\Omega} \cdot \frac{\|\vec{\text{grad}}_x (I_1(\vec{x}))\|}{I_1(\vec{x})} \cdot \frac{\vec{\text{grad}}_x (I_1(\vec{x}))}{\|\vec{\text{grad}}_x (I_1(\vec{x}))\|}, \\ &\quad \text{d'après (2.20) et (2.21),} \\ &= \sigma_t - K \cdot \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0. \end{aligned}$$

d'où:

$$\tilde{\sigma}_t(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \sigma_t - K \cdot \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0.$$

De même on obtient:

$$\tilde{\sigma}_s(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \frac{\sigma_s}{I(\vec{x}, \vec{\Omega})} \cdot A(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \sigma_s \cdot A_2(\vec{x}, \vec{\Omega}) \cdot I_2(\vec{\Omega})^{-1}.$$

$$\tilde{\sigma}_a(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \tilde{\sigma}_t(\vec{x}, \vec{\Omega}) - \tilde{\sigma}_s(\vec{x}, \vec{\Omega}).$$

La section efficace biaisée $\tilde{\sigma}_t$ nous montre que lorsque la particule aura une direction (représentée par le vecteur vitesse $\vec{\Omega}$) voisine de la direction d'intérêt $\vec{\Omega}_0$, alors la section efficace totale sera petite, et elle sera grande dans le cas contraire. En terme de parcours, le biaisage projette la particule loin si elle est dans la bonne direction, et elle sera pratiquement arrêtée dans le cas contraire. Ce biaisage paraît intéressant, puisque les particules auront tendance à avoir la même histoire (on leur impose une même direction), donc le même poids et

finalemeut leur écart de poids étant réduit, on réduit de même la variance du résultat.

Il reste cependant à déterminer la direction d'intérêt, qui dépend fortement de la configuration géométrique du cas étudié.

Remarque 17 - Si la direction d'intérêt est mal choisie, nous risquons de diriger les particules dans la mauvaise direction, et très certainement d'augmenter la variance. D'où l'importance du choix de la direction d'intérêt.

Le cas multigroupe

Dans ce cas, nous prenons la fonction d'importance de la forme :

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}, g) = I_1(\vec{x}, g) \cdot I_2(\vec{\Omega}, g),$$

avec :

$$I_1(\vec{x}, g) = e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}},$$

et :

$$I_2(\vec{\Omega}, g) = \Phi_{K_g}(\vec{\Omega}),$$

une fonction que nous déterminerons.

En effet, nous faisons de même que pour le flux direct (voir la section 1.1.2 p13) l'approximation multigroupe. Ce qui nous donne :

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}, E) = e^{\vec{K}(E) \cdot \vec{x}} \cdot \Phi_E(\vec{\Omega}, E) = f_g(E) \cdot I_1(\vec{x}, g) = f_g(E) \cdot e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}} \cdot \Phi_{K_g}(\vec{\Omega}),$$

où f_g est le spectre partiel de pondération (voir section 1.1.2 p13).

Les paramètres de l'équation de transport et de la simulation seront déterminés dans le chapitre consacré au multigroupe.

Pour chaque groupe d'énergie g , la direction du vecteur \vec{K}_g ($\Omega_{0,g}$) sera déterminée par un algorithme de plus court chemin comme nous le verrons. C'est le point traité dans la section suivante. On se placera dans le cadre d'un groupe d'énergie fixé, mais il est bien entendu que se sera la même démarche pour tous les groupes d'énergie.

2.3.4 Détermination des directions d'importances

Nous considérons dans cette section que nous avons pu déterminer tous les paramètres des fonctions de biaisage, et notamment le paramètre K , qui dépend uniquement des caractéristiques physiques du milieu.

Il nous reste maintenant à déterminer la direction du vecteur d'intérêt $\vec{\Omega}_0$ pour déterminer complètement la fonction d'importance. C'est l'objet de cette section.

Ici nous prendrons pour simplifier des mailles rectangulaires dans le plan, mais il est bien entendu que tout ce qui suit pourra être généralisé, à des mailles quelconques et en dimension 3.

L'exemple traité est la traversée d'un coude en 2D, immergé dans un milieu opaque (la dimension en z est considérée infinie). Nous envoyons des particules

à l'entrée E de ce coude, et le problème est de connaître la probabilité pour ces particules de traverser ce coude, jusqu'au détecteur (voir fig. 2.2).

Nous avons pris cet exemple général à plusieurs mailles, pour bien comprendre le mécanisme décrit. Nous considérons que toutes les constantes sont connues, et que l'on a calculé les coefficients K pour les deux milieux. Tous les paramètres des fonctions d'importance sont donc connus pour chaque milieu, à l'exception de $\vec{\Omega}_0$.

Comme nous l'avons vu, nous traiterons le type de problèmes où nous cherchons à connaître une réponse du flux dans une partie bien déterminée et strictement incluse dans le domaine d'étude.

Dès lors, la direction d'intérêt ou d'importance étant le gradient de la fonction d'importance (section 2.3.3 p30), devra être portée par le plus court chemin optique jusqu'au détecteur. Elle sera donc déterminée par un simple algorithme de plus court chemin suivant la distance optique.

L'heuristique de la moins grande descente

Comme nous travaillons avec des mailles rectangulaires, il convient de proposer une façon de choisir les directions d'intérêt. Chaque maille a au moins une face privilégiée par laquelle les particules passeront pour rejoindre le détecteur. Nous aurons alors le vecteur d'intérêt dirigé vers cette face. Cette direction pourra avoir un angle maximal possible avec le vecteur normal de cette face (figure 2.1).

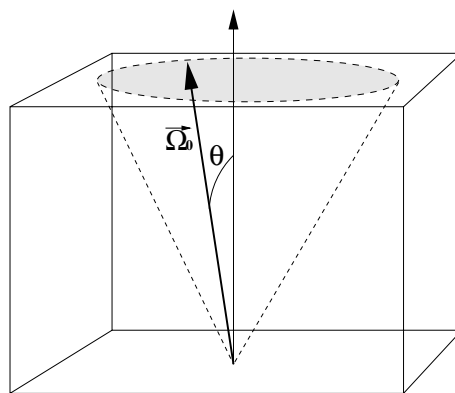


FIG. 2.1 – Représentation des directions d'intérêt dans une maille.

Le principe de cette heuristique¹ est de donner à toutes les mailles une direction d'intérêt telle que cette direction indique la maille voisine de plus grande importance. Voici comment on procède.

Par convention nous dirons qu'un neutron arrivé au détecteur a une importance qui vaut 1. Ceci nous donne alors, la valeur de la fonction d'importance au niveau du détecteur (toutes les importances seront calculées au centre de

1. Une heuristique similaire, "INIPOND", est proposée dans le code Tripoli développé au laboratoire CEA-Saclay ([25], [11]).

chaque face). Ce sera l'importance la plus grande du problème. On en déduit donc la direction d'intérêt des mailles qui possèdent une face sur un détecteur.

Le coefficient K étant connu, on peut alors avoir l'importance en tout point de la maille par la formule:

$$I(x) = \exp(Kx),$$

x étant la distance au détecteur (figure 2.2). (les chiffres sur les figures 2.2, 2.3, 2.4, représentent les importances trouvées au milieu de chaque face des mailles). Il suffit alors de recommencer pour chaque maille voisine de celle que

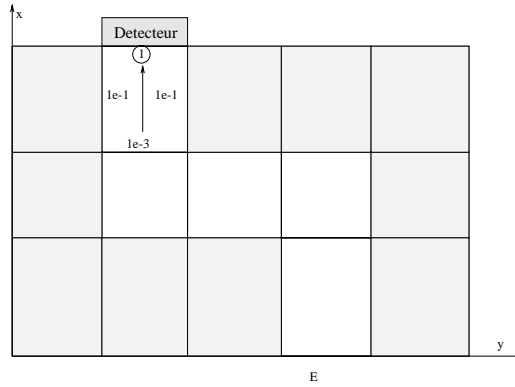


FIG. 2.2 – L'importance au détecteur vaut 1.

l'on vient de déterminer. Ici il y a trois mailles voisines (figure 2.3). De même

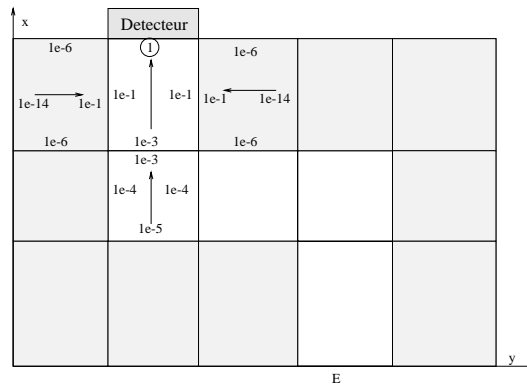


FIG. 2.3 – Détermination des importances des mailles voisines.

on recommence pour toutes les autres mailles voisines, jusqu'à ce que toutes les mailles aient leur fonction d'importance (figure 2.4).

Quand l'une des mailles voisines d'une maille A que nous venons de traiter, a déjà sa fonction d'importance, si l'importance de la maille vers laquelle elle pointe est plus grande que celle de la maille A , alors nous ne changeons pas cette maille voisine, sinon on réinitialise sa fonction d'importance vers la maille A . En général, cette fonction d'importance continue nous permet de traiter des mailles

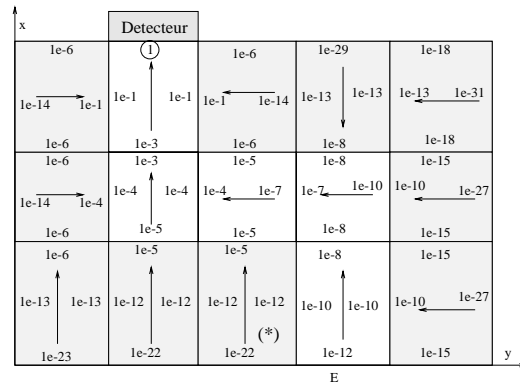


FIG. 2.4 – Détermination des importances par itération.

relativement grandes avec une très grande efficacité. Cependant des exceptions doivent être prises en compte. En effet, on peut voir l'inconvénient de grandes mailles. Par exemple, la maille notée par (*) est trop grande dans la position où elle se trouve dans ce cas (figure 2.4), et le calcul de la direction peut être amélioré en divisant cette maille en deux mailles plus petites (figure 2.5).

Remarque 18 Cette méthode est en fait une méthode de résolution de l'équation adjointe de façon approchée. On remarquera l'extrême rapidité de cette approximation, qui nous donne un ordre de grandeur de la probabilité de traversée du coude (1e-12).

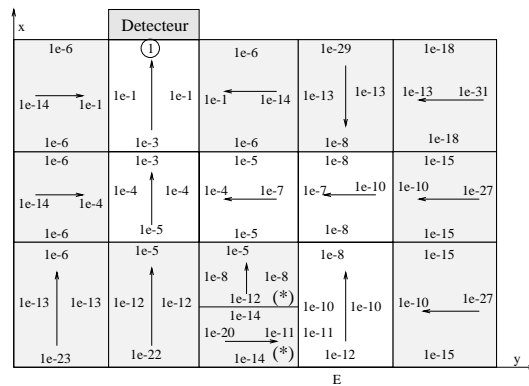


FIG. 2.5 – Amélioration en raffinant certaines mailles.

Chapitre 3

Le cas monoénergétique

Dans ce chapitre nous traitons le cas monoénergétique (la norme de la vitesse reste constante). Ce cas, très utilisé en pratique, permet de grandes simplifications numériques et algorithmiques. Nous mettons en évidence une méthodologie permettant de caractériser complètement une fonction d'importance dont les tests numériques montrent l'efficacité. Nous étudions, ensuite, de façon plus précise le cas isotrope qui présente de nombreuses simplifications ainsi qu'une grande facilité de mise en oeuvre.

3.1 Calcul de la fonction d'importance

Dans cette section nous déterminons une fonction d'importance réduisant de façon importante la variance dans le cas monoénergétique général (anisotrope).

Dans le cas monoénergétique, on suppose que la norme de la vitesse reste constante. La direction de la vitesse est alors repérée par un point de la sphère unité S . Le vecteur unitaire donnant la direction de la vitesse $\vec{\Omega}$ s'exprime en coordonnées sphériques sous la forme (θ, φ) . Nous supposons que les sections efficaces de renvoi ne dépendent que du cosinus entre le vecteur vitesse incident et le vecteur vitesse de sortie (avec un abus de notation évident) :

$$k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = k(\Omega' \cdot \Omega).$$

Nous supposons, de plus, que les sections efficaces de renvoi peuvent être développées en utilisant la base des polynômes de Legendre¹ et nous utiliserons une série tronquée au rang N . k peut donc s'écrire sous la forme :

$$k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} k_l P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}).$$

1. Rappelons que les polynômes de Legendre peuvent s'exprimer sous la forme :

$$P_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (1-x^2)^l,$$

et que $(P_l, l \geq 0)$ constitue une base orthogonale de $L^2(-1, 1]$.

On constate sur cette formule que la loi de transition de la vitesse ne dépend pas de l'angle azimuthal, et plus généralement du repère dans lequel est exprimé le vecteur unitaire porté par la vitesse.

Rappelons que l'équation de transport stationnaire s'écrit dans le cas monoénergétique anisotrope, sans termes sources et en supposant que les sections efficaces ne dépendent pas de la vitesse :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \text{grad}_x \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}) + \tilde{\sigma}_t(\vec{x}) \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}) \\ = \int_S \tilde{\sigma}_s(\vec{x}) \tilde{\psi}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \tilde{k}(\vec{x}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}'. \end{aligned}$$

En général, on cherchera à résoudre cette équation sur une maille bien déterminée, constituée d'un unique matériau. Dans cette maille les sections efficaces seront constantes. C'est la raison pour laquelle tous nos calculs se feront avec des sections efficaces indépendantes de la position.

On sait d'après [22] [26] [14] [15], que la fonction d'importance idéale est la fonction solution de l'équation adjointe de transport, qui s'écrit dans ce cas :

$$-\vec{\Omega} \cdot \text{grad}_x \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}) + \sigma_t \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \int_S \sigma_s \psi(\vec{x}, \vec{\Omega}') k(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'. \quad (3.1)$$

Nous allons chercher une solution à cette équation sous la forme :

$$\psi(\vec{x}, \vec{\Omega}) = e^{\vec{K} \cdot \vec{x}} \Phi_K(\vec{\Omega}), \quad \vec{K} = K \vec{\Omega}_0.$$

Pour un $\vec{\Omega}_0$ fixé, cela revient à déterminer $\Phi_K(\vec{\Omega})$ vérifiant :

$$-K \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0 \Phi_K(\vec{\Omega}) + \sigma_t \Phi_K(\vec{\Omega}) = \int_S \sigma_s \Phi_K(\vec{\Omega}') k(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'.$$

Nous obtenons ainsi une équation intégrale que doit vérifier Φ_K :

$$\Phi_K(\vec{\Omega}) = \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0} \int_S \Phi_K(\vec{\Omega}') k(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'. \quad (3.2)$$

Les résultats de l'appendice A.2 prouvent que cette équation intégrale admet une solution unique (à une constante près). Notons par Φ_K et K l'unique fonction et paramètre vérifiant cette équation. La fonction d'importance que nous proposons sera donnée par :

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}) = e^{\vec{K} \cdot \vec{x}} \Phi_K(\vec{\Omega}). \quad (3.3)$$

Les différents paramètres de l'équation de transport ainsi biaisée peuvent alors s'explicitier simplement (voir la section 2.3.3) :

$$\begin{aligned} A_2(\vec{\Omega}) &= \Phi_K(\vec{\Omega}) \frac{\sigma_t - K \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0}{\sigma_s}, \\ \tilde{k}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) &= \frac{\Phi_K(\vec{\Omega})}{\Phi_K(\vec{\Omega}')} k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0}, \\ \tilde{\sigma}_t(\vec{\Omega}) &= \sigma_t - K \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0, \\ \tilde{\sigma}_s(\vec{\Omega}) &= \sigma_t - K \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0, \\ \tilde{\sigma}_a(\vec{\Omega}) &= 0. \end{aligned}$$

Notons que la section efficace d'absorption biaisée est nulle. Ceci est une indication qui permet de penser que la simulation sera plus efficace car sans dégradation due à la perte de particules.

D'autre part on peut montrer, par un argument d'invariance par symétrie autour de l'axe porté par $\vec{\Omega}_0$, que la fonction $\Phi_K(\vec{\Omega})$ est indépendante de l'angle azimuthal φ ($\vec{\Omega} = (\theta, \varphi)$). Nous allons donc chercher $\Phi_K(\vec{\Omega})$ sous la forme :

$$\Phi_K(\vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \Phi_K^l P_l(\cos(\theta)). \quad (3.4)$$

Dans la suite nous nous placerons dans une repère tel que $\vec{\Omega}_0 = (\theta = 0, \varphi = 0)$. On aura donc $\mu = \cos(\theta) = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0$.

Détermination des fonctions pour la simulation

Nous allons maintenant déterminer une expression explicite de la fonction de biaisage Φ_K solution de (3.2). Pour cela nous allons utiliser la base des harmoniques sphériques (qui constitue une base de $L^2(\mathcal{S})$). Cette base est donnée, pour $l \geq 0$, $m = -l, \dots, l$ et, si $\Omega = (\theta, \varphi)$ en coordonnées sphériques, par :

$$Y_{l,m}(\vec{\Omega}) = (-1)^m i^l \left[\frac{(l+1/2)(l-m)!}{2\pi(l+m)!} \right]^{1/2} e^{im\varphi} P_l^m(\cos(\theta)),$$

les P_l^m désignant les fonctions de Legendre associées, données par, si $0 \leq m \leq l$:

$$P_l^m(\cos(\theta)) = \sin(\theta)^m \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(\cos(\theta)).$$

Rappelons les formules bien connues reliant les harmoniques sphériques et les polynômes de Legendre :

$$P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{i=-l}^{i=l} Y_{l,m}(\vec{\Omega}) Y_{l,m}^*(\vec{\Omega}'),$$

et :

$$Y_{l,0}(\vec{\Omega}) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos(\theta)).$$

En utilisant ces relations, il est facile de prouver que la fonction de collision s'écrit en la développant sur la base des harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned} k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) &= \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} k_l P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \\ &= \sum_{l=0}^N k_l \sum_{m=-l}^{m=l} Y_{l,m}(\vec{\Omega}) Y_{l,m}^*(\vec{\Omega}'), \end{aligned}$$

et que :

$$\begin{aligned}\Phi_K(\theta') &= \sum_{L=0}^{\infty} \Phi_K^L P_L(\cos(\theta')) \\ &= \sum_{L=0}^{\infty} (-i)^L \Phi_K^L \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} Y_{L,0}(\vec{\Omega}'),\end{aligned}$$

avec $\Phi_K^L = \int_{-1}^1 \phi_K(\mu) P_L(\mu) d\mu$. D'autre part, on peut réécrire l'équation (3.2) sous la forme :

$$\begin{aligned}(\sigma_t - K\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0) \Phi_K(\vec{\Omega}) &= \int_S \sigma_s \Phi_K(\vec{\Omega}') k(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \\ &= \int_S \sigma_s \left(\sum_{L=0}^{\infty} (-i)^L \Phi_K^L \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} Y_{L,0}(\vec{\Omega}') \right) \\ &\quad \left(\sum_{l=0}^N k_l \sum_{m=-l}^{m=l} Y_{l,m}(\vec{\Omega}) Y_{l,m}^*(\vec{\Omega}') \right) d\vec{\Omega}' \\ &= \sigma_s \sum_{l=0}^N k_l \Phi_K^l P_l(\cos(\theta)),\end{aligned}$$

Le problème est donc de trouver un scalaire K , et une fonction Φ_K tels que :

$$(\sigma_t - K\mu) \Phi_K(\mu) = \sigma_s \sum_{l=0}^N k_l \Phi_K^l P_l(\mu), \quad (3.5)$$

et :

$$\int_{-1}^1 \Phi_K(\mu) d\mu = 1. \quad (3.6)$$

Cette dernière équation est équivalente à $\Phi_K^0 = 1$.

Remarquons que l'équation (3.5) prouve que ϕ_K est complètement déterminé par la connaissance des $(\Phi_K^l, l = 0, \dots, N)$, puisque :

$$\Phi_K(\mu) = \sigma_s \sum_{l=0}^N k_l \Phi_K^l \frac{P_l(\mu)}{\sigma_t - K\mu}.$$

Notons, de plus, qu'en prenant le produit scalaire de l'équation 3.5 avec $P_l(\mu)$, on obtient, pour $l \leq N$:

$$\sigma_t \Phi_K^l - K \int_{-1}^1 \mu \Phi_K(\mu) P_l(\mu) d\mu = \sigma_s k_l \Phi_K^l.$$

Les relations de récurrence sur les polynômes de Legendre nous donnent :

$$\mu P_l(\mu) = \gamma_1^l P_{l+1}(\mu) + \gamma_2^l P_{l-1}(\mu) \quad (3.7)$$

avec:

$$\gamma_1^l = \frac{l+1}{2l+1}, \quad \gamma_2^l = \frac{l}{2l+1}.$$

On obtient donc les relations permettant de calculer par récurrence les $(\Phi_K^l, l = 0, \dots, N)$ en fonction de K :

$$\begin{cases} \Phi_K^0 &= 1, \\ K\Phi_K^1 &= (\sigma_t - \sigma_s k_0)\Phi_K^0, \\ K\gamma_1^l \Phi_K^{l+1} &= (\sigma_t - \sigma_s k_l)\Phi_K^l - K\gamma_2^l \Phi_K^{l-1}, \quad l = 1, \dots, N-1. \end{cases} \quad (3.8)$$

Nous savons calculer les $(\Phi_K^l, l = 0, \dots, N)$ en fonction de K . Pour déterminer K nous utiliserons l'équation de normalisation, qui traduit que $\int_{-1}^1 \Phi_K(\mu) d\mu = 1$:

$$\sigma_s \sum_{l=0}^N k_l \Phi_K^l \int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu)}{\sigma_t - K\mu} d\mu = 1. \quad (3.9)$$

D'après le corollaire 1 p108, cette dernière équation 3.9 possède une unique solution. Nous utilisons l'algorithme suivant pour calculer K .

Algorithme de résolution numérique Définissons G par :

$$G(K) = \sigma_s \sum_{l=0}^N k_l \Phi_K^l \int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu)}{\sigma_t - K\mu} d\mu.$$

Nous allons résoudre notre système par dichotomie :

- On part d'une valeur arbitraire K ,
- On calcule $\Phi_K^0, \dots, \Phi_K^N$,
- On calcule $G(K)$,
 - Si $G(K) > 1$, alors on diminue K ,
 - Si $G(K) < 1$, alors on augmente K ,
- On recommence l'itération jusqu'à ce que l'on ait approximativement $G(K) = 1$.

Remarque 19 Notons que pour calculer G nous devons évaluer :

$$\int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu)}{\sigma_t - K\mu} d\mu.$$

Ceci ne pose pas de problème puisque l'on connaît une formule explicite des polynômes de Legendre P_l :

$$P_l(x) = 2^{-l} \sum_{m=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} (-1)^m C_m^l C_l^{2l-2m} x^{l-2m}, \quad (3.10)$$

et que l'on peut établir, sans difficultés l'égalité suivante :

$$\int_{-1}^1 \frac{\mu^n}{b - a\mu} d\mu = \frac{1}{b} h_n \left(\frac{a}{b} \right), \quad (3.11)$$

avec :

$$h_n(a) = \frac{1}{a^{n+1}} \left(\frac{1}{a} \log \left(\frac{1+a}{1-a} \right) - 2 \sum_{k=0, k \text{ impair}}^n \frac{a^{k+1}}{k+1} \right).$$

Remarque 20 En posant :

$$\begin{aligned} K' &= \frac{K}{\sigma_t} \\ \sigma'_s &= \frac{\sigma'_s}{\sigma_t} \end{aligned}$$

Les équations précédentes (3.8), (3.9) se réécrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} K' \Phi_K^1 = (1 - \sigma'_s k_0) \Phi_K^0, \\ K' \gamma_1^l \Phi_K^{l+1} = (1 - \sigma'_s k_l) \Phi_K^l, \\ -K' \gamma_2^l \Phi_K^{l-1}, \\ \sigma'_s \sum_{l=0}^N k_l \Phi_K^l \int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu)}{1-K'\mu} d\mu = 1. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \\ \\ \\ l = 1, \dots, N-1, \end{array} \quad (3.12)$$

La fonction d'importance ainsi calculée ne dépend donc que de σ'_s et k_l . Si l'on suppose que σ_s/σ_t et les k_l sont indépendants de la densité ρ , les équations précédentes permettent de prouver l'indépendance de la fonction d'importance Φ_K par rapport à la densité ρ du matériau (voir [19], [22], [3]).

Remarque 21 Résumons les propriétés essentielles de l'algorithme :

1. l'équation (3.9) est facilement résolue par une méthode de point fixe, et nous permet d'obtenir la fonction d'importance angulaire Φ_K .
2. Cette équation est résolue une fois seulement pour chaque matériau.
3. Par construction $\Phi_K(\vec{\Omega})$ est indépendante de la densité ρ .
4. la résolution de cette équation détermine un paramètre K quasi optimal, pour le biaisage donné par :

$$I(\vec{x}, \vec{\Omega}) = e^{K \cdot \vec{\Omega}_0 \cdot \vec{x}} \cdot \Phi_K(\vec{\Omega}),$$

pour un vecteur $\vec{\Omega}_0$ donné.

Remarque 22 La normalisation (3.6) est arbitraire. Le problème précédent, sans utiliser cette normalisation, peut s'écrire comme un problème pseudo-spectral. Il s'agit de trouver $\Phi = (\Phi^0, \dots, \Phi^N) \in (\mathbf{R}^{N+1})^+$ et K vérifiant le

système suivant:

$$\begin{pmatrix} a_d^0 & a_s^0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ a_i^1 & a_d^1 & a_s^1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & a_i^2 & a_d^2 & a_s^2 & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \alpha_i^{N-1} & \alpha_d^{N-1} & \alpha_s^{N-1} \\ \alpha_K^0 & \alpha_K^1 & \cdots & \cdots & \cdots & \alpha_K^{N-2} & \alpha_K^{N-1} & \alpha_K^N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \Phi \\ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ \Phi^0 \end{pmatrix}$$

où :

$$a_d^l = \sigma_t - \sigma_s k_l, \quad a_s^l = -K \gamma_1^l, \quad a_i^l = -K \gamma_2^l,$$

et

$$\alpha_K^l = \sigma_s k_l \int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu)}{\sigma_t - K\mu} d\mu.$$

3.2 L'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision

L'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision est un point important de la simulation :

$$\tilde{k}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \frac{\Phi_K(\vec{\Omega})}{\Phi_K(\vec{\Omega}')} k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}_0}. \quad (3.13)$$

On voit que pour les mêmes raisons que dans le paragraphe précédent, \tilde{k} est indépendante de la densité ρ . Ceci est très important pour la simulation en pratique, car on trouve souvent un même matériau avec plusieurs densités. On peut procéder comme suit:

1. d'abord, par les méthodes classiques d'échantillonnage: la technique de discrétisation consiste à tabuler cette fonction de 2 variables, en un tableau de renvoi. Cette méthode est très rapide et donne une assez bonne approximation du résultat, mais sera néanmoins assez coûteuse en place mémoire. Cependant elle reste très envisageable, grâce aux récents progrès des capacités de mémoire des ordinateurs. Cette méthode sera utilisée pour des développements d'ordre élevé suivant les polynômes de Legendre (> 4), de la fonction naturelle de collision k .
2. une autre technique sera utilisée pour des ordres de développement inférieurs ou égaux à 4:
 - Le vecteur vitesse incident étant connu, on obtient une densité de probabilité à 2 variables du vecteur diffusé. Pour échantillonner cette densité on utilise sa décomposition analytique suivant les polynômes de Legendre pour extraire les probabilités marginales des 2 variables

(les angles θ et φ). On utilise la décomposition suivant les probabilités conditionnelles des deux lois marginales, f_θ : la densité de probabilité sur θ , et $f_{\{\varphi/\theta\}}$: la densité de probabilité conditionnelle de φ sachant θ .

- L'intégrale de ces densités étant strictement croissante, nous pouvons l'inverser assez rapidement par une méthode de point fixe (Newton...).

Les tests ont montré l'efficacité de cette technique malgré le temps requis de calcul.

3. Enfin, on peut approcher cette fonction de renvoi par des fonctions rationnelles, plus facilement simulables.

3.3 Le cas monoénergétique isotrope

Dans ce cas la simulation est grandement simplifiée, en effet, les sections efficaces de renvoi deviennent :

$$k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi},$$

on obtient donc :

$$\Phi_K(\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0}. \quad (3.14)$$

K sera déterminée par la solution de l'équation :

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sigma_t - K \cdot \mu} d\mu &= \Phi_K^0 = 1, \\ \frac{\sigma_s}{2K} \ln \left(\frac{\sigma_t + K}{\sigma_t - K} \right) &= 1, \end{aligned} \quad (3.15)$$

On vérifie aisément que cette dernière équation possède une unique solution positive K .

L'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision

La section efficace biaisée de collision prend la forme :

$$\begin{aligned} \tilde{k}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) &= \frac{\Phi_K(\vec{\Omega})}{\Phi_K(\vec{\Omega}')} k(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}_0}, \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0}. \end{aligned}$$

Notons que, dans ce cas, l'échantillonnage selon la loi de $\mu = \cos(\theta)$ est simple. En effet, la fonction de répartition est donnée par :

$$F(\mu) = \int_{-1}^{\mu} \frac{1}{2} \cdot \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K \cdot x} = -\frac{\sigma_s}{2K} \ln \left(\frac{\sigma_s - K\mu}{\sigma_t + K} \right).$$

Donc on peut simuler le couple (θ, φ) de la façon suivante :

1. l'angle azimuthal φ est déterminé suivant une loi uniforme sur l'intervalle $[0, 2\pi]$,

2. $\mu = \cos(\theta)$ est tiré en posant, si ζ suit une loi uniforme sur $[0, 1]$:

$$\mu = \frac{\sigma_s - \exp\left(-\frac{2K\zeta}{\sigma_s}\right)}{K}$$

3.4 Applications

Nous montrons dans cette section l'apport de la méthode développée. En particulier nous mettons en évidence l'automatisation complète de tous les paramètres de simulation, et l'amélioration qu'apporte la technique nouvelle de biaisage angulaire.

Comme nous l'avons dit, le vecteur d'intérêt $\vec{\Omega}_0$ est calculé automatiquement, avec une direction perpendiculaire à la face des détecteurs. Le paramètre K est lui aussi calculé automatiquement. Enfin, la fonction de biaisage sera déduite des paramètres précédents, et utilisée de façon complètement transparente pour l'utilisateur.

3.4.1 Traversée d'une plaque

Nous prendrons comme exemple d'application, une traversée de plaque de particules monoénergétiques et ayant une loi de renvoi angulaire anisotrope. Les particules partent du point $(0, 0)$, avec un vecteur vitesse constant v , perpendiculaire à la plaque (figure 3.1), et le détecteur est placé à une abscisse de 20 unités de longueur. La limite de la plaque en ordonnée est à 500 et -500 ce qui représente par rapport aux libres parcours moyens que nous considérerons une distance infinie. En dehors de la plaque on considère qu'il y a du vide, et donc que la particule est perdue si elle sort du domaine d'étude (figure 3.1).

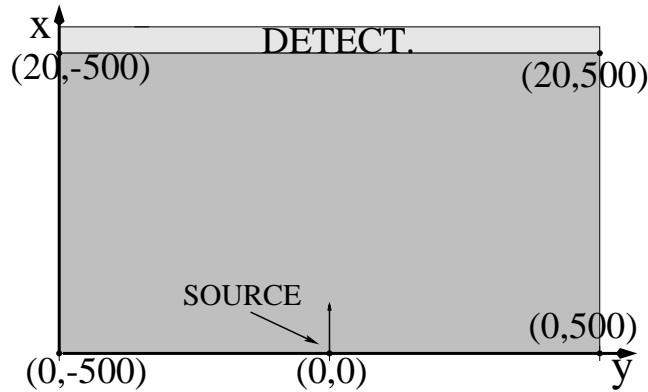


FIG. 3.1 – Le cas Test de traversée de plaque.

le cas monoénergétique isotrope

Les données Dans ce cas nous prenons les sections efficaces données dans la table 3.1.

Densité	50
σ_t	1,0
σ_s	0,9

TAB. 3.1 – *Paramètres de simulation.*

Le paramètre K est calculé par notre algorithme et l'on obtient :

$$K = 0,52543.$$

Il est intéressant de constater que nous retrouvons bien le paramètre optimal calculé par Benjamin Morillon $K = 0.52$ (voir [23]).

Nous faisons une simulation avec trois méthodes, la simulation naturelle, exponentielle seule et la simulation exponentielle et angulaire.

Nous retrouvons les mêmes résultats que l'équipe du laboratoire de Saclay, soit une moyenne de 2.93210^{-05} (voir [23]). Nous observons alors dans les résultats des tableaux 3.2, 3.3 et 3.4, une nette accélération du calcul ainsi qu'une grande amélioration de la précision pour la simulation exponentielle et angulaire.

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	2.7757e-05	9.2206e-07	3.32 %	1h 35mn 0s	2.0633e+08
2000000	2.8521e-05	7.1288e-07	2.50 %	3h 9mn 37s	1.7295e+08
5000000	2.8406e-05	4.8067e-07	1.69 %	7h 53mn 17s	1.5242e+08
10000000	2.8695e-05	3.3830e-07	1.18 %	15h 46mn 9s	1.5392e+08

TAB. 3.2 – *Traversée de plaque: Simulation naturelle.*

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	3.0121e-05	6.3832e-07	2.12 %	0h 11mn 59s	3.4111e+09
500000	2.9636e-05	2.9471e-07	0.99 %	0h 59mn 48s	3.2080e+09
1000000	2.9454e-05	1.9980e-07	0.68 %	1h 59mn 21s	3.4977e+09

TAB. 3.3 – *Traversée de plaque: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
10000	2.9385e-05	1.3477e-07	0.46 %	0h 0mn 22s	2.4591e+12
100000	2.9402e-05	4.2353e-08	0.14 %	0h 3mn 43s	2.4912e+12
500000	2.9357e-05	1.8948e-08	0.06 %	0h 18mn 38s	2.4904e+12
1000000	2.9367e-05	1.3405e-08	0.05 %	0h 37mn 15s	2.4890e+12

TAB. 3.4 – *Traversée de plaque: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur Sun Sparc 5

le cas monoénergétique anisotrope

Les données Ces particules auront une fonction de transfert anisotrope, développée suivant les 4 premiers polynômes de Legendre avec les coefficients donnés par le tableau 3.5.

σ_0	6,4243
σ_1	2,2982
σ_2	1,3118
σ_3	0,65878
σ_4	0,25983

TAB. 3.5 – *Coefficients des polynômes de Legendre.*

Avec une densité de 50, on obtient les différents paramètres dont le paramètre optimal K calculé automatiquement :

Densité	50
σ_t	0,943991
σ_s	0,812584
K	0,473435

TAB. 3.6 – *Paramètres de simulation.*

On peut visualiser la loi naturelle de renvoi en fonction des angles incidents θ par rapport à la direction d'intérêt, et de l'angle azimutal φ , (cf. figure 3.4.1).

cea dbm

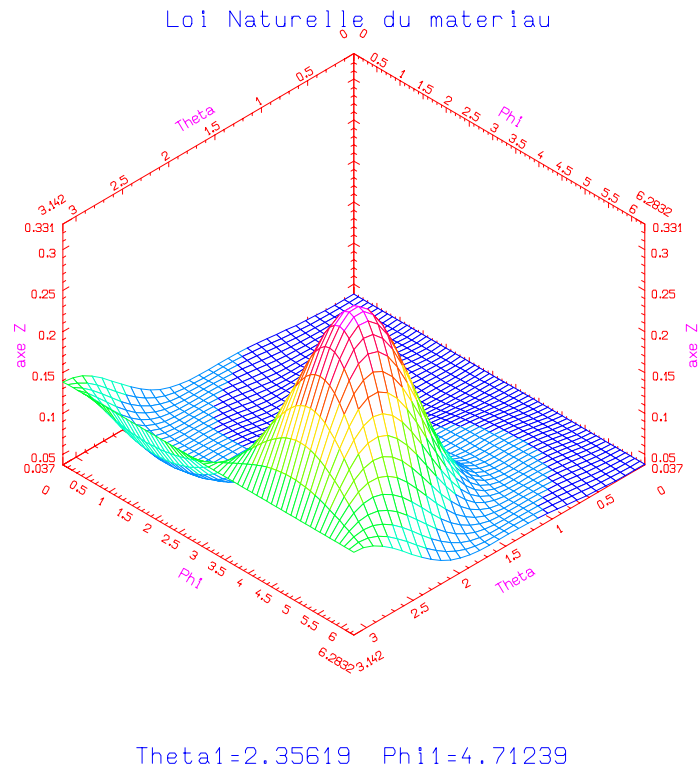
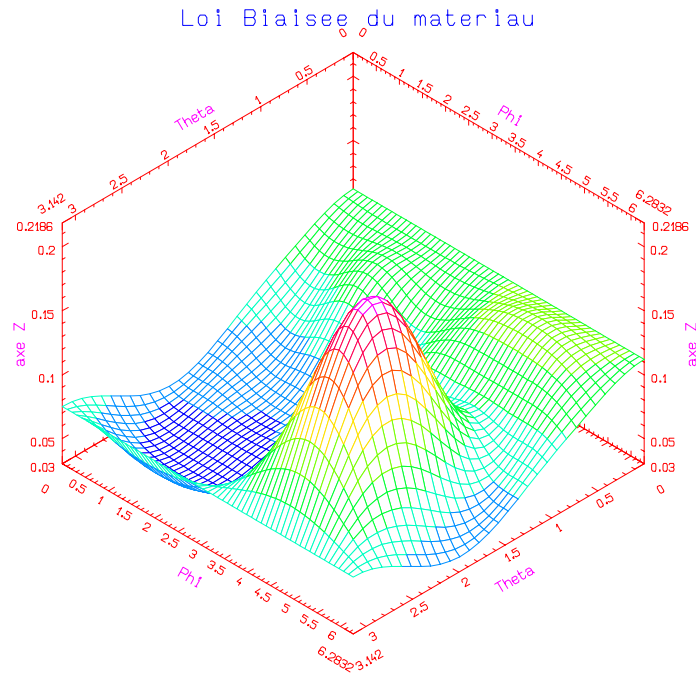


FIG. 3.2 – *Loi naturelle de renvoi.*

De même on peut visualiser la loi biaisée de renvoi en fonction des angles incidents θ par rapport à la direction d'intérêt, et de l'angle azimutal φ , (cf. figure 3.4.1).

cei dbm



Theta1=2.35619 Phi1=4.71239

FIG. 3.3 – *Loi Biaisee de renvoi.*

On constate que la loi biaisée a une plus grande probabilité de renvoyer la particule dans la direction d'intérêt représentée ici par l'angle $\theta = 0$, que la loi naturelle.

Les résultats Une visualisation des différentes simulations nous permet de mieux comprendre les améliorations apportées par les biaisages. Pour cela nous

observons au 30ième choc ($NbIter$) des 1000 particules envoyées, les grandeurs suivantes: le nombre de particules présentes: $NbNeut$, la position et l'éclatement du nuage des particules (Centre(x, y, z), Diamètre moyen), le nombre arrivé $NtAr$ et sorti $NtSo$, et enfin un contrôle du poids (minimum: Pm , maximum: PM , moyen: Py).

Nous voyons alors une nette progression vers le détecteur du nuage de particule suivant la simulation, ce qui entraîne un plus grand nombre de particules arrivées et moins de sorties, pour le même nombre de chocs. Nous rappelons les trois types de simulations utilisés :

1. la simulation naturelle.
2. le biaisage exponentiel seul.
3. le biaisage exponentiel **et** angulaire.

Cette progression est beaucoup plus prononcée pour le biaisage “exponentiel et angulaire” (voir figure 3.6). De plus une coloration des particules en fonction de leur poids nous montre une nette classification des couleurs par zone de proximité du détecteur pour ce même biaisage (voir figure 3.6). Cette classification garantit une arrivée de particules dans un même intervalle de poids, correspondant de ce fait à une variance faible. Nous voyons aussi que cette classification est très nettement dégradée pour le “biaisage exponentiel seul” (voir figure 3.5), et est inexistante pour la “simulation naturelle” où toutes les particules ont le même poids (voir figure 3.4).

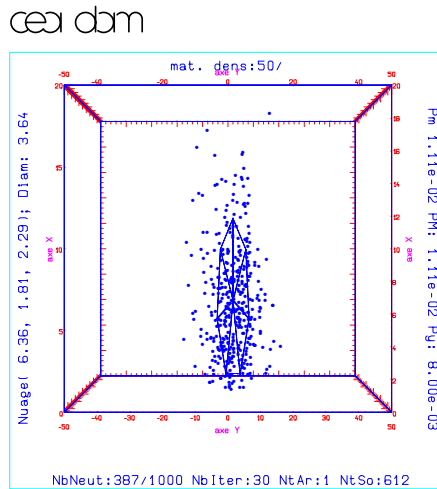


FIG. 3.4 – *Traversée de plaque: Simulation naturelle.*

cea dbm

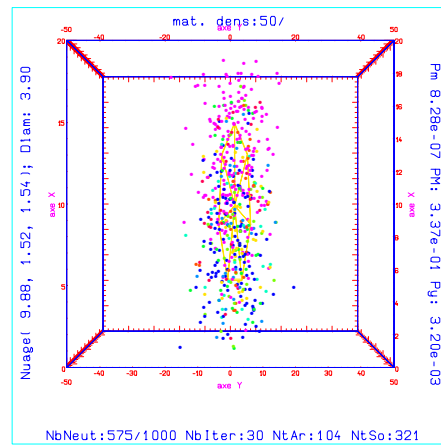


FIG. 3.5 – Traversée de plaque: Biaisage exponentiel seul.

cea dbm

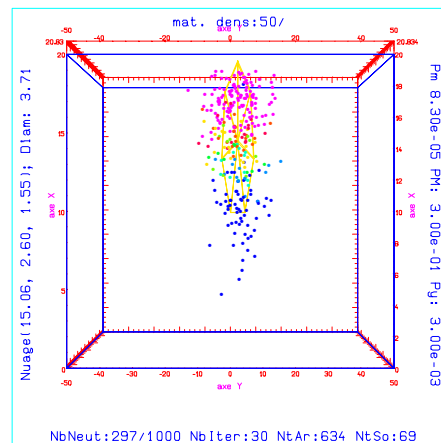


FIG. 3.6 – Traversée de plaque: Biaisage exponentiel et angulaire.

Nous obtenons, les résultats numériques suivants, qui montrent une très nette amélioration lors de l'introduction du biaisage angulaire, notamment un gain d'un facteur 100 par rapport au biaisage exponentiel.

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	1.04e-04	7.03e-06	6.76 %	0h 10mn 43s	3.15e+07
200000	1.06e-04	5.32e-06	5.00 %	0h 21mn 23s	2.75e+07
400000	1.00e-04	3.53e-06	3.53 %	0h 42mn 55s	3.11e+07
2000000	9.86e-05	1.61e-06	1.64 %	3h 33mn 55s	2.98e+07

TAB. 3.7 – *Traversée de plaque: Simulation naturelle.*

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	9.57e-05	2.19e-06	2.29 %	0h 14mn 11s	2.46e+08
200000	9.54e-05	1.46e-06	1.53 %	0h 28mn 20s	2.76e+08
400000	9.59e-05	1.03e-06	1.07 %	0h 56mn 34s	2.78e+08
2000000	9.73e-05	4.80e-07	0.50 %	4h 41mn 13s	2.57e+08

TAB. 3.8 – *Traversée de plaque: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
10000	9.77e-05	3.54e-07	0.36 %	0h 3mn 6s	4.29e+10
100000	9.79e-05	1.11e-07	0.11 %	0h 35mn 5s	3.82e+10
200000	9.79e-05	7.88e-08	0.08 %	1h 9mn 24s	3.86e+10
400000	9.80e-05	5.56e-08	0.06 %	2h 17mn 37s	3.92e+10

TAB. 3.9 – *Traversée de plaque: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur Sun Sparc 5.

3.4.2 L'exemple du tuyau

Nous considérons un tuyau rectangulaire faisant deux angles droits suivant sa longueur, et plongé dans un milieu opaque (voir figures 3.7, 3.8).

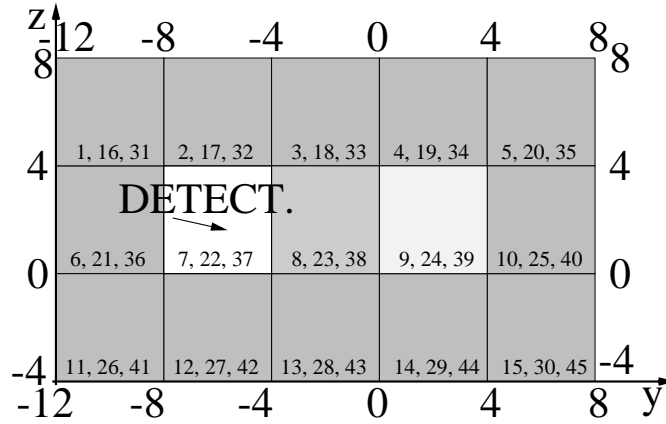


FIG. 3.7 – *Tuyau: vue de haut.*

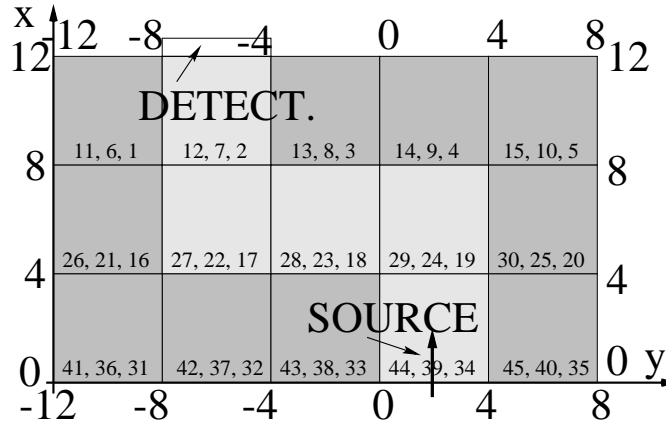


FIG. 3.8 – *Tuyau: coupe d'une vue de face.*

On garde le même matériau que précédemment, avec pour le tuyau une densité de 40, et pour le milieu opaque une densité de 160. On obtient alors automatiquement les coefficients (voir tableau 3.10).

Densité	40	160
σ_t	0.753826	2.98713
σ_s	0.650067	2.60027
K	0.376077	1.44834

TAB. 3.10 – *Paramètres de simulation.*

Pour ce cas test de tuyau, l'algorithme de recherche des directions d'intérêt nous donne les directions de la figure 3.9.

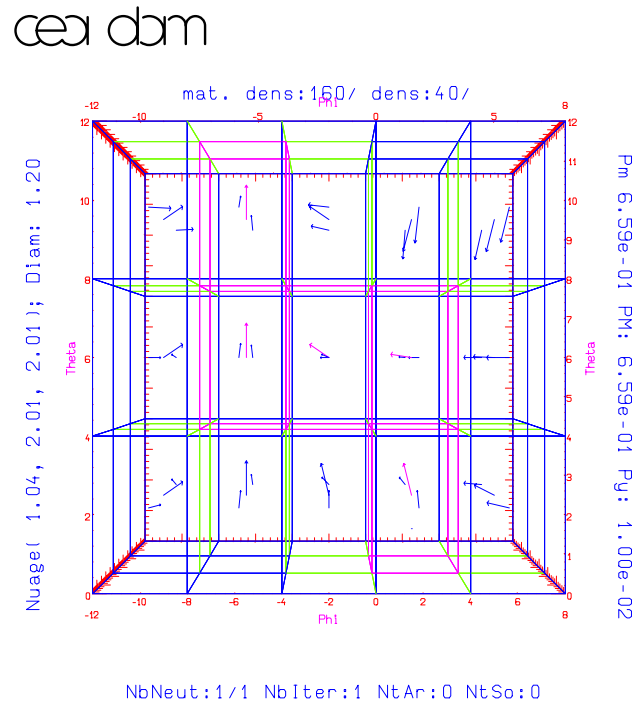


FIG. 3.9 – Directions d'intérêt de la traversée d'un tuyau.

Comme pour le cas précédent on visualise la 30^{ème} étape des différentes simulations. On peut alors noter:

- premièrement, une plus grande concentration de particules d’abord pour le “biaisage exponentiel et angulaire”, puis pour le “biaisage exponentiel seul”. Le nuage de neutrons est beaucoup plus avancé pour le premier.
- Deuxièmement, pour le “biaisage exponentiel et angulaire”, on voit encore une classification des poids des particules par rapport à la distance du détecteur. Cette classification est très détériorée pour le “biaisage exponentiel seul”, et inexistante pour la “simulation naturelle” (voir les figures 3.10, 3.11, 3.12).

Le tuyau est représenté par des mailles roses, le milieu opaque par des mailles bleues, et le milieu opaque en contact avec le tuyau par des mailles vertes.

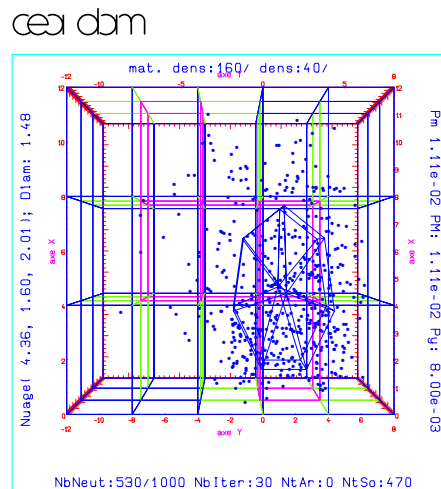


FIG. 3.10 – *Traversée de plaque : Simulation naturelle.*

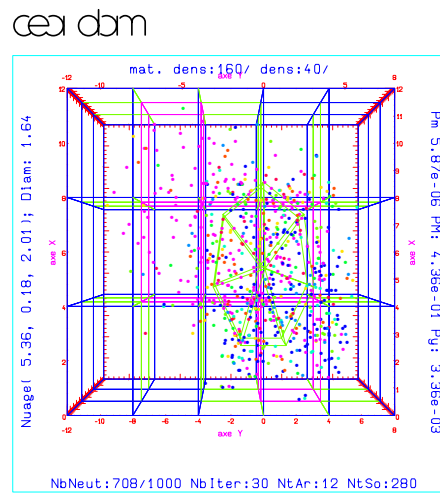


FIG. 3.11 – *Traversée de plaque : Biaisage exponentiel seul.*

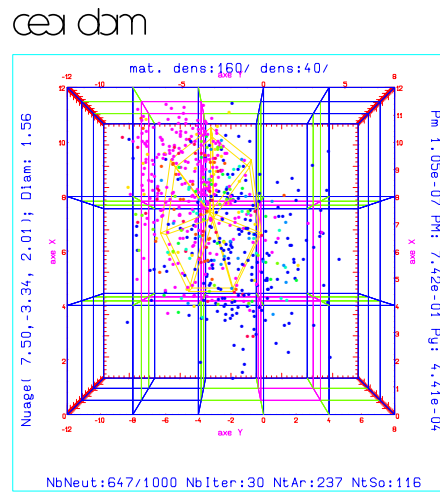


FIG. 3.12 – *Traversée de plaque : Biaisage exponentiel et angulaire.*

cea dcm

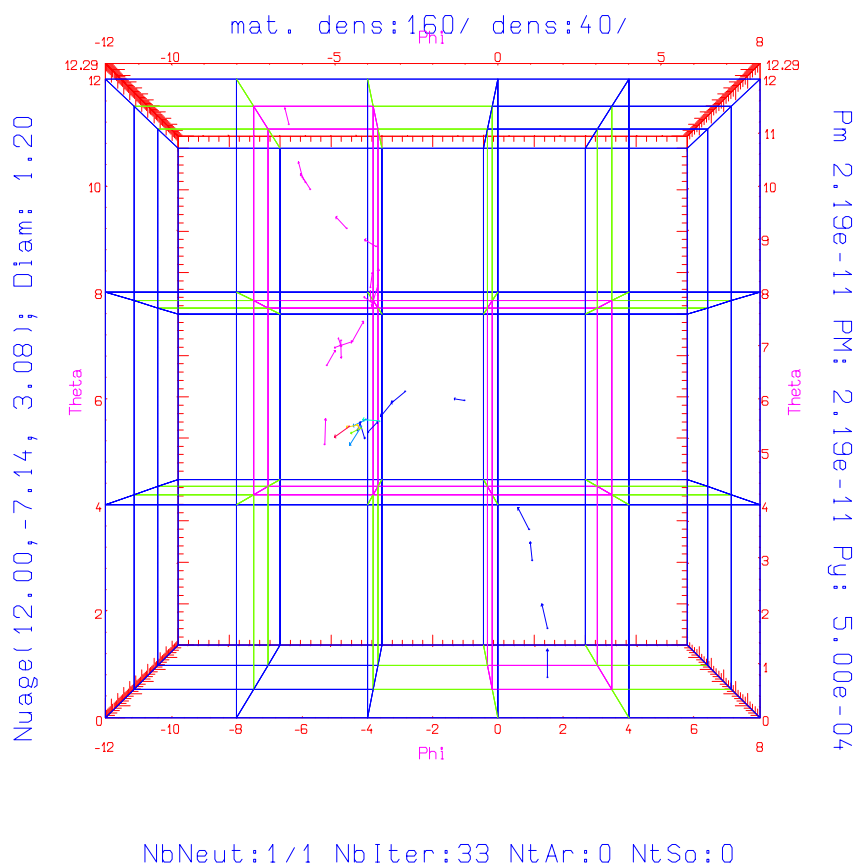


FIG. 3.13 – Marche aléatoire d'une particule: *Bia*. *Exp* et *Ang*.

On voit donc nettement l'apport de ce biaisage angulaire, et plus précisément dans les résultats des tableaux 3.11, 3.12, 3.13, et notamment un gain de 10 par rapport au biaisage exponentiel.

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	3.12e-05	5.99e-06	19.22 %	0h 18mn 23s	2.53e+07
200000	3.60e-05	5.45e-06	15.12 %	0h 36mn 47s	1.52e+07
400000	3.50e-05	3.66e-06	10.46 %	1h 13mn 50s	1.68e+07
1000000	3.54e-05	2.24e-06	6.32 %	3h 4mn 49s	1.80e+07
2000000	3.81e-05	1.71e-06	4.50 %	5h 51mn 06s	1.61e+07

TAB. 3.11 – *Traversée d'un tuyau: Simulation naturelle.*

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	3.76e-05	2.98e-06	7.93 %	0h 44mn 57s	4.16e+07
200000	3.68e-05	2.00e-06	5.42 %	1h 30mn 02s	4.65e+07
400000	3.60e-05	1.33e-06	3.70 %	3h 00mn 10s	5.20e+07
1000000	3.70e-05	9.12e-07	2.47 %	7h 28mn 03s	4.47e+07
1500000	3.73e-05	7.52e-07	2.02 %	11h 52mn 27s	4.14e+07

TAB. 3.12 – *Traversée d'un tuyau: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Particules	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	3.83e-05	6.25e-07	1.63 %	1h 12mn 35s	5.89e+08
200000	3.83e-05	4.48e-07	1.17 %	2h 24mn 04s	5.76e+08
400000	3.84e-05	3.19e-07	0.83 %	4h 44mn 04s	5.76e+08
1000000	3.83e-05	2.00e-07	0.52 %	11h 43mn 35s	5.90e+08

TAB. 3.13 – *Traversée d'un tuyau: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur Sun Sparc 5.

Chapitre 4

Le cas multigroupe

Dans ce chapitre nous étudions le cas multigroupe. Ce cas est sensiblement plus complexe que le cas monénergétique. Cependant, nous montrons comment expliciter une fonction d'importance dans ce cas en utilisant une méthode proche de ce qui à été fait dans le cas monocinétique.

4.1 Calcul de la fonction d'importance

Dans le cas multigroupe anisotrope, le domaine d'énergie étudié E sera divisé en N_E intervalles $[E_{g-1}, E_g]$, $1 \leq g \leq N_E$, qui sont appelés groupes d'énergie. La section efficace de renvoi $k(\vec{\Omega}', g', \vec{\Omega}, g)$ se développera en produit de deux termes, le premier $P_{g' \rightarrow g}$ représente la probabilité conditionnelle de passer du groupe d'énergie g' au groupe d'énergie g sachant que l'on est dans le groupe g' , et le deuxième terme :

$$k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}),$$

représente la probabilité de changer de direction de $\vec{\Omega}'$ à $\vec{\Omega}$ sachant que l'on passe du groupe d'énergie g' au groupe g . k s'écrit donc sous la forme :

$$k(g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) = k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}).$$

Afin de pouvoir effectuer les calculs ultérieurs, nous supposons de plus que la section efficace de renvoi $k_{g'g}$ s'écrit comme une série finie de polynômes de Legendre :

$$k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} T_{l,g',g} P_l(\cos(\theta)), \quad (4.1)$$

avec $\cos(\theta) = \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}$. Le vecteur vitesse de sortie ne dépend que du cosinus de l'angle qu'il fait avec le vecteur incident.

Dans le cas que nous étudions, nous supposons que les sections efficaces constantes sur une maille et par groupe d'énergie, l'équation de transport prend donc la forme :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi_g(\vec{x}, \vec{\Omega}) + \tilde{\sigma}_{g,t} \psi_g(\vec{x}, \vec{\Omega})$$

$$= \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \bar{\sigma}_{g',s} \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \tilde{k}(g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}'. \quad (4.2)$$

Comme dans le chapitre précédent, nous allons chercher une fonction d'importance solution de l'équation adjointe de transport qui s'écrit dans ce cas :

$$\begin{aligned} & -\vec{\Omega} \cdot \nabla_x \psi_g(\vec{x}, \vec{\Omega}) + \sigma_{g,t} \psi_g(\vec{x}, \vec{\Omega}) \\ &= \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{g,s} \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') P_{g \rightarrow g'} k_{gg'}(\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'. \end{aligned} \quad (4.3)$$

On va chercher une solution de la forme :

$$\psi(\vec{x}, \vec{\Omega}, g) = e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}} \Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega}).$$

En reportant dans l'équation adjointe ci-dessus, on obtient une équation vérifiée par les fonctions $\Phi_{K_g, g}$:

$$\begin{aligned} & (\sigma_{g,t} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega}) \\ &= \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{g,s} \frac{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}}} \Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}') P_{g \rightarrow g'} k_{gg'}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'. \end{aligned}$$

Le terme $\frac{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}}}$ montre que l'on ne peut espérer trouver de fonctions $\Phi_{K_g, g}$ indépendantes de \vec{x} . Pour pallier ce problème nous cherchons à résoudre l'équation proche suivante :

$$\begin{aligned} & (\sigma_{g,t} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega}) \\ &= \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{g,s} \frac{A_{1g'}(\vec{x}_M)}{A_{1g}(\vec{x}_M)} \Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}') P_{g \rightarrow g'} k_{gg'}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \end{aligned} \quad (4.4)$$

où x_M est en général le milieu de la maille ou le milieu d'une partie de la maille de très grande importance où la plupart des particules passeront. Pour la fonction $A_{1g}(\vec{x})$, suivant que l'on veuille que le paramètre K_g et la fonction $\Phi_{K_g, g}$ dépendent de la maille ou pas on prendra :

$$\begin{aligned} A_{1g}(\vec{x}_M) &= e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}_M} \\ &\text{ou} \\ A_{1g}(\vec{x}_M) &= C_g \quad (\text{constante}) \end{aligned}$$

Dans la suite, pour les applications, nous avons choisi de prendre :

$$A_{1g}(\vec{x}_M) = e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}_M},$$

et nous noterons par $\alpha_{g \rightarrow g'}$ le coefficient :

$$\alpha_{g \rightarrow g'} = \frac{A_{1g'}(\vec{x}_M)}{A_{1g}(\vec{x}_M)}. \quad (4.5)$$

La stratégie de réduction de variance est alors la suivante :

- résoudre l'équation (4.4) dans chaque maille,

– une fois ceci fait on peut définir une fonction d'importance I par :

$$I_g(\vec{x}, \vec{\Omega}) = e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}} \Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega}),$$

– obtenir une nouvelle équation de transport biaisée.

Nous commençons par établir l'équation multigroupe biaisée en supposant que la fonction d'importance est donnée par l'équation précédente. Nous reviendrons par la suite aux techniques algorithmiques nécessaires pour résoudre l'équation (4.4).

Equation multigroupe biaisée On peut obtenir l'équation de transport multigroupe biaisé à l'aide de la fonction I ainsi choisie (voir section 2.3.2) :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi_g + \psi_g(\sigma_{t,g} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \\ = \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{s,g'} \frac{I_g(\vec{x}, \vec{\Omega})}{I_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}')} \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') k(g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}', \end{aligned} \quad (4.6)$$

En remplaçant la fonction d'importance I dans l'équation de transport multigroupe biaisée ci-dessus (4.3 p64), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_x \psi_g + \psi_g(\sigma_{t,g} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \\ = \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{s,g'} \frac{I_g(\vec{x}, \vec{\Omega})}{I_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}')} \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') k(g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}', \\ = \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{s,g'} \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \frac{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}} \Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}} \Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}', \\ = \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S (\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'}) \psi_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \frac{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}} A_{1g'}(\vec{x}_M)}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}} A_{1g}(\vec{x}_M)} \\ \frac{\sigma_{s,g'}}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \frac{A_{1g}(\vec{x}_M)}{A_{1g'}(\vec{x}_M)} \frac{\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}', \end{aligned} \quad (4.7)$$

On définit alors :

$$\hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}') = \frac{\sigma_{s,g'}}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \int \alpha_{g' \rightarrow g} \frac{\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}$$

et :

$$\hat{N}_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') = \sum_g \frac{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}} \alpha_{g' \rightarrow g} \hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}'),$$

On pose de plus :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{k}_{g'g}(\vec{x}_M, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \frac{\sigma_{s,g'} \hat{P}_{g' \rightarrow g}^{-1}(\vec{\Omega}')}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \alpha_{g' \rightarrow g} \frac{\Phi_{K_{g,g}}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g',g'}}(\vec{\Omega}')} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}), \\ \tilde{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}') = \frac{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}} \alpha_{g \rightarrow g'} \frac{\hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}')}{\widehat{N}_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}')}, \\ \tilde{\sigma}_{s,g}(\vec{x}, \vec{\Omega}) = (\sigma_{t,g} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \widehat{N}_g(\vec{x}, \vec{\Omega}), \\ \tilde{\sigma}_{t,g}(\vec{\Omega}) = \sigma_t - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g \end{array} \right.$$

On voit d'après l'équation 4.4 p. 64 que $\sum_g \hat{P}_{g' \rightarrow g} = 1$. L'équation de transport biaisée devient avec ces notations :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla_x \tilde{u}_g + \tilde{u}_g(\tilde{\sigma}_{t,g} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \\ = \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \tilde{\sigma}_{s,g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}) \tilde{u}_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \tilde{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \tilde{k}_{g'g}(\vec{x}_M, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}'. \end{aligned}$$

Remarque 23 Alors que le biaisage angulaire est le même dans toute la maille, le biaisage en énergie dépend de la position de la particule dans cette maille. En effet, on pourra diminuer ou augmenter le passage dans tel ou tel groupe d'énergie suivant la position dans la maille.

Il nous reste maintenant à trouver l'expression explicite de la fonction de biaisage notamment $\Phi_{K_{g,g}}(\vec{\Omega})$ (dont le paramètre K_g), et de simuler la collision avec l'opérateur biaisé $\tilde{k}(g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega})$.

Si le premier point peut être résolu plus ou moins facilement, la simulation d'après l'opérateur biaisé de collision est délicate.

Détermination de la fonction d'importance

Nous démontrons dans l'appendice A.2 p.101 l'existence d'une solution pour l'équation 4.4. Les solutions de cette équation sont définies à une constante près et nous la normaliserons en posant :

$$\int_S \Phi_{K_{1,1}}(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = 1.$$

Commençons par noter que, d'après l'équation 4.4 les fonctions $\Phi_{K_{g,g}}$ ne dépend que de l'angle :

$$\theta_g = \left(\widehat{\vec{\Omega}, \vec{\Omega}_{0,g}} \right).$$

Nous allons donc développer la fonction $\Phi_{K_{g,g}}$ suivant les polynômes de Legendre en θ_g :

$$\Phi_{K_{g,g}}(\theta_g) = \sum_{l=0}^{\infty} \Phi_{K_{g,g}}^l P_l(\cos(\theta_g)), \quad (4.8)$$

Comme nous l'avons dit précédemment la section efficace naturelle de renvoi sera développée suivant les polynômes de Legendre :

$$k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} T_{l,g',g} P_l(\cos(\theta)),$$

avec $\cos(\theta) = \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}$.

Nous développons cette fonction de collision suivant les harmoniques sphériques et nous obtenons :

$$k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^N T_{l,g',g} \sum_{m=-l}^{m=l} Y_{l,m}^*(\vec{\Omega}') Y_{l,m}(\vec{\Omega})$$

Nous utilisons cette décomposition dans l'équation (4.4), cela donne :

$$\begin{aligned} & (\sigma_{g,t} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \Phi_{K_g,g}(\vec{\Omega}) \\ = & \sum_{g'=1}^{N_E} \int_S \sigma_{g,s} \alpha_{g \rightarrow g'} \left(\sum_{L \geq 0} \Phi_{K_{g'},g'}^L \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} Y_{L,0}(\vec{\Omega}') \right) \\ & \left(P_{g \rightarrow g'} \sum_{l=0}^N T_{l,g,g'} \sum_{m=-l}^{m=l} Y_{l,m}^*(\vec{\Omega}) Y_{l,m}(\vec{\Omega}') \right) d\vec{\Omega}'. \end{aligned}$$

En posant, avec $\mu_g = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_{0,g}$:

$$\Phi_{K_{g'},g'}^l = \int_{-1}^1 \Phi_{K_{g'},g'}(\mu_g) P_l(\mu_g) d\mu_g,$$

on obtient :

$$\begin{aligned} & (\sigma_{g,t} - K_g \mu_g) \Phi_{K_g,g}(\mu_g) \\ = & \sigma_{g,s} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \sum_{l=0}^N T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l P_l(\mu_g) \quad (4.9) \end{aligned}$$

Remarque 24 Cette dernière équation nous montre (comme dans le cas monoénergétique, voir section 3.1 p.41), que les fonctions $\Phi_{K_g,g}$ sont déterminées par leurs $N+1$ premières coordonnées ($\Phi_{K_g,g}^l$, $l = 0, \dots, N$, $g = 1, \dots, N_E$) dans la base des polynômes de Legendre.

Nous allons maintenant chercher à déterminer les paramètres K_g . On multiplie cette équation par $P_l(\mu_g)$ et on intègre sur μ_g pour obtenir :

$$\begin{aligned} & \sigma_{g,t} \Phi_{K_g,g}^l - \int_{-1}^1 K_g \mu_g \Phi_{K_g,g}(\mu_g) P_l(\mu_g) d\mu_g \\ = & \sigma_{g,s} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l. \end{aligned}$$

De plus, en utilisant la relation reliant les polynômes de Legendre on obtient :

$$\begin{aligned} \sigma_{g,t} \Phi_{K_g,g}^l - K_g \gamma_1^l \Phi_{K_g,g}^{l+1} - K_g \gamma_2^l \Phi_{K_g,g}^{l-1} \\ = \sigma_{g,s} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l, \end{aligned}$$

Ce qui nous donne l'expression de récurrence des moments $\Phi_{K_g,g}^l$:

$$\begin{aligned} K_g \gamma_1^l \Phi_{K_g,g}^{l+1} &= \sigma_{g,t} \Phi_{K_g,g}^l \\ &- \sigma_{g,s} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l - K_g \gamma_2^l \Phi_{K_g,g}^{l-1}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

avec $\gamma_1^l = (l+1)(2l+1)$ et $\gamma_2^l = l/(2l+1)$.

Ces équations nous permettent de déterminer les $(\Phi_{K_g,g}^l; l = 0, \dots, N; g = 1, \dots, N_E)$ à partir de K_g et $(\Phi_{K_g,g}^0; g = 1, \dots, N_E)$.

Remarque 25 On peut aussi obtenir une relation de récurrence sur les dérivées. Cette relation nous sera utile pour calculer les K_g par une méthode de Newton :

$$\begin{aligned} \gamma_1^l \Phi_{K_g,g}^{l+1} + K_g \gamma_1^l \frac{d}{dK_g} \Phi_{K_g,g}^{l+1} \\ = \sigma_{g,t} \frac{d}{dK_g} \Phi_{K_g,g}^l + \sigma_{g,s} \sum_{g'=1, g' \neq g}^{N_E} \left(\frac{A_{1g'}(\vec{x}_M) \frac{d}{dK_g} A_{1g}(\vec{x}_M)}{A_{1g}(\vec{x}_M)^2} P_{g \rightarrow g'} T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l \right) \\ - \sigma_{g,s} P_{g \rightarrow g} T_{l,g,g} \frac{d}{dK_g} \Phi_{K_g,g}^l - \gamma_2^l \cdot \Phi_{K_g,g}^{l-1} - K_g \cdot \gamma_2^l \cdot \frac{d}{dK_g} \Phi_{K_g,g}^{l-1}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

Détermination des K_g . La fonction $\Phi_{K_g,g}$ s'écrit avec $\mu_g = \cos(\theta_g) = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_{0,g}$:

$$\Phi_{K_g,g}(\mu_g) = \frac{\sigma_{g,s}}{\sigma_{g,t} - K_g \mu_g} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \sum_{l=0}^N T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l P_l(\mu_g). \quad (4.12)$$

Pour déterminer les K_g , nous utilisons des conditions de cohérence des groupes d'énergie :

$$\int_{-1}^1 \Phi_{K_g,g}(\mu_g) d\mu_g = \Phi_{K_g,g}^0,$$

qui se réécrit :

$$\Phi_{K_g,g}^0 = \sigma_{g,s} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \sum_{l=0}^N T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l \int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu_g)}{\sigma_{g,t} - K_g \mu_g} d\mu_g \quad (4.13)$$

Nous démontrons dans la section A.2 p101, qu'il existe des solutions $(K_g; g = 1, \dots, N_E)$ pour cette équation.

Pour résoudre l'équation (4.13), il est important de noter que l'on peut obtenir une formule explicite pour :

$$\int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu_g)}{\sigma_{g,t} - K_g \mu_g} d\mu_g,$$

en utilisant les equations (3.10) et (3.11) du chapitre précédent. De même on peut montrer que la dérivée par rapport à K_g du coefficient précédent peut être calculé sous la forme :

$$\frac{d}{dK_g} \int_{-1}^1 \frac{\mu^{l-2m}}{\sigma_{g,t} - K_g \cdot \mu} d\mu = \frac{1}{\sigma_{g,t}^2} h'_{l-2m} \left(\frac{K_g}{\sigma_{g,t}} \right),$$

h étant la fonction définie en (3.11).

Remarque 26 En posant $K_g^l = \sigma_{g,t}/K_g$, l'équation précédente devient:

$$\frac{\sigma_{g,s}}{\sigma_{g,t}} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \sum_{l=0}^N T_{l,g,g'} \Phi_{K_{g'},g'}^l \int_{-1}^1 \frac{P_l(\mu_g)}{1 - K_g^l \mu_g} d\mu_g = \Phi_{K_g,g}^0. \quad (4.14)$$

Cette forme de l'équation prouve que, si l'on suppose que

$$\frac{\sigma_{g,s}}{\sigma_{g,t}}, \quad T_{l,g,g'},$$

sont indépendants de la densité ρ , d'après les equations 4.4, (4.10), (4.13)), les K_g et $\Phi_{K_g,g}^l$ sont aussi indépendants de ρ .

Cette propriété d'indépendance par rapport à ρ des fonctions $\Phi_{K_g,g}$ est importante à noter puisqu'elle simplifie grandement le problème du calcul de la fonction d'importance.

Remarque 27 L'équation (4.13) peut se résoudre par une méthode de point fixe de type Newton Raphston. Elle sera résolue, une fois pour toute, pour chaque matériau et le paramètre K_g stocké dans un fichier, prêt à l'emploi lors d'une simulation.

Chaque paramètre K_g du groupe d'énergie g , dépend de tous les autres groupes d'énergie, et des différents matériaux traités. Cela signifie que ce paramètre prend en compte déjà l'environnement dans la simulation pour diriger au mieux les neutrons et réduire la variance.

Nous venons de déterminer les $\Phi_{K_g,g}^l, l > 0$ et les K_g . La condition de normalisation que l'on impose sera $\Phi_{K_{1,1}}^0 = 1$. Il reste donc à fixer les $\Phi_{K_g,g}^0, 1 < g \leq N_E$.

Détermination des $\Phi_{K_g,g}^0$ Quelques soient les coefficients $\Phi_{K_g,g}^0, 1 < g \leq N_E$, il est facile de voir d'après l'équation 4.12 que si les $\Phi_{K_g,g}^l, l > 1$ déterminés comme précédemment par récurrence par l'équation 4.10, et K_g vérifiant les conditions de cohérence (4.13). Alors, les fonctions $\Phi_{K_g,g}$ de l'équation précitée sont entièrement déterminées, et sont solution de l'équation 4.4.

Pratiquement, pour fixer les constantes de normalisation des fonctions $\Phi_{K_g, g}$, on pourra choisir les coefficients $\Phi_{K_g, g}^0$ de la façon suivante (hypothèse multigroupe, voir la section 1.1.2 p.13). Soit $f_g(v)$ le spectre partiel de pondération (voir [27]). On a $\Phi_{K_{1,1}}^0 = 1$ et l'on impose pour tous groupes d'énergies g :

$$f_g(v_{g+1})\Phi_{K_g, g}^0 = f_{g+1}(v_{g+1})\Phi_{K_{g+1, g+1}}^0.$$

Ce qui donne :

$$\Phi_{K_{g+1, g+1}}^0 = \Phi_{K_{1,1}}^0 \prod_{i=1}^g \frac{f_i(v_{i+1})}{f_{i+1}(v_{i+1})} = \Phi_{K_{1,1}}^0 \frac{A_{g+1}}{A_1},$$

avec $f_g(v) = \frac{f(v)}{A_g} \cdot 1_{[v_g, v_{g+1}]}(v)$, et $A_g = \int_{v_g}^{v_{g+1}} f(v) dv$.

Echantillonnage de la section efficace biaisée de collision Le dernier point à résoudre pour la simulation est l'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision :

$$\tilde{k}(x_{\vec{M}}, g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) = \tilde{P}_{g' \rightarrow g}(x, \vec{\Omega}') \tilde{k}_{g'g}(x_{\vec{M}}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}),$$

avec :

$$\begin{aligned} \tilde{k}_{g'g}(x_{\vec{M}}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) &= \frac{\sigma_{s, g'} \hat{P}_{g' \rightarrow g}^{-1}(\vec{\Omega}')}{(\sigma_{t, g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \frac{\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \alpha_{g' \rightarrow g} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}), \\ \tilde{P}_{g' \rightarrow g}(x, \vec{\Omega}') &= \alpha_{g \rightarrow g'} \frac{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}} \hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}')}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}} \hat{N}_{g'}(x, \vec{\Omega}')}, \\ \tilde{\sigma}_{s, g}(x, \vec{\Omega}) &= (\sigma_{t, g} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \hat{N}_g(x, \vec{\Omega}), \\ \tilde{\sigma}_{t, g}(\vec{\Omega}) &= \sigma_t - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g \end{aligned}$$

avec le terme normatif de $\tilde{k}_{g'g}$:

$$\hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}') = \frac{\sigma_{s, g'}}{(\sigma_{t, g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \int \frac{\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}.$$

et le terme normatif de $\tilde{P}_{g' \rightarrow g}$:

$$\hat{N}_{g'}(x, \vec{\Omega}') = \sum_g \frac{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}} \alpha_{g \rightarrow g'} \hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}'),$$

et :

$$\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega}) = \frac{\sigma_{g, s}}{\sigma_{g, t} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \sum_{l=0}^N T_{l, g, g'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \Phi_{K_{g'}, g'}^l P_l(\cos(\theta)).$$

Pour simuler le transport des particules, nous commençons par échantillonner la longueur du parcours avec la section efficace $\tilde{\sigma}_{t, g}(\vec{\Omega})$, ensuite pour la collision nous déterminerons le groupe d'énergie de réémission par un échantillonnage

simple suivant la loi de probabilité discrète $\tilde{P}_{g' \rightarrow g}$. Ensuite nous échantillons la loi de réémission angulaire $\tilde{k}_{g'g}(\vec{x}_M, \vec{\Omega}', \vec{\Omega})$ comme nous l'avons fait pour le cas monoénergétique. Il reste ensuite à effectuer une correction de poids à chaque collision de $\tilde{\sigma}_{s,g}(\vec{x}, \vec{\Omega}) / \tilde{\sigma}_{t,g}(\vec{\Omega})$ suivant la section 2.2 p23 (simulation sous markovienne), puisque la section efficace d'absorption n'est pas nulle.

Pour les mêmes raisons que le paragraphe précédent, \tilde{k} peut être indépendante de la densité ρ si A_{1g} est indépendant de ρ . Ceci est très important pour la simulation en pratique, car on a souvent dans les cas à traiter, un même matériau avec plusieurs densités (correspondant directement à la plage continue de température à laquelle il est soumis).

Cet opérateur biaisé de collision a deux niveaux de complexité:

1. Il est long à calculer (plusieurs sommations).
2. Il dépend fortement dans le calcul (mais heureusement pour le biaisage), du vecteur vitesse incident. Ceci donne donc pour chaque vecteur vitesse incident, une fonction de renvoi différente.

Comme pour le chapitre précédent on procédera de deux manières:

1. D'abord, par les méthodes classiques d'échantillonnages :
 - La technique de discrétisation de cette fonction, en un tableau de renvoi. Pour ce, on discrétise le domaine du vecteur vitesse, par exemple :

$$\mu_i = \cos(\theta_i) = i * \frac{[-1, 1]}{N_\mu} \forall i \in [0, N_\mu],$$

et :

$$\varphi_i = i * \frac{[0, 2\pi]}{N_\varphi} \forall i \in [0, N_\varphi]$$

Cette méthode est très rapide d'exécution pour néanmoins une assez bonne approximation du résultat.

2. Et l'autre technique sera utilisée pour des ordres de développement suivant les polynômes de Legendre inférieurs à 4.

Il s'agit d'utiliser la décomposition suivant les probabilités conditionnelles. On obtient alors trois lois analytiques marginales, $P_{g' \rightarrow g}^*$ la probabilité étant dans le groupe g' de se retrouver dans le groupe d'énergie g , $f_{\{\theta/g\}}$: la densité de probabilité sur θ sachant que l'on est dans le groupe g , et $f_{\{\varphi/\theta, g\}}$: la densité de probabilité conditionnelle de φ sachant θ , et g .

De même que précédemment, l'intégrale de ces densités étant strictement croissante, nous pouvons les inverser assez rapidement par une bonne méthode de point fixe (voir le cas anisotrope monoénergétique).

Cas multigroupe isotrope

Dans ce cas également les différentes fonctions ainsi que les calculs seront grandement simplifiées. La section efficace de renvoi devient :

$$k(g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} P_{g' \rightarrow g}, \quad (4.15)$$

et l'équation (4.13) :

$$\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega}) = \frac{\sigma_{g,s}}{\sigma_{g,t} - K_g \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \frac{1}{4\pi} \Phi_{K_{g'}, g'}^0,$$

On détermine $\Phi_{K_g, g}^0$ de la même façon que le cas anisotrope. K_g est déterminée par la condition de normalisation $\int_{-1}^1 \Phi_{K_g, g}(\mu_g) d\mu_g = \Phi_{K_g, g}^0$ qui se réécrit dans ce cas :

$$\frac{1}{2} \sum_{g'=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g'} \Phi_{K_{g'}, g'}^0 \int_{-1}^1 \frac{\sigma_{g,s}}{\sigma_{g,t} - K_g \mu} d\mu = \Phi_{K_g, g}^0. \quad (4.16)$$

L'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision Le dernier point à résoudre pour la simulation est l'échantillonnage de la section efficace biaisée de collision :

$$\tilde{k}(x_{\vec{M}}, g', \vec{\Omega}', g, \vec{\Omega}) = \tilde{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}') \tilde{k}_{g'g}(x_{\vec{M}}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}),$$

avec:

$$\begin{aligned} \tilde{k}_{g'g}(x_{\vec{M}}, \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) &= \frac{1}{4\pi} \frac{\sigma_{s,g'} \hat{P}_{g' \rightarrow g}^{-1}(\vec{\Omega}')}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \frac{\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \alpha_{g' \rightarrow g} P_{g' \rightarrow g}, \\ \tilde{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{x}, \vec{\Omega}') &= \frac{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}} \alpha_{g \rightarrow g'} \frac{\hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}')}{\hat{N}_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}')}, \\ \tilde{\sigma}_{s,g}(\vec{x}, \vec{\Omega}) &= (\sigma_{t,g} - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g) \hat{N}_g(\vec{x}, \vec{\Omega}), \\ \tilde{\sigma}_{t,g}(\vec{\Omega}) &= \sigma_t - \vec{\Omega} \cdot \vec{K}_g \end{aligned}$$

Avec, le terme normatif de $\tilde{k}_{g'g}$:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}') &= \frac{\sigma_{s,g'}}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \int \frac{\Phi_{K_g, g}(\vec{\Omega})}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \alpha_{g' \rightarrow g} P_{g' \rightarrow g} k_{g'g}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega} \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{\sigma_{s,g'} \cdot P_{g' \rightarrow g}}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \alpha_{g' \rightarrow g} \frac{1}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \\ &\quad \int \frac{\sigma_{g,s}}{\sigma_{g,t} - K_g \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}_0} d\vec{\Omega} \sum_{g''=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g''} P_{g \rightarrow g''} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Phi_{K_{g''}, g''}^0 \\ &= - \frac{\sigma_{s,g'} \cdot P_{g' \rightarrow g}}{(\sigma_{t,g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \alpha_{g' \rightarrow g} \frac{1}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \\ &\quad \frac{\sigma_{g,s}}{K_g} \cdot \ln \left(\frac{\sigma_{g,t} - K_g}{\sigma_{g,t} + K_g} \right) \sum_{g''=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g''} P_{g \rightarrow g''} \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \Phi_{K_{g''}, g''}^0 \end{aligned}$$

Le terme normatif de $\tilde{P}_{g' \rightarrow g}$:

$$\hat{N}_{g'}(\vec{x}, \vec{\Omega}') = \sum_g \frac{e^{\vec{K}_g \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}_{g'} \cdot \vec{x}}} \alpha_{g \rightarrow g'} \hat{P}_{g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}').$$

Nous savons d'après l'expression de $\Phi_{K_g, g}$, que $\tilde{k}_{g'g}$ ne dépend que de l'angle θ . Il suffit donc de tirer aléatoirement un angle φ suivant une loi aléatoire sur $[0, 2\pi]$. Il reste à déterminer la loi de $\mu = \cos(\theta)$. Pour cela on évalue la fonction de répartition de cette variable aléatoire $F(\mu)$:

$$\begin{aligned}
F(\mu) &= -\frac{1}{2} \frac{\sigma_{s, g'} \widehat{P}_{g' \rightarrow g}^{-1}(\vec{\Omega}')}{(\sigma_{t, g'} - \vec{\Omega}' \cdot \vec{K}_{g'})} \frac{1}{\Phi_{K_{g'}, g'}(\vec{\Omega}')} \alpha_{g' \rightarrow g} P_{g' \rightarrow g} \\
&\quad \frac{\sigma_{g, s}}{K_g} \ln \left(\frac{\sigma_{g, t} - \mu K_g}{\sigma_{g, t} + K_g} \right) \sum_{g''=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g'} P_{g \rightarrow g''} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \Phi_{K_{g'}, g''}^0, \\
&\quad \cdot \frac{1}{2} \frac{\sigma_{g, s}}{K_g} \ln \left(\frac{\sigma_{g, t} - \mu K_g}{\sigma_{g, t} + K_g} \right) \sum_{g''=1}^{N_E} \alpha_{g \rightarrow g''} P_{g \rightarrow g''} \Phi_{K_{g'}, g''}^0, \\
&= \frac{\ln \left(\frac{\sigma_{g, t} - \mu K_g}{\sigma_{g, t} + K_g} \right)}{\ln \left(\frac{\sigma_{g, t} - K_g}{\sigma_{g, t} + K_g} \right)}.
\end{aligned}$$

On peut donc simuler μ en posant $F^{-1}(\zeta)$, si ζ suit une loi uniforme sur $[0, 1]$, soit par :

$$\mu = \frac{\sigma_{g, t} - (\sigma_{g, t} + K_g) \exp \left(\zeta \ln \left(\frac{\sigma_{g, t} - K_g}{\sigma_{g, t} + K_g} \right) \right)}{K_g}. \quad (4.17)$$

4.2 Applications

Nous commençons par présenter les résultats dans les cas isotropes, le plus simple, puis nous exposons les cas anisotropes.

4.2.1 Le cas multigroupe isotrope

Dans cette section, nous considérons les exemples précédents du cas mono-énergétique (voir chapitre 3.4) de la traversée de plaque. Nous montrerons dans cet exemple la qualité et l'apport des méthodes de simulation, pour des niveaux de difficultés différents.

Nous montrerons aussi le comportement de ces méthodes lorsque l'on cherche à les adapter à une architecture parallèle MIMD (multiple Instruction Multiple Data).

L'exemple de la traversée de plaque

Cet exemple est décrit dans la section 3.4.1. Nous prenons pour les probabilités de passage de groupe à groupe les valeurs suivantes (tableau 4.1). Ces valeurs sont indépendantes de la densité.

Grpe En \ Grpe En	1	2	3
1	0.911	0.0753	0.014
2	0.	0.954	0.0462
3	0.	0.	1.

TAB. 4.1 – Probabilités de changement de groupe.

Les résultats En prenant une densité de 40, nous obtenons les sections efficaces suivantes. Le paramètre optimal K est calculé automatiquement par groupe d'énergie (tableau 4.2): Nous faisons une simulation avec trois méthodes,

Densité	40		
Grpe En	1	2	3
σ_t	0.756	0.908	1.048
σ_s	0.712	0.892	0.928
K	0.355	0.369	0.586

TAB. 4.2 – Sections efficaces isotropes multigroupe.

la simulation naturelle, la simulation exponentielle et la simulation exponentielle et angulaire. Nous constatons alors une nette amélioration de la qualité pour la simulation exponentielle et angulaire. Le gain est environ de 230 par rapport à la simulation naturelle, et 70 pour la simulation exponentielle seule (tableaux 4.3, 4.4, 4.5).

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1200000	1	1.1379e-04	5.4638e-06	4.80 %	0h 0mn 21s	1.5951e+09
	2	5.7375e-04	1.2127e-05	2.11 %	0h 0mn 21s	3.2381e+08
	3	2.7741e-04	5.8394e-06	2.10 %	0h 0mn 21s	1.3965e+09
	+	9.6495e-04	1.4512e-05	1.50 %	0h 0mn 21s	2.2613e+08
3000000	1	1.1082e-04	3.4171e-06	3.08 %	0h 0mn 42s	2.0391e+09
	2	5.6908e-04	7.6262e-06	1.34 %	0h 0mn 42s	4.0939e+08
	3	2.7173e-04	3.6358e-06	1.34 %	0h 0mn 42s	1.8012e+09
	+	9.5163e-04	9.1043e-06	0.96 %	0h 0mn 42s	2.8725e+08
6000000	1	1.1392e-04	2.4622e-06	2.16 %	0h 1mn 17s	2.1423e+09
	2	5.6787e-04	5.3676e-06	0.95 %	0h 1mn 17s	4.5076e+08
	3	2.6776e-04	2.5340e-06	0.95 %	0h 1mn 17s	2.0226e+09
	+	9.4955e-04	6.4197e-06	0.68 %	0h 1mn 17s	3.1513e+08
10000000	1	1.1416e-04	1.9180e-06	1.68 %	0h 2mn 10s	2.2625e+09
	2	5.6797e-04	4.1679e-06	0.73 %	0h 2mn 10s	4.7770e+08
	3	2.7108e-04	1.9878e-06	0.73 %	0h 2mn 10s	2.0999e+09
	+	9.5320e-04	4.9952e-06	0.52 %	0h 2mn 10s	3.0829e+08

TAB. 4.3 – Traversée de la plaque (densité de 40): Simulation naturelle.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	1	1.1215e-04	1.4590e-06	1.30 %	0h 0mn 20s	2.3490e+10
	2	5.6973e-04	6.1496e-06	1.08 %	0h 0mn 20s	1.3221e+09
	3	2.6490e-04	3.0937e-06	1.17 %	0h 0mn 20s	5.2241e+09
	+	9.4679e-04	7.0020e-06	0.74 %	0h 0mn 20s	1.0198e+09
3000000	1	1.1215e-04	8.3426e-07	0.74 %	0h 0mn 59s	2.4353e+10
	2	5.7228e-04	3.6989e-06	0.65 %	0h 0mn 59s	1.2388e+09
	3	2.6767e-04	1.8468e-06	0.69 %	0h 0mn 59s	4.9696e+09
	+	9.5210e-04	4.1980e-06	0.44 %	0h 0mn 59s	9.6173e+08
4000000	1	1.1216e-04	7.2731e-07	0.65 %	0h 1mn 13s	2.5896e+10
	2	5.7560e-04	3.2572e-06	0.57 %	0h 1mn 13s	1.2912e+09
	3	2.6793e-04	1.5660e-06	0.58 %	0h 1mn 13s	5.5857e+09
	+	9.5569e-04	3.6697e-06	0.38 %	0h 1mn 13s	1.0172e+09

TAB. 4.4 – Traversée de la plaque (densité de 40): Biaisage Exponentiel seul.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	1	1.1373e-04	1.0452e-06	0.92 %	0h 0mn 19s	4.8178e+10
	2	5.7358e-04	2.1866e-06	0.38 %	0h 0mn 19s	1.1008e+10
	3	2.6760e-04	1.5038e-06	0.56 %	0h 0mn 19s	2.3273e+10
	+	9.5520e-04	1.7747e-06	0.19 %	0h 0mn 19s	1.6711e+10
500000	1	1.1282e-04	4.6586e-07	0.41 %	0h 0mn 19s	2.4252e+11
	2	5.7362e-04	9.7831e-07	0.17 %	0h 0mn 19s	5.4992e+10
	3	2.7023e-04	6.7436e-07	0.25 %	0h 0mn 19s	1.1573e+11
	+	9.5668e-04	7.9247e-07	0.08 %	0h 0mn 19s	8.3808e+10
1000000	1	1.1209e-04	3.2833e-07	0.29 %	0h 0mn 45s	2.0614e+11
	2	5.7439e-04	6.9245e-07	0.12 %	0h 0mn 45s	4.6345e+10
	3	2.7143e-04	4.7796e-07	0.18 %	0h 0mn 45s	9.7274e+10
	+	9.5790e-04	5.6065e-07	0.06 %	0h 0mn 45s	7.0698e+10

TAB. 4.5 – Traversée de la plaque (densité de 40): Biaisage Exponentiel et Angulaire.

1. Simulation sur CRAY_T3E (60 PEs)

Traversée de plaque avec une densité de 50 Nous reprenons les calculs précédents de traversée de plaque avec ici une densité de 50. Nous obtenons les sections efficaces suivantes. Le paramètre optimal K est calculé automatiquement par groupe d'énergie (tableau 4.6).

Densité	50		
Grpe En	1	2	3
σ_t	0.945	1.135	1.31
σ_s	0.89	1.12	1.16
K	0.451	0.468	0.732

TAB. 4.6 – *Sections efficaces isotropes multigroupe.*

Le gain de la simulation exponentielle et angulaire par rapport à la simulation naturelle est environ de 930, et de 232 par rapport à la simulation exponentielle seule (tableaux 4.7, 4.8, 4.9).

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1200000	1	1.2930e-05	1.5138e-06	11.71 %	0h 0mn 22s	1.9834e+10
	2	8.9219e-05	4.2804e-06	4.80 %	0h 0mn 22s	2.4809e+09
	3	4.7597e-05	2.0774e-06	4.36 %	0h 0mn 22s	1.0533e+10
	+	1.4975e-04	4.9919e-06	3.33 %	0h 0mn 22s	1.8241e+09
3000000	1	1.1677e-05	9.2014e-07	7.88 %	0h 0mn 45s	2.6247e+10
	2	9.3215e-05	2.7590e-06	2.96 %	0h 0mn 45s	2.9193e+09
	3	4.7956e-05	1.3246e-06	2.76 %	0h 0mn 45s	1.2666e+10
	+	1.5285e-04	3.1952e-06	2.09 %	0h 0mn 45s	2.1766e+09
6000000	1	1.1171e-05	6.4998e-07	5.82 %	0h 1mn 22s	2.8866e+10
	2	9.4635e-05	1.9553e-06	2.07 %	0h 1mn 22s	3.1899e+09
	3	4.5813e-05	8.9859e-07	1.96 %	0h 1mn 22s	1.5103e+10
	+	1.5162e-04	2.2474e-06	1.48 %	0h 1mn 22s	2.4144e+09
10000000	1	1.1581e-05	5.20624e-07	4.50 %	0h 2mn 18s	2.8663e+10
	2	9.3445e-05	1.50751e-06	1.61 %	0h 2mn 18s	3.4290e+09
	3	4.5706e-05	7.01692e-07	1.54 %	0h 2mn 18s	1.5776e+10
	+	1.5073e-04	1.74208e-06	1.16 %	0h 2mn 18s	2.3877e+09

TAB. 4.7 – Traversée de la plaque (densité de 50): Simulation naturelle.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	1	1.0874e-05	2.7654e-07	2.54 %	0h 0mn 25s	5.2307e+11
	2	8.7547e-05	1.4630e-06	1.67 %	0h 0mn 25s	1.8689e+10
	3	4.6090e-05	1.7579e-06	3.81 %	0h 0mn 25s	1.2944e+10
	+	1.4451e-04	2.3013e-06	1.59 %	0h 0mn 25s	7.5527e+09
3000000	1	1.0827e-05	1.5319e-07	1.41 %	0h 1mn 16s	5.6069e+11
	2	8.9512e-05	9.3901e-07	1.05 %	0h 1mn 16s	1.4923e+10
	3	4.6614e-05	8.1269e-07	1.74 %	0h 1mn 16s	1.9922e+10
	+	1.4695e-04	1.2498e-06	0.85 %	0h 1mn 16s	8.4243e+09
4000000	1	1.0793e-05	1.3537e-07	1.25 %	0h 1mn 34s	5.8056e+11
	2	8.9814e-05	8.2097e-07	0.91 %	0h 1mn 34s	1.5784e+10
	3	4.6013e-05	6.4962e-07	1.41 %	0h 1mn 34s	2.5209e+10
	+	1.4662e-04	1.0543e-06	0.72 %	0h 1mn 34s	9.5709e+09

TAB. 4.8 – Traversée de la plaque (densité de 50): Biaisage Exponentiel seul.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	1	1.1076e-05	1.2925e-07	1.17 %	0h 0mn 24s	2.4942e+12
	2	9.2118e-05	3.4421e-07	0.37 %	0h 0mn 24s	3.5168e+11
	3	4.5010e-05	2.3834e-07	0.53 %	0h 0mn 24s	7.3346e+11
	+	1.4820e-04	2.8051e-07	0.19 %	0h 0mn 24s	5.2952e+11
500000	1	1.0948e-05	5.7452e-08	0.52 %	0h 0mn 24s	1.2623e+13
	2	9.2672e-05	1.5436e-07	0.17 %	0h 0mn 24s	1.7488e+12
	3	4.5209e-05	1.0694e-07	0.24 %	0h 0mn 24s	3.6436e+12
	+	1.4883e-04	1.2556e-07	0.08 %	0h 0mn 24s	2.6428e+12
1000000	1	1.0991e-05	4.0703e-08	0.37 %	0h 0mn 57s	1.0589e+13
	2	9.2585e-05	1.0926e-07	0.12 %	0h 0mn 57s	1.4697e+12
	3	4.5306e-05	7.5699e-08	0.17 %	0h 0mn 57s	3.0615e+12
	+	1.4888e-04	8.8904e-08	0.06 %	0h 0mn 57s	2.2196e+12

TAB. 4.9 – Traversée de la plaque (densité de 50): Biaisage Exponentiel et Angulaire.

1. Simulation sur CRAY_T3E (60 PEs)

Si l'on compare les deux simulations avec les densités respectives de 40 et 50, on constate que le gain de la simulation exponentielle et angulaire par rapport à la simulation naturelle est 4 fois plus important dans le cas de la densité 50. De même, le gain de la simulation exponentielle et angulaire par rapport à la simulation exponentielle seule est 3 fois plus important dans le cas avec la densité 50.

Cela souligne le fait que plus un problème est difficile, c'est à dire plus la densité de particule recherchée est faible, plus les méthodes de biaisage seront performantes.

Traversée de plaque avec une densité de 50 et avec 10 processeurs

Pour apprécier l'efficacité de la simulation sur des architectures parallèles MIMD, nous allons simuler le même exemple des tableaux 4.7, 4.8, 4.9. Ces simulations ayant été faites sur 60 processeurs, nous allons les comparer avec une simulation sur 10 processeurs (tableaux 4.10, 4.11, 4.12).

Nous constatons à nombre de particules égal, un gain de 5.55 de la simulation naturelle avec 60 processeurs, par rapport à la même simulation avec 10 processeurs. Ce gain dans la simulation exponentielle seule est de 5.17, et de 5.22 dans la simulation exponentielle et angulaire.

Ce gain d'environ 5 pour l'ensemble des simulations, est très proche du rapport du nombre de processeurs dans ces simulations, qui est de 6. Cela signifie que le gain par processeur dans une simulation est pratiquement de 1 (0.87 exactement). Nous avons la confirmation que les méthodes de Monte Carlo sont particulièrement bien adaptées aux simulations sur architecture parallèle MIMD.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1200000	1	1.2936e-05	1.7222e-06	13.31 %	0h 1mn 39s	3.4056e+09
	2	9.2515e-05	4.3035e-06	4.65 %	0h 1mn 39s	5.4541e+08
	3	4.5201e-05	2.0025e-06	4.43 %	0h 1mn 39s	2.5191e+09
	+	1.5065e-04	5.0484e-06	3.35 %	0h 1mn 39s	3.9634e+08
3000000	1	1.2304e-05	9.8975e-07	8.04 %	0h 4mn 9s	4.0996e+09
	2	9.2342e-05	2.7679e-06	3.00 %	0h 4mn 9s	5.2420e+08
	3	4.5227e-05	1.2670e-06	2.80 %	0h 4mn 9s	2.5018e+09
	+	1.4987e-04	3.2004e-06	2.14 %	0h 4mn 9s	3.9211e+08

TAB. 4.10 – *Traversée de la plaque (densité de 50), avec 10 processeurs: Simulation naturelle.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	1	1.1301e-05	2.8679e-07	2.54 %	0h 2mn 22s	8.5624e+10
	2	9.0724e-05	1.7459e-06	1.92 %	0h 2mn 22s	2.3103e+09
	3	4.6523e-05	1.3041e-06	2.80 %	0h 2mn 22s	4.1411e+09
	+	1.4855e-04	2.1953e-06	1.48 %	0h 2mn 22s	1.4612e+09
2300000	1	1.1235e-05	1.8521e-07	1.65 %	0h 5mn 23s	9.0251e+10
	2	9.1142e-05	1.3736e-06	1.51 %	0h 5mn 23s	1.6409e+09
	3	4.5624e-05	7.0625e-07	1.55 %	0h 5mn 23s	6.2070e+09
	+	1.4800e-04	1.5540e-06	1.05 %	0h 5mn 23s	1.2820e+09

TAB. 4.11 – *Traversée de la plaque (densité de 50), avec 10 processeurs: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
100000	1	1.0807e-05	1.2748e-07	1.18 %	0h 0mn 25s	2.4614e+12
	2	9.2861e-05	3.4511e-07	0.37 %	0h 0mn 25s	3.3585e+11
	3	4.5043e-05	2.3895e-07	0.53 %	0h 0mn 25s	7.0054e+11
	+	1.4871e-04	2.8105e-07	0.19 %	0h 0mn 25s	5.0640e+11
500000	1	1.0892e-05	5.7307e-08	0.53 %	0h 2mn 5s	2.4360e+12
	2	9.2624e-05	1.5450e-07	0.17 %	0h 2mn 5s	3.3516e+11
	3	4.5354e-05	1.0703e-07	0.24 %	0h 2mn 5s	6.9831e+11
	+	1.4887e-04	1.2568e-07	0.08 %	0h 2mn 5s	5.0650e+11

TAB. 4.12 – *Traversée de la plaque (densité de 50), avec 10 processeurs: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur CRAY_T3E (10 PEs)

4.2.2 Le cas multigroupe anisotrope

Dans cette section nous nous intéressons au cas le plus complexe du traitement de l'équation de transport multigroupe anisotrope.

L'exemple de la traversée de plaque

Dans cet exemple, nous étudierons la qualité des différentes simulations. Nous observons de plus le comportement des particules dans les différents groupes d'énergie.

Les données Ces particules auront une fonction de transfert anisotrope. Nous développerons cette fonction suivant les 4 premiers polynômes de Legendre (tableaux 4.13, 4.14, 4.15).

$\sigma \setminus$ Grpe En	1- > 1	1- > 2	1- > 3
σ_0	6,4243	0.53107	0.098556
σ_1	2,2982	0.0020391	0.00062109
σ_2	1,3118	-0.0070366	2.2883e-06
σ_3	0,65878	-0.0025121	0
σ_4	0,25983	-0.00054727	0

TAB. 4.13 – Coefficients des polynômes de Legendre du premier groupe d'énergie.

$\sigma \setminus$ Grpe En	2- > 2	2- > 3
σ_0	8.4259	0.40845
σ_1	2.2233	-0.005549
σ_2	0.9126	-0.0066052
σ_3	0.26741	-0.0019046
σ_4	0.091755	-1.7678e-05

TAB. 4.14 – Coefficients des polynômes de Legendre du deuxième groupe d'énergie.

$\sigma \setminus$ Grpe En	3- > 3
σ_0	9.1636
σ_1	1.9371
σ_2	0.59713
σ_3	0.072162
σ_4	0.014572

TAB. 4.15 – Coefficients des polynômes de Legendre du troisième groupe d'énergie.

Densité	50		
Groupe En	1	2	3
σ_t	0.9440	1.1358	1.3094
σ_s	0.892	1.13	1.22
K	0.309085	0.215323	0.658963

TAB. 4.16 – Paramètres de simulation.

Le paramètre optimal K est calculé automatiquement (tableau 4.16).

Les résultats Une visualisation des différentes simulations nous permet de mieux comprendre les améliorations apportées par les biaisages. Pour cela nous observons au 30ième choc ($NbIter$) des 1000 particules envoyées, les grandeurs suivantes: le nombre de particules présentes: $NbNeut$, la position et l'éclatement du nuage des particules (Centre(x, y, z), Diamètre moyen), le nombre arrivé $NtAr$ et sorti $NtSo$, et enfin un contrôle du poids (minimum: Pm , maximum: PM , moyen: Py). Des précisions sont aussi données quant aux groupes d'énergie visualisés. $NbGrTot$ est le nombre total de groupe d'énergie dans la simulation. Gr est le groupe dans lequel se trouvent les particules visualisées sont (de 0 à $NbGrTot - 1$); s'il n'est pas présent alors tous les groupes sont alors visualisés. Enfin, Nb représente le nombre de particules présent d'un groupe d'énergie, lorsque nous visualiserons un groupe déterminé.

Nous voyons, comme dans le cas monocinétique, une nette progression vers le détecteur du nuage de particules suivant la simulation, ce qui entraîne une augmentation du nombre de particules arrivées, pour le même nombre de chocs. Cette progression est très nettement visible pour chaque groupe d'énergie.

Pour chaque simulation, nous visualiserons d'abord la totalité des groupes d'énergie à la 30ième itération. Puis, nous visualiserons dans cet ensemble, chaque groupe d'énergie séparément, pour en déduire une comparaison.

Comme dans le cas monocinétique, la progression du nuage de particules est beaucoup plus prononcée pour le biaisage "exponentiel et angulaire" (voir figure 3.6). De plus une coloration des particules en fonction de leur poids nous montre une nette classification des couleurs par zone de proximité du détecteur pour ce même biaisage (voir figure 3.6). Cette classification garantit une arrivée de particules dans un même intervalle de poids, correspondant de ce fait à une variance faible. Nous voyons aussi que cette classification est très nettement dégradée pour le "biaisage exponentiel seul" (voir figure 3.5), et est inexistante pour la "simulation naturelle" où toutes les particules ont le même poids (voir figure 3.4). Malgré les différents passages de groupes d'énergie, la simulation exponentielle et angulaire permet de garder pour chaque particule une bonne classification de son poids par rapport à sa position. Les particules arriveront donc avec des poids très proche et la variance du calcul sera réduite.

Par rapport aux groupes d'énergie, nous constatons que pour le biaisage exponentiel et angulaire, un nombre important de particules se trouve dans le 2ième groupe (488 sur 647 présents). Dans le biaisage exponentiel, de même que dans la simulation naturelle, le plus grand nombre de particule, se retrouve dans

le 3ième groupe respectivement (385 sur 625 présents) et (243 sur 396 présents).

Cela nous montre encore l'apport du biaisage exponentiel et angulaire sur le passage de groupe à groupe. En effet, les tableaux 4.17, 4.18, 4.19 (p.89), nous montrent que le groupe d'énergie le plus significatif dans la réponse totale est le 2ième. Sans remontée en énergie, il est nécessaire de conserver au maximum les particules dans ce groupe le plus important, de façon à avoir la meilleure précision.

Simulation naturelle

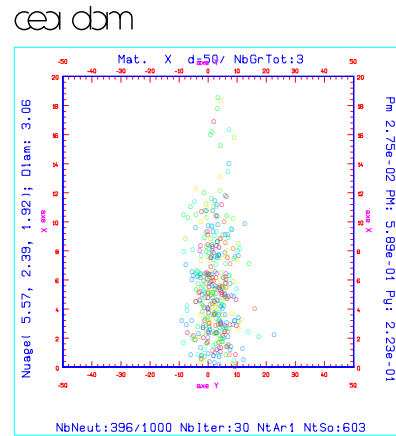


FIG. 4.1 – Traversée de plaque (Tous groupes d'énergie): Simulation naturelle.

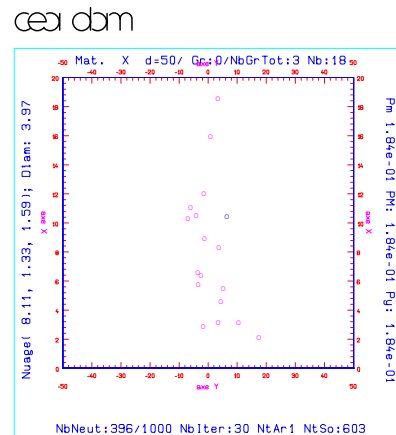


FIG. 4.2 – Traversée de plaque (1er groupe d'énergie): Simulation naturelle.

Simulation naturelle (suite)

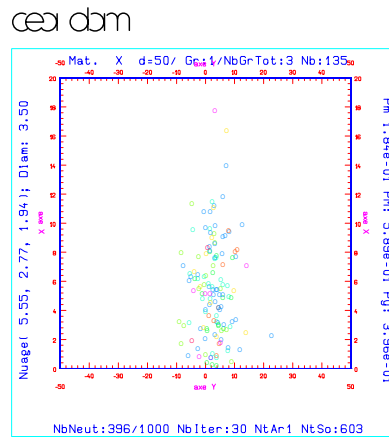


FIG. 4.3 – Traversée de plaque (2ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.

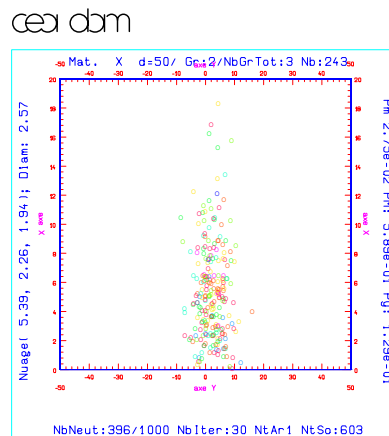


FIG. 4.4 – Traversée de plaque (3ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.

Simulation exponentielle

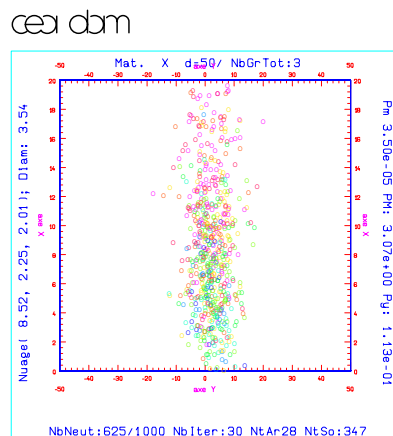


FIG. 4.5 – Traversée de plaque (Tous groupes): Biaisage exponentiel seul.

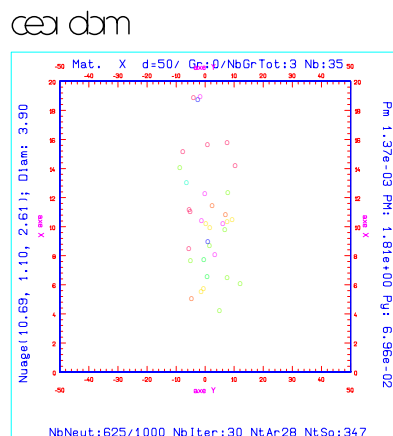


FIG. 4.6 – Traversée de plaque (groupe 1): Biaisage exponentiel seul.

Simulation exponentielle (suite)

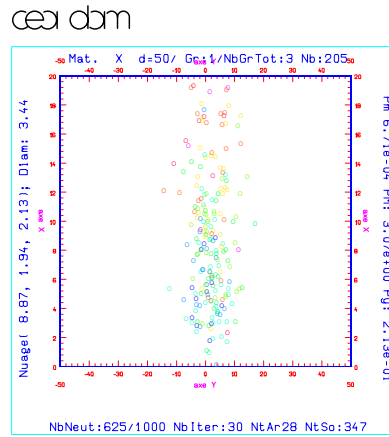


FIG. 4.7 – Traversée de plaque (2ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel seul.

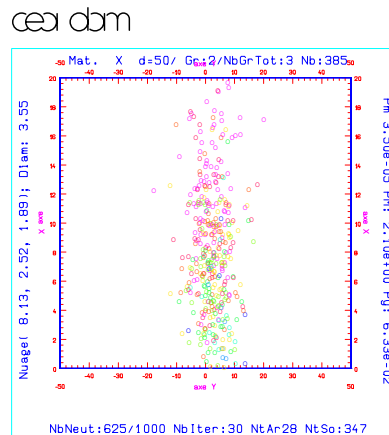


FIG. 4.8 – Traversée de plaque (3ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel seul.

La simulation exponentielle et angulaire

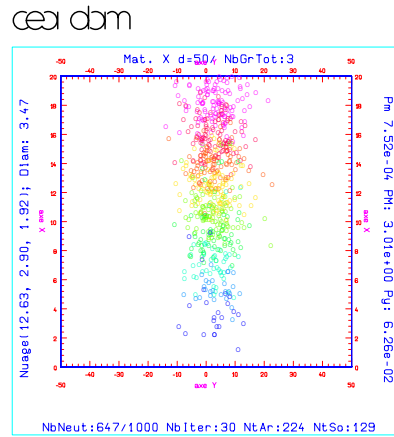


FIG. 4.9 – Traversée de plaque (Tous les groupes d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.

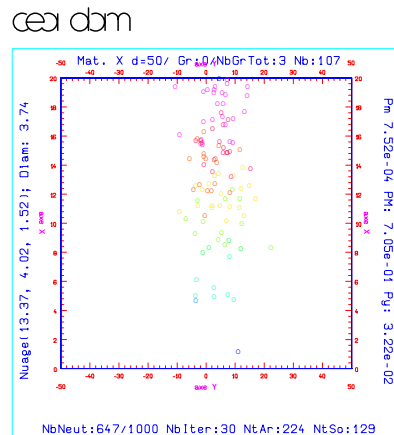


FIG. 4.10 – Traversée de plaque (1er groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.

La simulation exponentielle et angulaire (suite)

ceci dbm

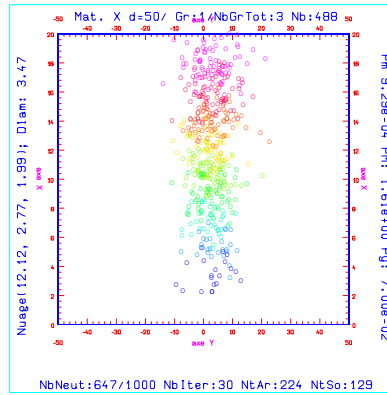


FIG. 4.11 – *Traversée de plaque (2ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.*

ceci dbm

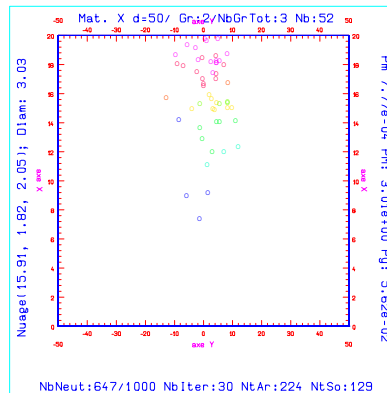


FIG. 4.12 – *Traversée de plaque (3ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et angulaire.*

D'après les résultats numériques, nous constatons une nette amélioration de la qualité pour la simulation exponentielle et angulaire. Le gain est environ de 53 par rapport à la simulation naturelle, et 31 pour la simulation exponentielle seule, ce qui reste un gain important (tableaux 4.17, 4.18, 4.19).

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1250000	1	9.9599e-05	4.6342e-06	4.65 %	0h 0mn 23s	2.0245e+09
	2	4.3292e-04	1.0005e-05	2.31 %	0h 0mn 23s	4.3436e+08
	3	1.8916e-04	4.4823e-06	2.37 %	0h 0mn 23s	2.1640e+09
	+	7.2168e-04	1.1893e-05	1.65 %	0h 0mn 23s	3.0741e+08
5000000	1	9.9599e-05	2.3229e-06	2.37 %	0h 1mn 32s	2.0143e+09
	2	4.3437e-04	5.0096e-06	1.15 %	0h 1mn 32s	4.3311e+08
	3	1.8717e-04	2.2309e-06	1.19 %	0h 1mn 32s	2.1840e+09
	+	7.1968e-04	5.9509e-06	0.83 %	0h 1mn 32s	3.0694e+08
10000000	1	9.7231e-05	1.6293e-06	1.68 %	0h 3mn 5s	2.0363e+09
	2	4.3552e-04	3.5466e-06	0.81 %	0h 3mn 5s	4.2974e+08
	3	1.8754e-04	1.5910e-06	0.85 %	0h 3mn 5s	2.1353e+09
	+	7.2029e-04	4.2114e-06	0.58 %	0h 3mn 5s	3.0478e+08
15000000	1	9.8091e-05	1.3392e-06	1.37 %	0h 4mn 37s	2.0129e+09
	2	4.3617e-04	2.9029e-06	0.67 %	0h 4mn 37s	9.4264e+10
	3	1.8810e-04	1.2970e-06	0.69 %	0h 4mn 37s	2.1461e+09
	+	7.2236e-04	3.4473e-06	0.48 %	0h 4mn 37s	3.0379e+08

TAB. 4.17 – *Traversée de la plaque : Simulation naturelle.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	1	9.9531e-05	2.3497e-06	2.36 %	0h 0mn 29s	6.2457e+09
	2	4.4713e-04	8.5603e-06	1.91 %	0h 0mn 29s	4.7057e+08
	3	1.8696e-04	3.2555e-06	1.74 %	0h 0mn 29s	3.2536e+09
	+	7.3362e-04	9.4395e-06	1.29 %	0h 0mn 29s	3.8699e+08
2000000	1	9.8214e-05	1.5573e-06	1.59 %	0h 0mn 59s	6.9891e+09
	2	4.4155e-04	5.5523e-06	1.26 %	0h 0mn 59s	5.4980e+08
	3	1.9063e-04	2.3675e-06	1.24 %	0h 0mn 59s	3.0240e+09
	+	7.3039e-04	6.2218e-06	0.85 %	0h 0mn 59s	4.3783e+08
5000000	1	9.9324e-05	9.4900e-07	0.96 %	0h 2mn 11s	8.4761e+09
	2	4.4396e-04	3.7069e-06	0.83 %	0h 2mn 11s	5.5552e+08
	3	1.9168e-04	1.5898e-06	0.83 %	0h 2mn 11s	3.0202e+09
	+	7.3496e-04	4.1364e-06	0.56 %	0h 2mn 11s	4.4614e+08
10000000	1	9.9344e-05	6.9904e-07	0.70 %	0h 4mn 4s	8.3871e+09
	2	4.4168e-04	2.4612e-06	0.56 %	0h 4mn 4s	6.7655e+08
	3	1.9074e-04	1.1411e-06	0.60 %	0h 4mn 4s	3.1474e+09
	+	7.3177e-04	2.7963e-06	0.38 %	0h 4mn 4s	5.2415e+08

TAB. 4.18 – *Traversée de la plaque: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
20000	1	9.8689e-05	1.8017e-06	1.83 %	0h 0mn 26s	1.1848e+10
	2	4.4167e-04	3.5067e-06	0.79 %	0h 0mn 26s	3.1277e+09
	3	1.8358e-04	2.3641e-06	1.29 %	0h 0mn 26s	6.8816e+09
	+	7.2394e-04	2.6178e-06	0.36 %	0h 0mn 26s	5.6125e+09
100000	1	9.8219e-05	8.0151e-07	0.82 %	0h 0mn 56s	2.7797e+10
	2	4.4136e-04	1.5762e-06	0.36 %	0h 0mn 56s	7.1875e+09
	3	1.8909e-04	1.0753e-06	0.57 %	0h 0mn 56s	1.5445e+10
	+	7.2867e-04	1.1728e-06	0.16 %	0h 0mn 56s	1.2982e+10
500000	1	9.8493e-05	3.5800e-07	0.36 %	0h 4mn 2s	3.2242e+10
	2	4.3891e-04	7.0307e-07	0.16 %	0h 4mn 2s	8.3596e+09
	3	1.8994e-04	4.8069e-07	0.25 %	0h 4mn 2s	1.7884e+10
	+	7.2734e-04	5.2185e-07	0.07 %	0h 4mn 2s	1.5174e+10
1000000	1	9.8343e-05	2.5294e-07	0.26 %	0h 7mn 40s	3.3978e+10
	2	4.3949e-04	4.9669e-07	0.11 %	0h 7mn 40s	8.8118e+09
	3	1.8961e-04	3.3939e-07	0.18 %	0h 7mn 40s	1.8873e+10
	+	7.2744e-04	3.6807e-07	0.05 %	0h 7mn 40s	1.6047e+10

TAB. 4.19 – *Traversée de la plaque: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur CRAY_T3E (60 PEs)

L'exemple du tuyau

Dans cet exemple nous traitons un cas plus difficile, où la vitesse de convergence est très faible. Nous allons aussi comparer l'apport des méthodes de biaisage, en simulant ce cas dans des niveaux de difficultés différents.

Les données Avec les densités de 40 pour le tuyau et de 160 pour le milieu opaque, on obtient les différents paramètres suivants par groupes d'énergie.

Densité	40		
Groupe En	1	2	3
σ_t	0.7552	0.9086	1.0475
σ_s	0.714	0.894	0.927
K	0.247268	0.172257	0.52717

TAB. 4.20 – Paramètres de simulation.

Densité	160		
Groupe En	1	2	3
σ_t	3.0208	3.6346	4.1900
σ_s	2.86	3.58	3.71
K	0.989071	0.689028	2.10868

TAB. 4.21 – Paramètres de simulation.

Le paramètre optimal K est calculé automatiquement, cependant comme nous l'avons vu au chapitre précédent, sa valeur dépend de la maille (tableaux 4.20, 4.21).

Les résultats Nous visualisons les différentes simulations. Même dans ce cas complexe, nous retrouvons une nette progression du nuage de particules dans la simulation exponentielle et angulaire par rapport à la simulation naturelle premièrement, et la simulation exponentielle. Contrairement à ces simulations, la simulation exponentielle et angulaire maintient le plus possible les particules dans le 2ième groupe d'énergie. Ce maintien permet une amélioration de la qualité du résultat puisque les tableaux 4.22, 4.23, 4.24 nous indiquent que ce groupe a un poids nettement plus important que les autres dans le résultat.

Simulation naturelle

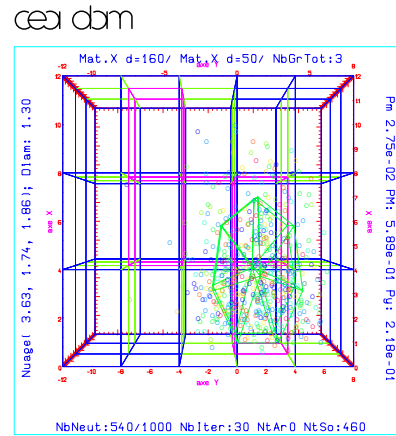


FIG. 4.13 – Traversée du tuyau (Tous les groupes d'énergie): Simulation naturelle.

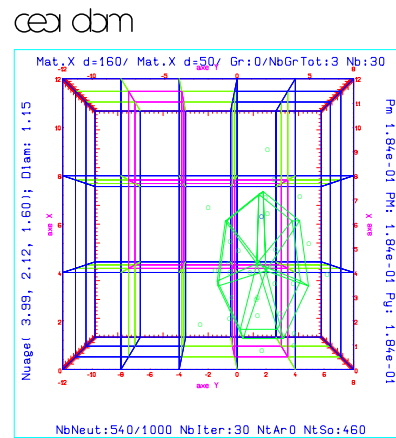
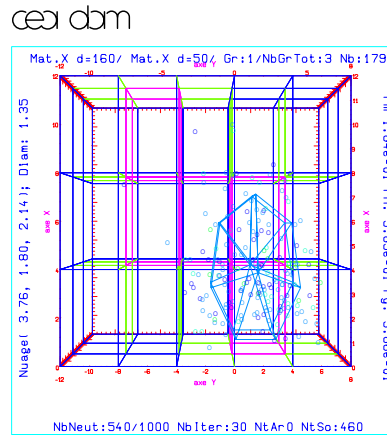
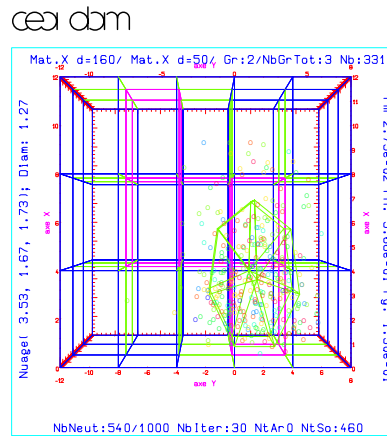
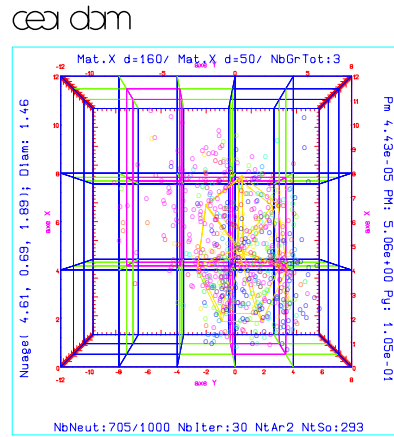
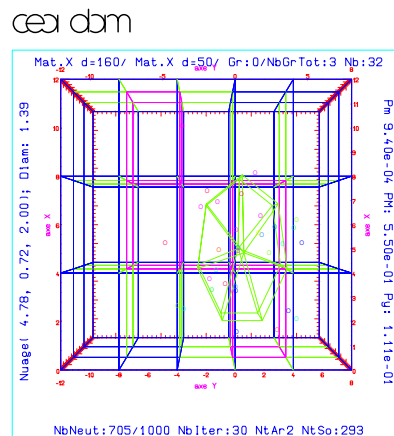


FIG. 4.14 – Traversée du tuyau (1er groupe d'énergie): Simulation naturelle.

Simulation naturelle (suite)

FIG. 4.15 – *Traversée du tuyau (2ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.*FIG. 4.16 – *Traversée du tuyau (3ème groupe d'énergie): Simulation naturelle.*

Simulation exponentielle

FIG. 4.17 – *Traversée du tuyau (Tous groupes): Simulation Exponentielle.*FIG. 4.18 – *Traversée du tuyau (groupe 1): Simulation Exponentielle.*

Simulation exponentielle (suite)

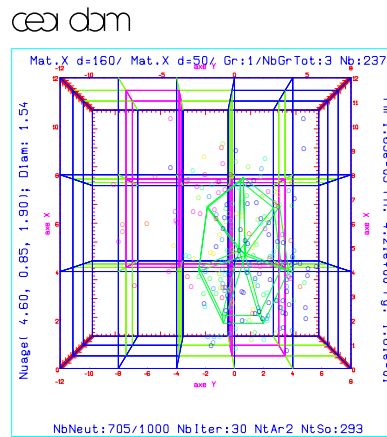


FIG. 4.19 – Traversée du tuyau (2ème groupe d'énergie): Simulation Exponentielle.

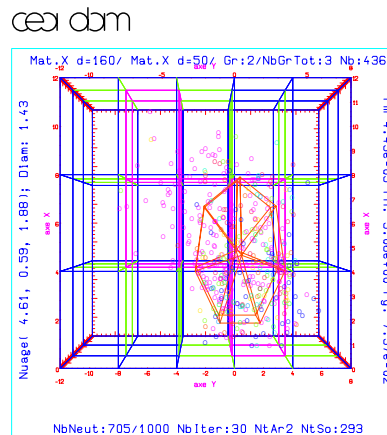


FIG. 4.20 – Traversée du tuyau (3ème groupe d'énergie): Simulation Exponentielle.

Simulation exponentielle et angulaire

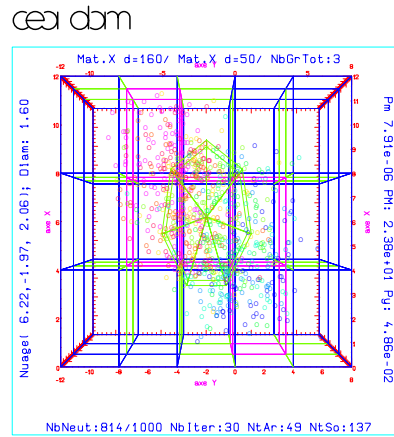


FIG. 4.21 – Traversée du tuyau (Tous les groupes d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.

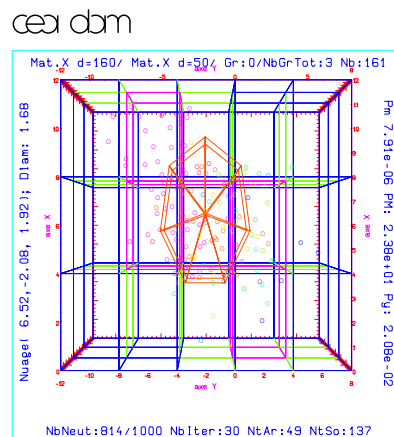


FIG. 4.22 – Traversée du tuyau (1er groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.

Simulation exponentielle et angulaire (suite)

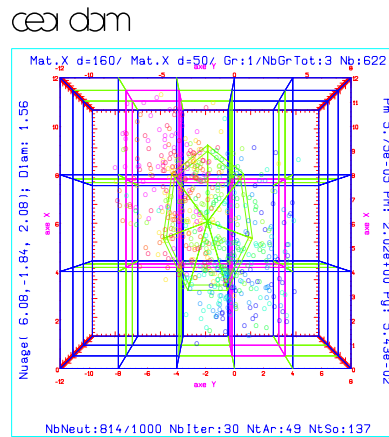


FIG. 4.23 – Traversée du tuyau (2ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.

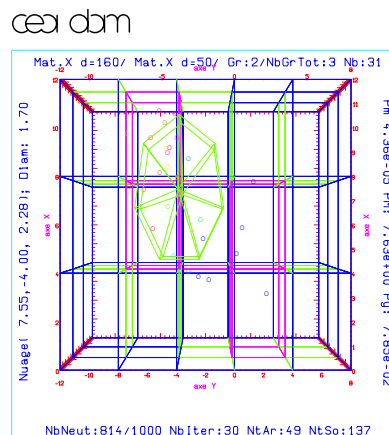


FIG. 4.24 – Traversée du tuyau (3ème groupe d'énergie): Biaisage exponentiel et Angulaire.

Nous constatons une bonne amélioration de la qualité dans le cas de la simulation exponentielle et angulaire, même dans un cas où la simulation exponentielle seule n'apporte pas d'amélioration par rapport à la méthode naturelle. Le gain est environ de 2.3 par rapport à la simulation naturelle et la simulation exponentielle seule (tableaux 4.22, 4.23, 4.24).

Ce gain de la simulation exponentielle et angulaire est moins important que lors de la traversée de plaque. Ceci est dû en partie au temps passé à l'échantillonnage de la fonction d'importance multigroupe (dans nos simulations on inverse les densités marginales avec une méthode itérative de Newton). On peut encore nettement améliorer ce point en employant des techniques d'échantillonnage moins coûteuses en temps (voir [22], [10]). Néanmoins même avec la méthode que nous proposons le gain est assez appréciable.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	1	3.2359e-05	3.7226e-06	11.50 %	0h 0mn 31s	2.3278e+09
	2	9.8385e-05	6.1913e-06	6.29 %	0h 0mn 31s	8.4154e+08
	3	3.7900e-05	2.8621e-06	7.55 %	0h 0mn 31s	3.9379e+09
	+	1.6864e-04	7.7695e-06	4.61 %	0h 0mn 31s	5.3438e+08
5000000	1	3.7724e-05	1.8051e-06	4.78 %	0h 2mn 37s	1.9548e+09
	2	9.4735e-05	2.7265e-06	2.88 %	0h 2mn 37s	8.5685e+08
	3	3.9468e-05	1.2592e-06	3.19 %	0h 2mn 37s	4.0173e+09
	+	1.7193e-04	3.5034e-06	2.04 %	0h 2mn 37s	5.1894e+08
9500000	1	3.9345e-05	1.3370e-06	3.40 %	0h 4mn 59s	1.8710e+09
	2	9.3930e-05	1.9746e-06	2.10 %	0h 4mn 59s	8.5779e+08
	3	3.9420e-05	9.1000e-07	2.31 %	0h 4mn 59s	4.0387e+09
	+	1.7270e-04	2.5520e-06	1.48 %	0h 4mn 59s	5.1353e+08

TAB. 4.22 – *Traversée du tuyau: Simulation naturelle.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
1000000	1	3.4134e-05	1.8807e-06	5.51 %	0h 1mn 29s	3.1768e+09
	2	9.3825e-05	3.4792e-06	3.71 %	0h 1mn 29s	9.2820e+08
	3	3.9037e-05	1.3504e-06	3.46 %	0h 1mn 29s	6.1619e+09
	+	1.6700e-04	4.1772e-06	2.50 %	0h 1mn 29s	6.4393e+08
2000000	1	3.5478e-05	1.6006e-06	4.51 %	0h 2mn 53s	2.2562e+09
	2	9.7318e-05	2.5381e-06	2.61 %	0h 2mn 53s	8.9728e+08
	3	3.9453e-05	9.3329e-07	2.37 %	0h 2mn 53s	6.6363e+09
	+	1.7225e-04	3.1411e-06	1.82 %	0h 2mn 53s	5.8586e+08
4000000	1	3.5836e-05	1.0465e-06	2.92 %	0h 5mn 47s	2.6314e+09
	2	9.9211e-05	2.0204e-06	2.04 %	0h 5mn 47s	7.0600e+08
	3	4.0451e-05	7.4200e-07	1.83 %	0h 5mn 47s	5.2343e+09
	+	1.7550e-04	2.3923e-06	1.36 %	0h 5mn 47s	5.0354e+08

TAB. 4.23 – *Traversée du tuyau: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
154000	1	3.5881e-05	1.0241e-06	2.85 %	0h 2mn 57s	5.3872e+09
	2	9.5383e-05	1.5759e-06	1.65 %	0h 2mn 57s	2.2748e+09
	3	3.9732e-05	1.1012e-06	2.77 %	0h 2mn 57s	4.6588e+09
	+	1.7100e-04	1.1012e-06	1.26 %	0h 2mn 57s	1.2195e+09
300000	1	3.8419e-05	8.10841e-07	2.11 %	0h 5mn 48s	5.0442e+09
	2	9.5754e-05	1.12154e-06	1.17 %	0h 5mn 48s	2.6346e+09
	3	3.9407e-05	7.74471e-07	1.96 %	0h 5mn 48s	5.5199e+09
	+	1.7358e-04	1.56695e-06	0.90 %	0h 5mn 48s	1.1703e+09

TAB. 4.24 – *Traversée du tuyau: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur CRAY_T3E (60 PEs)

Traversée d'un tuyau de densité 70 Nous allons maintenant simuler un cas plus difficile, en prenant dans le tuyau une densité de 70. Les différents paramètres correspondants sont donnés dans le tableau 4.25 suivant:

Densité	70		
Groupe En	1	2	3
σ_t	1.3216	1.5901	1.8331
σ_s	1.25	1.56	1.62
K	0.4327	0.3015	0.9225

TAB. 4.25 – *Paramètres de simulation.*

Le paramètre optimal K est calculé automatiquement (tableau 4.25).

Nous retrouvons une nette amélioration de la qualité pour la simulation exponentielle et angulaire. Le gain est environ de 33.3 par rapport à la simulation naturelle, et 15.7 pour la simulation exponentielle seule (tableaux 4.26, 4.27, 4.28).

En passant dans le tuyau d'une densité de 40 à une densité de 70, le problème a été rendu plus difficile (la densité de particules calculée a été diminuée d'un facteur 18), cependant les gains ont été largement améliorés pour la méthode de simulation exponentielle et angulaire. Cette amélioration a été d'un facteur d'environ 15 par rapport à la simulation naturelle, et de 7 par rapport à la simulation exponentielle seule, ce qui est une très importante amélioration.

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
5000000	1	1.1404e-06	2.2779e-07	19.98 %	0h 2mn 23s	1.3477e+11
	2	5.7138e-06	5.3987e-07	9.45 %	0h 2mn 23s	2.3993e+10
	3	2.0055e-06	2.0369e-07	10.16 %	0h 2mn 23s	1.6855e+11
	+	8.8597e-06	6.2035e-07	7.00 %	0h 2mn 23s	1.8172e+10
10000000	1	1.2492e-06	1.7586e-07	14.08 %	0h 4mn 50s	1.1149e+11
	2	5.8311e-06	3.9188e-07	6.72 %	0h 4mn 50s	2.2454e+10
	3	2.2249e-06	1.5319e-07	6.89 %	0h 4mn 50s	1.4694e+11
	+	9.3052e-06	4.5603e-07	4.90 %	0h 4mn 50s	1.6581e+10

TAB. 4.26 – *Traversée du tuyau: Simulation naturelle.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
2000000	1	9.4148e-07	8.0997e-08	8.60 %	0h 2mn 59s	8.5154e+11
	2	5.7107e-06	3.2578e-07	5.70 %	0h 2mn 59s	5.2637e+10
	3	2.6744e-06	2.4149e-07	9.03 %	0h 2mn 59s	9.5799e+10
	+	9.3266e-06	4.1351e-07	4.43 %	0h 2mn 59s	3.2673e+10
4000000	1	1.0277e-06	6.4871e-08	6.31 %	0h 5mn 57s	6.6562e+11
	2	5.6683e-06	2.3733e-07	4.19 %	0h 5mn 57s	4.9731e+10
	3	2.4747e-06	1.3804e-07	5.58 %	0h 5mn 57s	1.4701e+11
	+	9.1707e-06	2.8209e-07	3.08 %	0h 5mn 57s	3.5200e+10

TAB. 4.27 – *Traversée du tuyau: Biaisage Exponentiel seul.*

Nb Part.	En	Flux	Ecart Type	Précision	Temps ¹	Qualité
400000	1	1.1427e-06	2.5286e-08	2.21 %	0h 7mn 54s	3.2995e+12
	2	5.7942e-06	4.7177e-08	0.81 %	0h 7mn 54s	9.4791e+11
	3	2.4999e-06	3.3702e-08	1.35 %	0h 7mn 54s	1.8574e+12
	+	9.4368e-06	6.2298e-08	0.66 %	0h 7mn 54s	5.4359e+11
468000	1	1.1429e-06	2.3226e-08	2.03 %	0h 9mn 2s	3.4203e+12
	2	5.8151e-06	4.3693e-08	0.75 %	0h 9mn 2s	9.6646e+11
	3	2.5200e-06	3.1647e-08	1.26 %	0h 9mn 2s	1.8422e+12
	+	9.4780e-06	5.7851e-08	0.61 %	0h 9mn 2s	5.5130e+11

TAB. 4.28 – *Traversée du tuyau: Biaisage Exponentiel et Angulaire.*

1. Simulation sur CRAY_T3E (60 PEs)

Conclusion

Dans cette étude, nous avons cherché à améliorer la convergence de la résolution de l'équation de transport par la méthode de Monte Carlo. Pour cela nous avons réduit la variance, en utilisant une technique d'échantillonnage préférentielle (avec des fonctions d'importance). Pour trouver une bonne fonction d'importance nous utilisons une méthode purement analytique, qui consiste à proposer une forme générale de la fonction d'importance. La géométrie est décomposée en mailles de caractéristiques homogènes. Les paramètres de cette fonction (norme, direction sens du vecteur \vec{K}) sont alors calculés pour chaque maille, par projection de la solution du problème adjoint sur les Harmoniques Sphériques. Il est à noter que cette **méthode de calcul des paramètres est entièrement automatique** et ne nécessite pas l'intervention de l'utilisateur du logiciel de simulation.

Cela nous donne une solution locale par maille, la solution globale est obtenue en résolvant pour chaque maille de proche en proche suivant les conditions de bord de leurs voisines. Nous obtenons alors une fonction d'importance sur toute la géométrie.

La forme générale de cette fonction d'importance $I(\vec{x}, \vec{\Omega}) = I_1(\vec{x}).I_2(\vec{\Omega})$, avec la forme couramment utilisée pour le paramètre de position, la transformation exponentielle $I_1(\vec{x}) = e^{\vec{K} \cdot \vec{x}}$. Pour le paramètre de vitesse nous avons une forme originale de fonction d'importance $I_2(\vec{\Omega})$ donné par le calcul. Notre méthode de détermination des paramètres nous permet aussi de déterminer le paramètre K optimal pour la réduction de variance du biaisage exponentiel.

Nous présentons ensuite des applications de cette nouvelle méthode à une traversée de plaque et une traversée du cas complexe de tuyau. Ces résultats mettent en évidence une nette amélioration de la convergence, et de la qualité de résolution de l'équation de transport, dans tous les exemples.

Annexe A

Existence et unicité du paramètre de biaisage

A.1 Rappel sur les valeurs propres

Nous rappelons ici un résultat qui nous sera utile au chapitre 2.3. Notons L l'opérateur défini dans $L^2(\mathcal{D} \times \mathcal{V} \times \mathbf{R}^+)$ par:

$$\begin{aligned} LN(\vec{x}, \vec{\Omega}, v, t) &= v.\vec{\Omega}.\vec{\nabla}_x N(\vec{x}, \vec{\Omega}, v, t) + v.\sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, v).N(\vec{x}, \vec{\Omega}, v, t) \\ &\quad - \int \int v'.\sigma(\vec{x}, \vec{\Omega}, v').f(\vec{x}, \vec{\Omega}', v' \rightarrow \vec{\Omega}, v).N(\vec{x}, \vec{\Omega}', v', t)d\vec{\Omega}'dv', \\ &\quad + Q(\vec{x}, \vec{\Omega}, v, t), \end{aligned}$$

avec les conditions de flux entrant nul.

On sait que, sous des hypothèses techniques relatives à la taille du domaine et à σ_t , l'opérateur L admet une valeur propre principale α (qui est telle que sa partie réelle est maximale). Elle est associée à une fonction propre positive Φ (voir [2]):

$$L\Phi = \alpha\Phi.$$

Donc si $\psi_0(\cdot) = \Phi$, alors la solution de l'équation de transport est de la forme:

$$\psi(t) = e^{\alpha t} \cdot \Phi. \tag{A.1}$$

Dans le cas général, on montre que $\psi(t)e^{-\alpha t} \xrightarrow{L^2} Cte.\Phi$.

A.2 Démonstration de l'existence et unicité du paramètre K

Dans cette section, $\vec{\Omega}_0$ est une constante fixée et K un paramètre que nous déterminerons.

Nous supposons que \mathbf{M} est un ensemble fermé et borné de \mathbf{R}^3 à symétrie sphérique, c'est à dire $\mathbf{M} = S \times \mathbf{M}_0$ (\mathbf{M}_0 est un fermé de \mathbf{R}^+ , S la sphère unité dans \mathbf{R}^3), et que les fonctions $\sigma_t(E)$, $\sigma_s(E)$, $\Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E')$ sont mesurables et bornées.

Nous cherchons à savoir s'il existe des fonctions positives $\Phi \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M})$, et $K \in \mathbf{L}^\infty(\mathbf{M}_0)$ solutions de:

$$\Phi(\vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - K(E)\vec{\Omega}_0(E) \cdot \vec{\Omega}} \int_{\mathbf{M}} \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE'.$$

On cherche K vérifiant:

$$\forall E \in \mathbf{M}_0, \quad 0 < K(E) < \sigma_t(E) \quad (\text{A.2})$$

Le problème précédent se réécrit sous la forme:

$$D_K \Phi(\vec{\Omega}, E) = \Phi(\vec{\Omega}, E), \quad (\text{A.3})$$

$$D_K \Phi(\vec{\Omega}, E) = \xi(\vec{\Omega}, E) \int_{\mathbf{M}} \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE',$$

$$\text{et } \xi(\vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - K(E)\vec{\Omega}_0(E) \cdot \vec{\Omega}}$$

D_K étant un opérateur linéaire, la résolution de l'équation A.3 est un problème spectral classique (voir [28], [20], [16]).

Le but de cette section est de montrer le résultat suivant:

Théorème 5 *Il existe une fonction $K(E) \in \mathbf{L}^\infty(\mathbf{M}_0)$ strictement positive, et une fonction $\Phi_K(\vec{\Omega}, E) \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ positive, telles que:*

$$D_K \Phi(\vec{\Omega}, E) = \Phi(\vec{\Omega}, E). \quad (\text{A.4})$$

Ce théorème est dû notamment à R. Sentis [30].

Le problème se reformule de la façon suivante:

1. Pour toute fonction $K(E) \in \mathbf{L}^\infty(\mathbf{M}_0)$ telle que:

$$\forall E \in \mathbf{M}, \quad 0 < K(E) < \sigma_t(E),$$

montrons qu'il existe un vecteur propre $\Phi_K(\vec{\Omega}, E) \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ positif et une valeur propre positive λ_K de l'opérateur linéaire D_K , tels que:

$$D_K \Phi_K(\vec{\Omega}, E) = \lambda_K \cdot \Phi_K(\vec{\Omega}, E), \quad (\text{A.5})$$

2. Montrons qu'il existe K tel que $\lambda_K = 1$.

Soient $\sigma_t(E)$, $\sigma_s(E)$, $K(v) \in \mathbf{L}_+^\infty(\mathbf{M}_0)$, telles que:

$$\forall E \in \mathbf{M}_0, \quad 0 < K(E) < \sigma_t(E),$$

et soit

$$\Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \in \mathbf{L}_+^\infty(\mathbf{M} \times \mathbf{M})$$

défini comme précédemment et tel que:

$$\forall \vec{\Omega}, \vec{\Omega}' \in S, E, E' \in \mathbf{M}_0, \quad \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \geq \Pi_0 > 0,$$

$$\left(\Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') = \frac{e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(E) \cdot \vec{x}}} \cdot k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E'), \text{ et } \int k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' = 1 \right).$$

Nous aurons besoin de plusieurs lemmes:

lemme 1 *Suivant les conditions précédentes,*

$$\frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - K(E) \int_{\vec{\Omega}_0} \vec{\Omega}} \cdot \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M} \times \mathbf{M}).$$

De plus, l'opérateur D_K défini de $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ sur $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ par:

$$\begin{aligned} \Phi \mapsto D_K \Phi(\vec{\Omega}, E) &= \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - K(E) \int_{\vec{\Omega}_0} \vec{\Omega}} \\ &\cdot \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE', \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

est un **opérateur de Hilbert-Schmidt**, et donc un **opérateur compact** sur $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$.

On pourra consulter [7], [5], [1], [29].

Nous notons $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ l'ensemble des fonctions de carré intégrable sur \mathbf{M} , et $\mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ l'ensemble des fonctions positives de carré intégrable sur \mathbf{M} (c'est un cône convexe de sommet 0 dans $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$). De plus toute fonction u de $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ s'écrit $u = u^+ - u^-$, avec $u^+ \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ partie positive de u , et $u^- \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ partie négative de u (i.e. $\mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ est reproduisant dans $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$). On voit que si $\Phi \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ alors $D_K \Phi \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$.

Faisons maintenant quelques rappels:

Théorème 6 (de Krein-Rutman [9]) :

Soit B un opérateur linéaire positif sur le cône convexe $\mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ reproduisant dans $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$.

Si B est compact et a un rayon spectral $r(B) \neq 0$, alors il existe un vecteur propre $\Phi \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ ($\Phi \neq 0$) avec: $B\Phi = r(B)\Phi$.

Théorème 7 (de Doob-Krein-Rutman [9]) :

Soit B un opérateur linéaire continu sur $\mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ tel que

1. $B(\mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})) \subset \mathbf{L}^2(\mathbf{M})$,
2. *il existe une mesure positive μ sur \mathbf{M} et $m \in \mathbf{N}$ tels que:*

$$B^m f \geq \langle \mu, f \rangle = \int_{\mathbf{M}} f(v) d\mu, \quad \forall f \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M}), \quad (\text{A.7})$$

3. *il existe $\rho > 0$ et $\psi \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$ vérifiant:*

$$B\psi = \rho\psi \quad (\text{A.8})$$

$$\{\psi(v) \neq 0, \quad \mu p.p.\}. \quad (\text{A.9})$$

Alors ρ est une valeur propre simple de B . De plus si $n \rightarrow +\infty$, on a pour tout $f \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M})$:

$$\rho^{-n} B^n f \rightarrow \psi C_f \quad \text{où } C_f \text{ est une constante sur } \mathbf{M}. \quad (\text{A.10})$$

Nous aurons aussi besoin du lemme suivant:

lemme 2 :

Soit B un opérateur borné de \mathbf{L}^2 dans \mathbf{L}^2 tel que B préserve le cône \mathbf{L}_+^2 . Supposons que pour tout ν positif, l'opérateur $\nu I - B$ soit inversible (I est la fonction identité de \mathbf{L}^2). Soit la fonction positive g , alors la solution ψ de l'équation $\nu\psi - B\psi = g$ est aussi positive.

Preuve:

Si $\nu > \|B\|$ alors:

$$\begin{aligned}\psi &= (\nu I - B)^{-1} g \\ &= \nu^{-1} \left(I - \frac{B}{\nu} \right)^{-1} g \\ &= \nu^{-1} \left(I + \frac{B}{\nu} + \frac{B^2}{\nu^2} + \cdots + \frac{B^n}{\nu^n} + \cdots \right) g \\ &\geq 0\end{aligned}$$

D'où, l'ensemble $\mathcal{M} = \{\lambda \mid (\lambda I - B)^{-1} \mathbf{L}_+^2 \subset \mathbf{L}_+^2\}$ n'est donc pas vide.

Si $\nu \leq \|B\|$, alors soient $\lambda > \|B\|$ ($\Rightarrow \lambda \in \mathcal{M}$) et ζ , $0 < \zeta < \|(\lambda I - B)^{-1}\|^{-1}$, tels que $\nu = \lambda - \zeta$. Alors:

$$\begin{aligned}\psi &= (\nu I - B)^{-1} g \\ &= (\lambda I - \zeta I - B)^{-1} g \\ &= \left(I - \zeta (\lambda I - B)^{-1} \right)^{-1} (\lambda I - B)^{-1} g \\ &= \left(I + \zeta (\lambda I - B)^{-1} + \zeta^2 (\lambda I - B)^{-2} + \cdots + \zeta^n (\lambda I - B)^{-n} + \cdots \right) (\lambda I - B)^{-1} g \\ &\geq 0\end{aligned}$$

Donc le disque $S_0 = \{\mu \mid |\mu - \lambda| < \|(\lambda I - B)^{-1}\|^{-1}\} \subset \mathcal{M}$ avec $\lambda > \|B\|$. On pose alors: $B_0 = B - \gamma_0 I$, $\gamma_0 \in S_0$, de même que précédemment on a que $S_1 = \{\mu \mid |\mu - \lambda_0| < \|(\lambda_0 I - B_0)^{-1}\|^{-1}\} \subset \mathcal{M}$ avec $\lambda_0 > \|B_0\|$. On montre de proche en proche que $\mathcal{M} = \mathbf{C} - \{0\}$. C.Q.F.D.

lemme 3 :

L'opérateur D_K défini précédemment, a un rayon spectral non nul ($r(D_K) \neq 0$).

Preuve:

Supposons que $r(D_K) = 0$, alors d'après la définition du rayon spectral, pour tout ν positif l'équation $\nu\psi - D_K\psi = g$ admet une solution ψ non nulle, pour toute fonction g . D'après le lemme 2 précédent, si g est positive alors ψ est positive, et donc:

$$\begin{aligned}\nu\psi - D_K\psi &\geq 0 \\ \nu\psi(\vec{\Omega}, E) - \xi(\vec{\Omega}, E) \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \psi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' &\geq 0 \\ \nu\psi(\vec{\Omega}, E) - \xi(\vec{\Omega}, E) \int \frac{e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(E) \cdot \vec{x}}} \cdot k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \psi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' &\geq 0\end{aligned}$$

Or en prenant $\nu < \inf_{\vec{\Omega}, E} \xi(\vec{\Omega}, E)$ et $\vec{\Omega}_i, E_i$ tels que:

$e^{\vec{K}(E_i)} \psi(\vec{\Omega}_i, E_i) = \inf_{\vec{\Omega}, E} e^{\vec{K}(E)} \cdot \psi(\vec{\Omega}, E)$, on obtient quelque soit la fonction g positive:

$$\begin{aligned}
& \nu \psi(\vec{\Omega}_i, E_i) - D_K \psi(\vec{\Omega}_i, E_i) \\
&= \nu \psi(\vec{\Omega}_i, E_i) - \xi(\vec{\Omega}_i, E_i) \int \frac{e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(E_i) \cdot \vec{x}}} \cdot k(\vec{\Omega}_i, E_i, \vec{\Omega}', E') \psi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', E' \\
&= \nu \left(\psi(\vec{\Omega}_i, E_i) - \int \frac{e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(E_i) \cdot \vec{x}}} \cdot k(\vec{\Omega}_i, E_i, \vec{\Omega}', E') \psi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' \right) \\
&\quad + \left(\nu - \xi(\vec{\Omega}_i, E_i) \right) \int \frac{e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(E_i) \cdot \vec{x}}} \cdot k(\vec{\Omega}_i, E_i, \vec{\Omega}', E') \psi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' \\
&= \nu \int \frac{k(\vec{\Omega}_i, E_i, \vec{\Omega}', E')}{e^{\vec{K}(E_i) \cdot \vec{x}}} \left(e^{\vec{K}(E_i) \cdot \vec{x}} \psi(\vec{\Omega}_i, E_i) - e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}} \psi(\vec{\Omega}', E') \right) d\vec{\Omega}', dE' \\
&\quad + \left(\nu - \xi(\vec{\Omega}_i, E_i) \right) \int \frac{e^{\vec{K}(E') \cdot \vec{x}}}{e^{\vec{K}(E_i) \cdot \vec{x}}} \cdot k(\vec{\Omega}_i, E_i, \vec{\Omega}', E') \psi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' \\
&< 0
\end{aligned}$$

C.Q.F.D.

lemme 4 :

Soit la fonction $\vec{K} \in \mathbf{L}^\infty(\mathbf{M}_0)$ telle que:

$\forall \vec{\Omega} \in S; E \in \mathbf{M}_0, \quad 0 < K(E) < \sigma_t(E)$, et soit $\Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') > 0$,

alors il existe $\Phi_K \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M})$, et $\lambda_K > 0$ tels que:

$$D_K \Phi_K = \lambda_K \Phi_K.$$

De plus, λ_K est le rayon spectral de D_K (dans \mathbf{L}^2), la multiplicité géométrique et algébrique de λ_K est égale à un.

Preuve:

Comme $r(D_K)$ est non nul on peut appliquer le théorème de “Krein-Rutman”, d’où l’existence d’une valeur propre positive $\lambda_K = r(D_K)$, et l’existence d’un vecteur propre associé Φ_K .

Pour l’unicité, montrons le point 2 du théorème de “Doob-Krein-Rutman”. Par hypothèse, il existe $c \in \mathbf{R}^+$ tel que:

$$\xi(\vec{\Omega}, E) \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \geq c > 0, \quad \forall \vec{\Omega}, \vec{\Omega}' \in S; E, E' \in \mathbf{M}_0. \quad (\text{A.11})$$

Ainsi si μ est la mesure telle que $d\mu = c d\vec{\Omega} dE$, on a:

$$D_K \Phi \geq \langle \mu, \Phi \rangle = \int_{\mathbf{M}} \Phi(\vec{\Omega}, \mathbf{E}) d\mu, \quad u \in \mathbf{L}_+^2(\mathbf{M}), \quad (\text{A.12})$$

les hypothèses 7 et A.8 sont alors trivialement vérifiées, A.7 est vérifié avec $m = 1$.

Nous allons maintenant démontrer un résultat de continuité de l'opérateur D_K par rapport à K . Pour cela rappelons la définition:

$$\|D\|_{(\mathbf{L}^2 \times \mathbf{L}^2)} = \sup_{\vec{\Omega}, E} \|Df(\vec{\Omega}, E)\|_{\mathbf{L}^2}. \quad (\text{A.13})$$

Proposition 8 :

L'application qui à K vérifiant A.2 associe D_K , est continue, au sens de la norme précédente des opérateurs et de la norme $\mathbf{L}^\infty(\mathbf{M}_0)$.

D'après les conditions A.2, quelque soient les fonctions $K_1, K_2 \in \mathbf{L}^\infty(\mathbf{M}_0)$, il existe $A > 0$ telle que:

$\forall \vec{\Omega} \in \mathbf{M}; E \in \mathbf{M}_0, \forall \mu / |\mu| \leq 1,$
 $\sigma_t(E) - K_1(E)\mu > A, \quad \sigma_t(E) - K_2(E)\mu > A,$ alors :

$$\begin{aligned} & \|D_{K_1}\Phi - D_{K_2}\Phi\|_{\mathbf{L}^2} \\ & \leq \sup_{\vec{\Omega}, E} \left\| \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - K_1 \vec{\Omega}_0(E) \cdot \vec{\Omega}} - \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E) - K_2 \vec{\Omega}_0(E) \cdot \vec{\Omega}} \right\|_{\mathbf{L}^\infty} \\ & \quad \cdot \left\| \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' \right\|_{\mathbf{L}^2}, \\ & \leq \sup_{\vec{\Omega}, E} \left\| \frac{\sigma_s(E) \cdot (K_1(E) - K_2(E)) \vec{\Omega}_0 \cdot \vec{\Omega}}{(\sigma_t(E) - K_1 \vec{\Omega}_0(E) \cdot \vec{\Omega}) (\sigma_t(E) - K_2 \vec{\Omega}_0(E) \cdot \vec{\Omega})} \right\|_{\mathbf{L}^\infty} \\ & \quad \cdot \left\| \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' \right\|_{\mathbf{L}^2}, \\ & \leq \sup_{\vec{\Omega}, E} \frac{\|\sigma_s\|_{\mathbf{L}^\infty} \cdot \|K_1 - K_2\|_{\mathbf{L}^\infty}}{A^2} \|\Pi\|_{\mathbf{L}^2 \times \mathbf{L}^2} \cdot \|\Phi\|_{\mathbf{L}^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

C.Q.F.D.

Nous voulons maintenant trouver une certaine continuité des valeurs propres par rapport à K . Pour ce, nous utilisons le théorème suivant de continuité supérieure du spectre des valeurs propres $\Sigma(T)$ de l'opérateur T , pour une "petite" perturbation (voir [18], [24]):

Théorème 8 (de Kato) :

Soient T et S deux opérateurs compacts, alors $\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0$, tel que:

$$\|T - S\|_{\mathbf{L}} < \delta \quad \Rightarrow \quad \sup_{\lambda \in \Sigma(T)} \min_{\mu \in \Sigma(S)} |\lambda - \mu| < \epsilon.$$

Démonstration du théorème 5 Remarquons tout d'abord que pour tout K vérifiant A.2, on a $\Phi_k \in \mathbf{L}^\infty(\mathbf{M})$. D'après le théorème de Kato (8) et le lemme précédent, on voit que la valeur propre maximale λ_K est continue par rapport à K .

Pour terminer cette démonstration du théorème 5, on pose:

$$K_\alpha(E) = \alpha \sigma_t(E),$$

et nous allons vérifier que:

$$\begin{aligned} \lambda_K < 1 & \quad \text{pour } \alpha = 0 \quad (K_0 = 0), \\ \lambda_K \longmapsto +\infty & \quad \text{pour } \alpha \longmapsto 1, \end{aligned}$$

Si $K_0 = 0$, alors on a:

$$\begin{aligned} D_{K_0} \Phi(\vec{\Omega}, E) &= \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E)} \cdot \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' \\ &= \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E)} \cdot \int k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE'. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|D_{K_0}\|_{\mathbf{L}^\infty} &= \left\| \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E)} \right\|_{\mathbf{L}^\infty} \cdot \sup_{\|\Phi\|_{\mathbf{L}^\infty}=1} \left\| \int k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(\vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' \right\|_{\mathbf{L}^\infty}, \\ &= \left\| \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E)} \right\|_{\mathbf{L}^\infty} \\ &\quad \cdot \sup_{\|\Phi\|_{\mathbf{L}^\infty}=1} \left\| \left(\int k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' \right) \cdot \left(\left\| \Phi(\vec{\Omega}', E') \right\|_{\mathbf{L}^\infty} \right) \right\|_{\mathbf{L}^\infty}, \\ &\leq \left\| \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_t(E)} \right\|_{\mathbf{L}^\infty} \leq 1. \end{aligned}$$

Or d'après ([9]), $\Phi_K \in \mathbf{L}^\infty$, et $\lambda_{K_0} \leq \|D_{K_0}\|_{\mathbf{L}^\infty} \leq 1$.

Supposons que α tend vers 1: On écrit D_α et λ_α au lieu de D_{K_α} et λ_{K_α} , on a alors:

$$\begin{aligned} D_\alpha \Phi(\vec{\Omega}, E) &= \frac{\sigma_s(\vec{\Omega}, E)}{\sigma_t(\vec{\Omega}, E)(1 - \alpha \frac{\vec{\Omega}_0(v) \cdot \vec{\Omega}}{\Omega^2})} \cdot \int \Pi(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(v') d\vec{\Omega}' dE' \\ \Rightarrow \int D_\alpha \Phi(\vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega} dE &\geq \frac{\Pi_0}{(1 - \alpha)} \int \frac{\sigma_s(\vec{\Omega}, E)}{\sigma_t(\vec{\Omega}, E)} d\vec{\Omega} dE \cdot \int \Phi(v') d\vec{\Omega}' dE' \end{aligned}$$

Si Φ_α est le vecteur propre associé à la valeur propre λ_α :

$$\begin{aligned} \lambda_\alpha \int \Phi_\alpha(\vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega} dE &\geq \frac{\Pi_0}{(1 - \alpha)} \int \frac{\sigma_s(\vec{\Omega}, E)}{\sigma_t(\vec{\Omega}, E)} d\vec{\Omega} dE \cdot \int \Phi_\alpha(v) d\vec{\Omega}' dE, \\ \Rightarrow \lambda_\alpha &\geq \frac{\Pi_0}{(1 - \alpha)} \int \frac{\sigma_s(\vec{\Omega}, E)}{\sigma_t(\vec{\Omega}, E)} d\vec{\Omega} dE. \end{aligned}$$

D'où $\lim_{\alpha \rightarrow 1} |\lambda_\alpha| = +\infty$.

Donc suivant la valeur de α , λ_{K_α} passe de $\lambda_{K_0} < 1$, à $+\infty$. Etant donné que λ_K est continue par rapport à K , il existe bien K vérifiant les conditions A.2, tel que $\lambda_K = 1$. C.Q.F.D.

Remarque 28 Dans la pratique, on pourra chercher $K(E)$ de la forme:

$$K(E) = \alpha \sigma_t(E), \quad 0 < \alpha < 1. \quad (\text{A.15})$$

A.3 Dépendance et monotonie de λ_K par rapport à K

Nous nous proposons maintenant de démontrer la croissance de la valeur λ par rapport à K . Ceci nous permet d'assurer la convergence d'un algorithme simple de recherche de la valeur de K , par exemple une méthode de dichotomie.

Quelque soit $K_1 > K_2$, d'après le théorème de "Krein Rutmann", il existe deux valeurs propres λ_1, λ_2 , ainsi que deux vecteurs propres φ_1, φ_2 tels que :

$$\begin{aligned}\lambda_1 \varphi_1 &= D_{K_1} \varphi_1, \\ \lambda_2 \varphi_2 &= D_{K_2} \varphi_2,\end{aligned}$$

De plus, d'après l'expression de l'opérateur D_K : $D_{K_2} > D_{K_1}$. Cela implique que :

$$\begin{aligned}D_{K_2} \varphi_1 &> D_{K_1} \varphi_1 \\ \lambda_1^{-1} D_{K_2} \varphi_1 &> \lambda_1^{-1} D_{K_1} \varphi_1 = \varphi_1 \\ (\lambda_1^{-1} D_{K_2})^n \varphi_1 &> \lambda_1^{-1} D_{K_1} \varphi_1 = \varphi_1\end{aligned}\tag{A.16}$$

On peut alors établir d'après le théorème de "Doob-Krein-Rutmann" que :

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} (\lambda_2^{-1} D_{K_2})^n \varphi_1 = \varphi_2 \cdot C_{\varphi_1}\tag{A.17}$$

qui est une fonction bornée. On obtient :

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow +\infty} \left(\frac{(\lambda_1^{-1} D_{K_2})^n \varphi_1}{(\lambda_2^{-1} D_{K_2})^n \varphi_1} \right) &> \frac{\varphi_1}{\varphi_2 \cdot C_{\varphi_1}} \\ \lim_{n \rightarrow +\infty} \left(\frac{\lambda_1^{-n} \cdot D_{K_2}^n \varphi_1}{\lambda_2^{-n} \cdot D_{K_2}^n \varphi_1} \right) &> \frac{\varphi_1}{\varphi_2 \cdot C_{\varphi_1}} \\ \lim_{n \rightarrow +\infty} \left(\frac{\lambda_1^{-n}}{\lambda_2^{-n}} \right) &> \frac{\varphi_1}{\varphi_2 \cdot C_{\varphi_1}}\end{aligned}$$

Comme φ_1 et $\varphi_2 \cdot C_{\varphi_1}$ sont strictement positives, bornées: $\forall \vec{\Omega} \in S; E \in \mathbf{M}_0$, il existe A tel que $A < \varphi_2(\vec{\Omega}, E) \cdot C_{\varphi_1}$.

On a alors $\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \leq 1$, d'où $\lambda_2 \geq \lambda_1$.

On va maintenant démontrer la stricte croissance. En effet, si $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ alors $D_{K_1} \varphi_1 = \lambda \varphi_1$ et $D_{K_2} \varphi_2 = \lambda \varphi_2$. D'où $D_{K_1} \varphi_1 \cdot \varphi_2 = D_{K_2} \varphi_2 \cdot \varphi_1$, d'où $\lambda \varphi_2 = \lambda \varphi_1$ et $\varphi_2 = \varphi_1$ ce qui implique $D_{K_1} = D_{K_2}$, cela contredit l'hypothèse de départ $D_{K_1} < D_{K_2}$.

On obtient alors $\lambda_2 > \lambda_1$. *C.Q.F.D.*

On déduit de ce résultat et du théorème précédent le résultat suivant :

corollaire 1 :

Soient σ_t, σ_s des réels positifs, tels que : $\sigma_t > \sigma_s$.

Soit $k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') > 0$ et $\int k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', dE' = 1$ ($\vec{\Omega}_0$ fixé) tels que :

$$\frac{\sigma_s}{\sigma_t - K} \frac{\vec{\Omega}}{\vec{\Omega}_0 \cdot \vec{\Omega}} \cdot k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M} \times \mathbf{M}),$$

Alors, il existe un unique réel K strictement positif ($0 \leq K \leq \sigma_t$), tel qu'il existe un vecteur propre $\Phi_K(\vec{\Omega}, E) \in \mathbf{L}^2(\mathbf{M})$ positif et une valeur propre $\lambda_K = 1$, tels que:

$$D_K \Phi(\vec{\Omega}, E) = \Phi(\vec{\Omega}, E),$$

$$\text{avec } D_K \Phi(\vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_s}{\sigma_t - K \vec{\Omega}_0 \cdot \vec{\Omega}} \cdot \int k(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}', E') \cdot \Phi(v') d\vec{\Omega}', dE'.$$

Remarque 29 Dans le cas multigroupe, on aura que \mathbf{M}_0 sera un ensemble fini de points de \mathbf{R}_*^+ .

Bibliographie

- [1] Balakrishnan (A.). – *Applied Functional Analysis*. – Springer, 1976.
- [2] Bardos (C.), Santos (R.) et Sentis (R.). – Diffusion approximation and computation of the critical size. *American Math. Soc.*, vol. 284, n2, 1984.
- [3] Bayet (Michel). – *Physique Nucléaire*. – Masson, 1960.
- [4] Bell (George I.) et Glasstone (Samuel). – *Nuclear Reactor Theory*. – Litton Educational, 1970.
- [5] Boccara (N.). – *Analyse Fonctionnelle*. – Ellipses, 1984.
- [6] Breiman (Leo). – *Probability*. – SIAM, 1993.
- [7] Brezis (Haim). – *Analyse Fonctionnelle: Théorie et applications*. – Masson, 1983.
- [8] Dautray (Robert). – *Méthodes probabilistes pour les équations de la physique*. – Eyrolles, 1989.
- [9] Dautray (Robert) et Lions (Jacques-Louis). – *Analyse mathématique et calcul numérique: Spectre des opérateurs*, vol. 5. – Masson, 1984.
- [10] Devroye (Luc). – *Non Uniform Random Variate Generation*. – Springer Verlag, 1986.
- [11] Dossantos-Uzarralde (P.J.). – *Automatisation de la recherche des fonctions d'importances dans un code Monte Carlo*. – Thèse de Doctorat, Université Paris VI, 1985.
- [12] Dubi (A.) et Dudziak (Donald J.). – Optimal choice of parameters for exponential biasing in Monte Carlo. *Nucl. Sc. Eng.*, 1979.
- [13] Duderstadt (J.) et Martin (W.). – *Transport Theory*. – Wiley Interscience Publication, 1978.
- [14] Dwivedi (S. R.). – A new importance biasing scheme for deep-penetration Monte Carlo. *Ann. Nucl. Energy*, 1982.
- [15] Gupta (H. C.). – A class of zero-variance biasing schemes for Monte Carlo reaction rate estimators. *Nucl. Sc. Eng.*, 1983.
- [16] Huet (D.). – *Décomposition spectrale et opérateurs*. – PUF, 1976.
- [17] Indira (R.) et John (T. M.). – Variance reduction under exponential and scattering angle biasing: An analytic approach. *Nucl. Sc. Eng.*, 1986.
- [18] Kato (T.). – *Perturbation Theory for Linear Operators*. – Springer, 1980. Chap 4.3.1, 2nd édition.
- [19] Kenneth M. Case (Paul F. Zweifel). – *Linear Transport Theory*. – Addison-Wesley Publishing Company, 1967.

- [20] Kreyszig (E.). – *Introductory Functional Analysis with applications*. – Wiley, 1978.
- [21] Lapeyre (B.), Pardoux (E.) et Sentis (R.). – Introduction aux méthodes de Monte Carlo. – A paraître.
- [22] László Koblinger (Yvan Lux). – *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*. – CRC Press, 1991.
- [23] Morillon (Benjamin). – *Méthode de Monte Carlo non analogue, application à la simulation des neutrons*. – Thèse de Doctorat, Université Paris 6, 1995.
- [24] Newburgh (J. D.). – *The variation of spectra*. – Duke Math., 1951.
- [25] Nimal (J.C.), Vergnaud (T.), Gonnord (J.) et Dejonghe (G.). – Programme de Monte Carlo polycinétique à trois dimensions TRIPOLI-03. – Rapport interne.
- [26] Noack (K.). – On the relation between adjoint and importance in Monte Carlo solutions of linear particle transport problems. *Kernenergie*, 1979.
- [27] Paquier (P.). – Méthodes numériques de neutronique. – 1985. cours CEA.
- [28] Rudin (W.). – *Functionnal Analysis*. – Mc Graw Hill, 1974. 2nd édition.
- [29] Schwartz (L.). – *Analyse Hilbertienne*. – Hermann, 1979.
- [30] Sentis (R.). – Communication privée.

Index

- Équation de transport Intégré-différentielle, Section efficace, 7
 - 9
 - Section efficace de transfert, 7
- Équation stationnaire, 11
 - Vecteur d'intérêt, 32
- Équation de transport multigroupe, 14
- Spectre partiel, 13
- Équation de transport multigroupe biaisé, 14

- Courant angulaire, 7

- Densité de neutrons, 7
- Densité de probabilité de transfert, 7

- Facteur de qualité, 23
- Figure de mérite, 23
- Flux angulaire, 7
- Fonction d'importance, 29

- Gain, 23
- Groupe d'énergie, 13, 63

- Intensité de saut, 17

- Méthode de Monte Carlo, 21
- Maille, 11

- Neutron
 - représentation, 16
- Neutrons retardés, 12

- Opérateur compact, 103
- Opérateur de Hilbert-Schmidt, 103

- Précision, 23
- Processus stochastique, 15
- Processus de Markov
 - introduction, 15
- Processus markovien, 15