



Comparaison de modèles approchant la solution de l'équation de transport dans un milieu bifluide Markovien

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Gérald Samba¹, Nicolas Charpentier¹, Olivier Soulard¹

¹CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

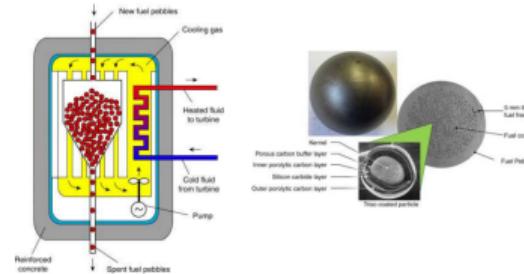
- Le transport de particules dans des milieux aléatoires se rencontre dans des situations très variées :



Ciel nuageux

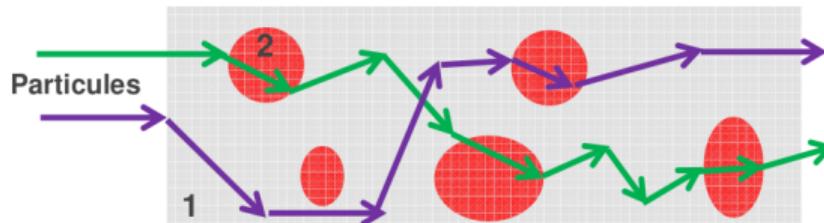


Nuages moléculaires
Rosen et al. *Astrophys. Space Sci.* (2007) 307:213-217



Réacteur nucléaire à lit de boulets (PBR)
Sümer Şahin et al. *Comprehensive Energy Systems*
Elsevier 795-849 (2018)

- Modèle de Levermore-Pomraning (*J. Math. Phys.* 27.10 (1986) :2526-2536)



L'emplacement des matériaux n'est pas connu exactement mais de manière statistique.

- Géométrie bifluide Markovienne, longueur de corde moyenne Λ_m indépendante de x

Densité de probabilité de la longueur de corde $l(m)$ sur $[0 : +\infty[:$ $\frac{1}{\Lambda_m} \exp(-\frac{l(m)}{\Lambda_m})$, $m = 1, 2$

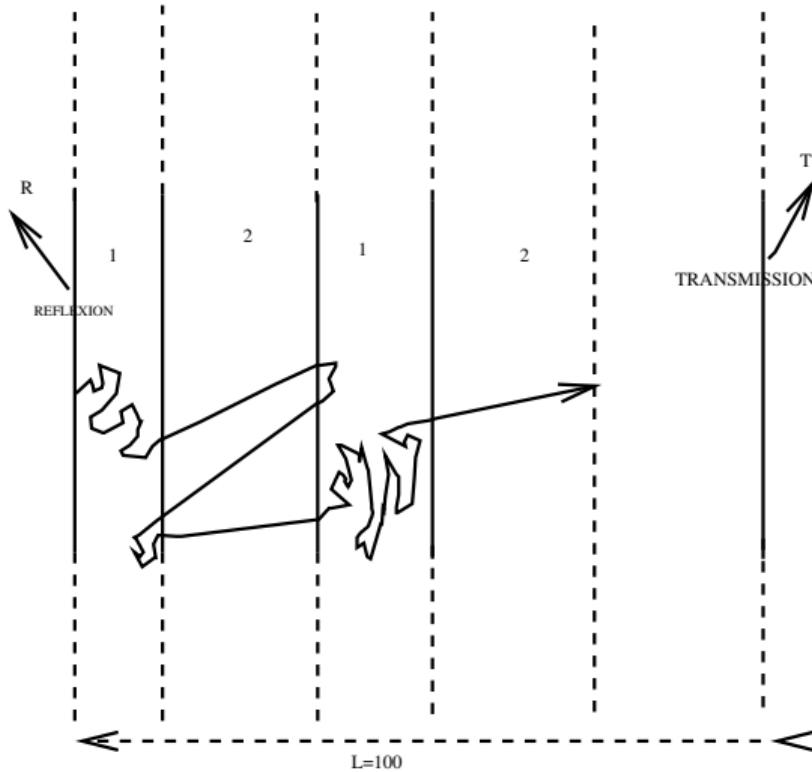
$$p_1 = \frac{\Lambda_1}{\Lambda_1 + \Lambda_2} \text{ concentration du matériau 1,}$$

$$p_2 = \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1 + \Lambda_2} \text{ concentration du matériau 2.}$$

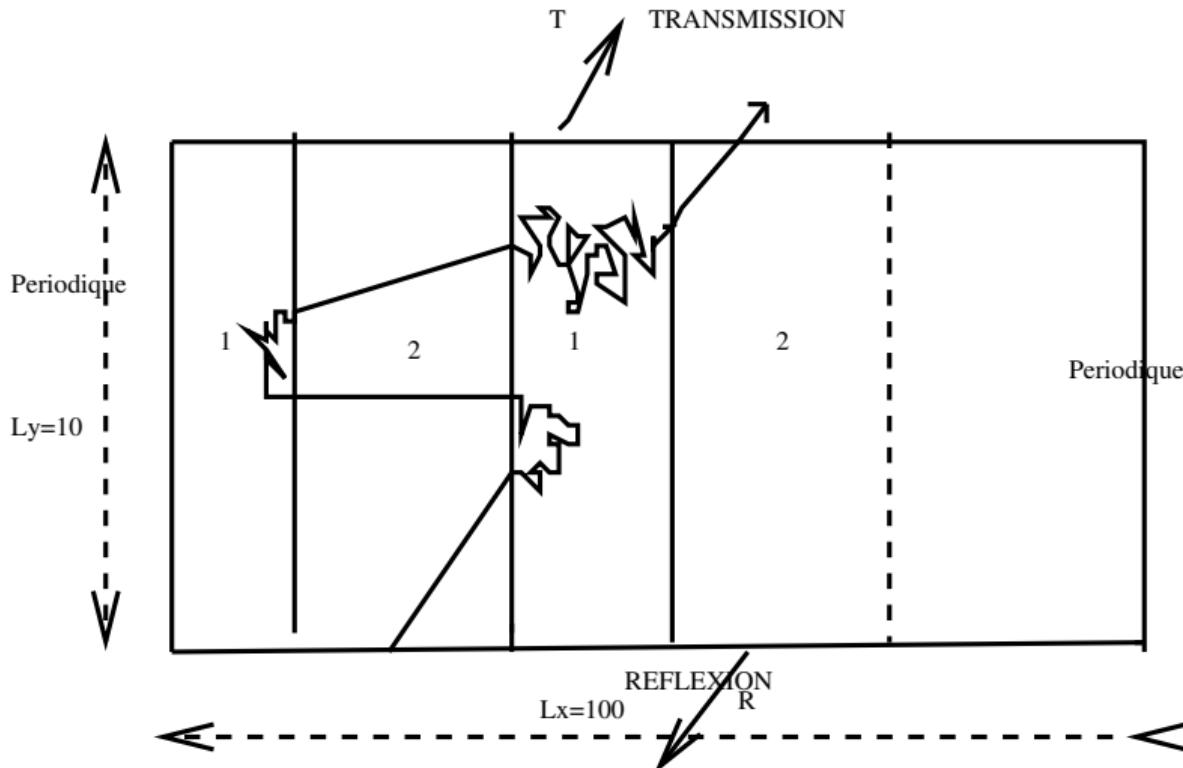
- Transport scattering isotrope

$$\sigma_{s,m}, \sigma_{t,m}$$

Les configurations étudiées



Configuration 2D

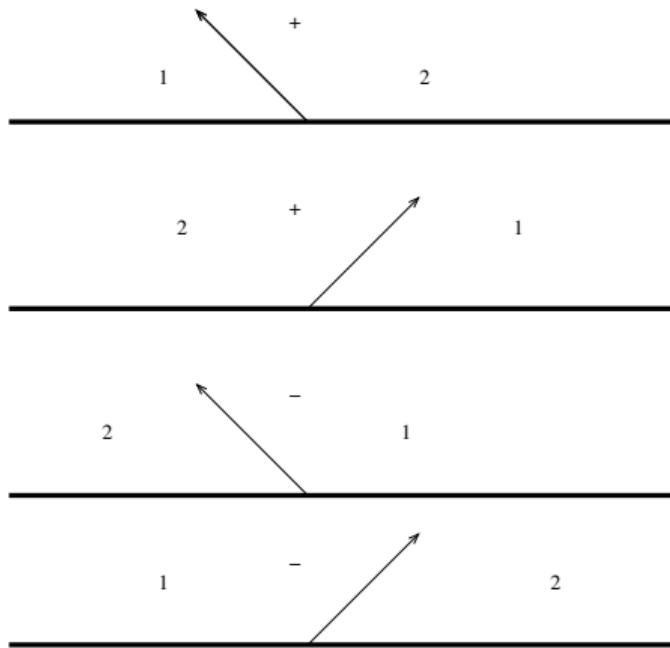


Ces modèles cherchent à approcher les moyennes d'ensemble :

$$I^1(x, \mu) = \frac{\sum_{\text{réalisations telles que } m(x)=1} I(x, \mu)}{\text{nombre de réalisations telles que } m(x) = 1}$$

$$\begin{aligned}\mu \partial_x(p_1 I^1) + \sigma_{t,1} p_1 I^1 &= \frac{1}{2} \sigma_{s,1} \int_{-1}^{+1} (p_1 I^1(x, \mu')) d\mu' \\ &+ \frac{|\mu| p_2}{\Lambda_2} I_{2 \rightarrow 1} - \frac{|\mu| p_1}{\Lambda_1} I_{1 \rightarrow 2}\end{aligned}$$

Moyennes de I aux interfaces



$$I_{2 \rightarrow 1}(x, \mu) (\text{resp } I_{1 \rightarrow 2}) = \frac{\sum I(x, \mu)}{\text{nombre de réalisations}}$$

où la sommation au numérateur et au dénominateur est sur les réalisations telles que

- x est à l'interface entre les deux matériaux,
- 1 est à gauche (resp droite) de l'interface si μ négatif,
- à droite (resp gauche) si μ positif.

La difficulté est d'approcher ces quantités.

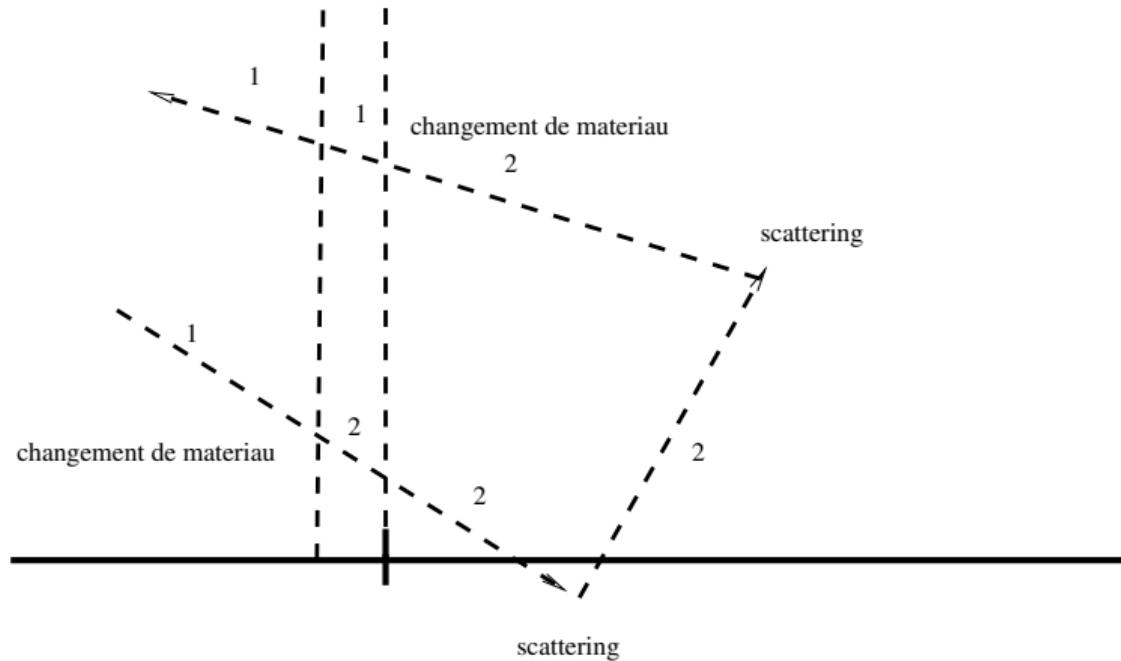
Il fait l'approximation :

$$I_{2 \rightarrow 1}(x, \mu) = I^2(x, \mu)$$

$$I_{1 \rightarrow 2}(x, \mu) = I^1(x, \mu)$$

ce qui conduit au système :

$$\mu \partial_x(p_1 I^1) + \sigma_{t,1} p_1 I^1 = \frac{1}{2} \sigma_{s,1} \int_{-1}^{+1} (p_1 I^1(x, \mu')) d\mu' + \frac{|\mu| p_2}{\Lambda_2} I^2 - \frac{|\mu| p_1}{\Lambda_1} I^1$$



- Le défaut est qu'après chaque collision suivie d'un changement de direction, la particule oublie l'interface où elle a changé de matériau.
- Si le milieu est purement absorbant, le défaut n'existe pas.
- Les modèles à mémoire pallient partiellement ce défaut.

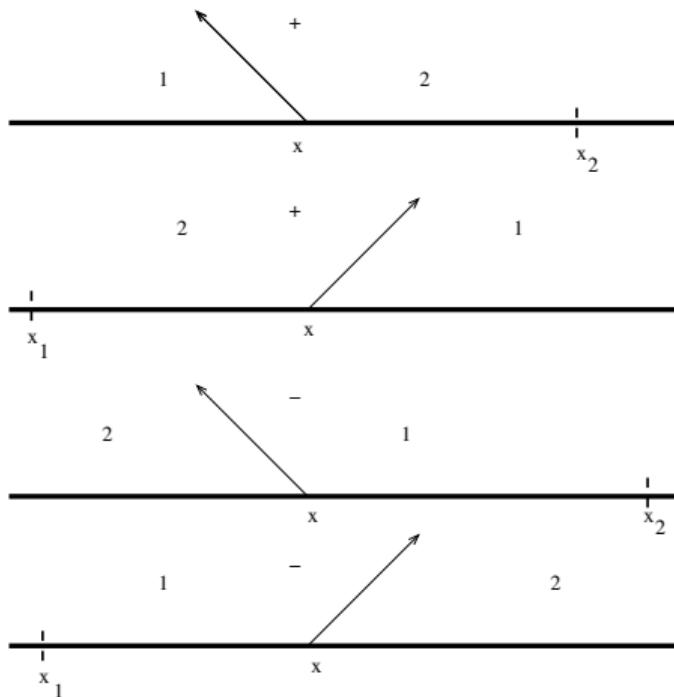
$I^1(x, \mu, x_1, x_2) = \frac{\sum I(x, \mu)}{\text{nombre de réalisations}}$ où la sommation au numérateur et au dénominateur est sur les réalisations telles que

- x_1 et x_2 sont des interfaces,
- x est compris entre x_1 et x_2 ,
- le matériau 1 est compris entre x_1 et x_2 .

$$I^{1,2}(x, \mu, x_1, x_2, x_3) = \frac{\sum I(x, \mu)}{\text{nombre de réalisations}}$$

Au numérateur et au dénominateur la sommation est sur les réalisations telles que

- x_1, x_2, x_3 sont des interfaces entre matériaux,
- x compris entre x_1 et x_3 ,
- $m(x) = 1$ entre x_1 et x_2 et $m(x) = 2$ entre x_2 et x_3 .

Modèle LP à mémoire, calcul de $I_{2 \rightarrow 1}(x, \mu)$, $I_{1 \rightarrow 2}(x, \mu)$ 

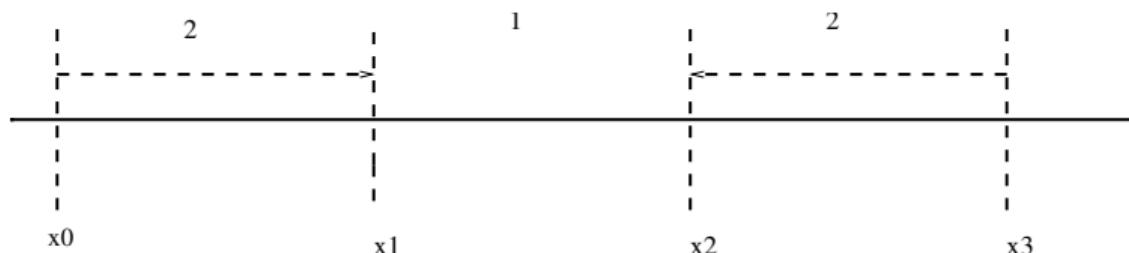
On peut calculer $I_{2 \rightarrow 1}(x, \mu)$ à partir de $I^2(x, \mu, x, .)$, $I^2(x, \mu, ., x)$, $I^1(x, \mu, x, .)$, $I^1(x, \mu, ., x)$

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{2 \rightarrow 1}(x, \mu) = 1_{\mu < 0} \int_x^{+\infty} dx_2 p_2(x_2 \rightarrow x) I^2(x, \mu, x, x_2) \\ \quad + 1_{\mu > 0} \int_{-\infty}^x dx_1 p_2(x_1 \rightarrow x) I^2(x, \mu, x_1, x) \\ \\ I_{1 \rightarrow 2}(x, \mu) = 1_{\mu < 0} \int_x^{+\infty} dx_2 p_1(x_2 \rightarrow x) I^1(x, \mu, x, x_2) \\ \quad + 1_{\mu > 0} \int_{-\infty}^x dx_1 p_1(x_1 \rightarrow x) I^1(x, \mu, x_1, x) \\ \\ p_1(x_2 \rightarrow x_1) = \frac{1}{\Lambda_1} \exp\left(-\frac{x_2 - x_1}{\Lambda_1}\right) \end{array} \right.$$

On peut calculer $I^1(x, \mu, x_1, x_2)$ à partir de $I^{1,2}(x, \mu, x_1, x_2, .)$, $I^{2,1}(x, \mu, ., x_1, x_2)$

$$I^1(x, \mu, x_1, x_2) = \int_{x_2}^{+\infty} dx_3 p_2(x_3 \rightarrow x_2) I^{1,2}(x, \mu, x_1, x_2, x_3)$$

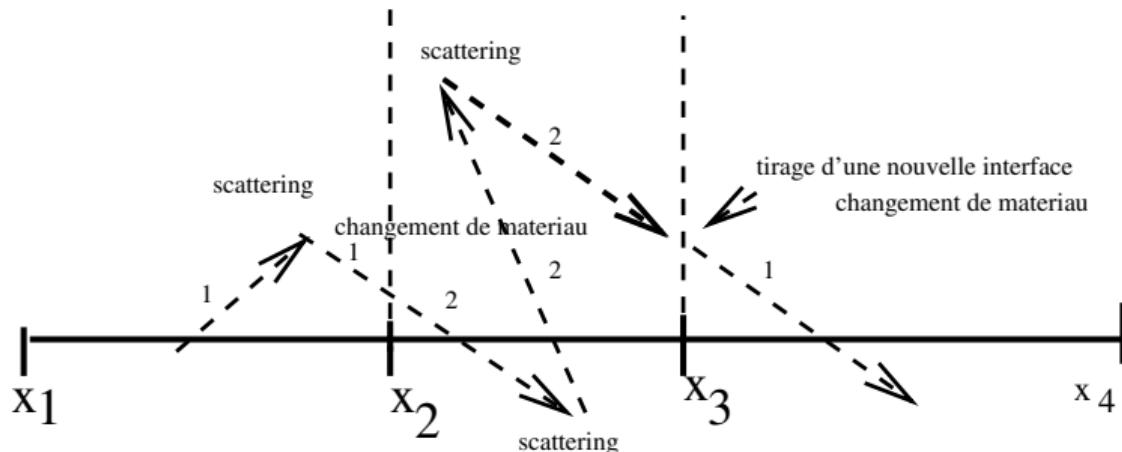
$$+ \int_{-\infty}^{x_1} dx_0 p_2(x_0 \rightarrow x_1) I^{2,1}(x, \mu, x_0, x_1, x_2)$$



On peut calculer $I^1(x, \mu)$ à partir de $I^1(x, \mu, ., .)$,

$$I^1(x, \mu) = \int_{-\infty}^x dx_1 \int_x^{+\infty} dx_2 p_1(x_1 \rightarrow x) p_1(x_2 \rightarrow x) I^1(x, \mu, x_1, x_2)$$

Comment calculer $I^{1,2}, I^{2,1}$



C Larmier,

Stochastic particle transport in disordered media : beyond the Boltzmann equation.

Université Paris-Saclay, 2018.

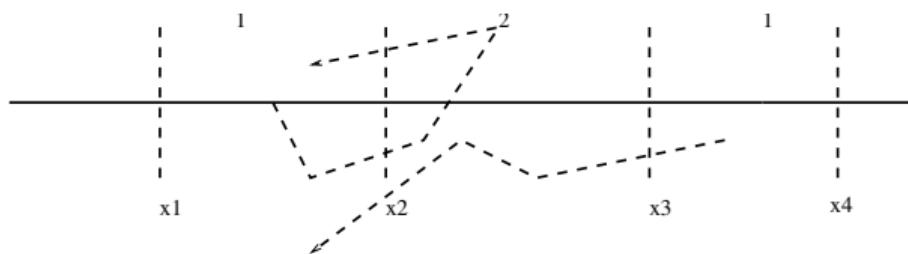
G.B. Zimmerman, M.L. Adams,

Algorithms for Monte Carlo particle transport in binary statistical mixtures.

Trans. Am. Nucl. Soc. 66, 287 (1991).

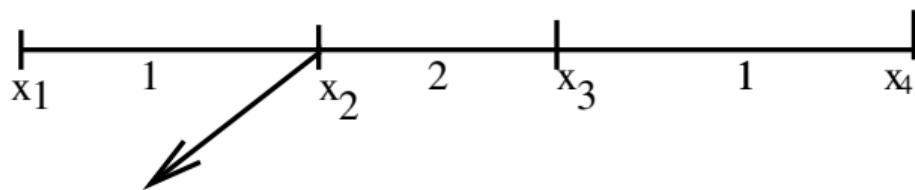
Equation pour $I^{1,2}$, $x \in [x_1, x_2]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \partial_x I^{1,2} + \sigma_{t,1} I^{1,2} = \frac{1}{2} \sigma_{s,1} \int_{-1}^{+1} I^{1,2}(x, \mu', x_1, x_2, x_3) d\mu' \\ + 1_{\mu < 0} |\mu| \delta(x - x_2) \int_{x_3}^{+\infty} dx_4 p_1(x_4 \rightarrow x_3) I^{2,1}(x_2, \mu, x_2, x_3, x_4) \\ \text{pour } \mu > 0, I^{1,2}(x_1, \mu, x_1, x_2, x_3) = 0 \end{array} \right.$$



Equation pour $I^{1,2}$, $x \in [x_1, x_2]$

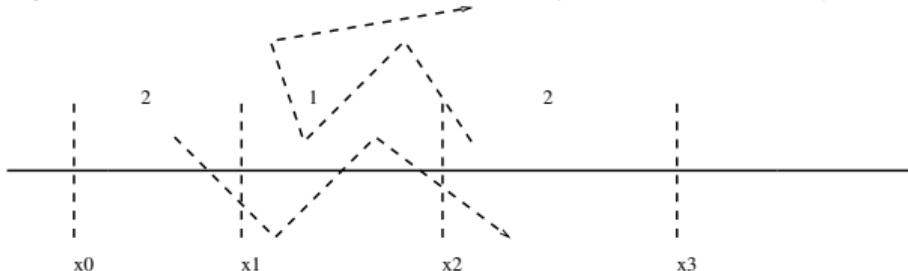
- Oublier l'interface x_1 dans le terme source en x_2 revient à faire l'approximation $I^{1,2,1}(x_2, \mu, x_1, x_2, x_3, x_4) = I^{2,1}(x_2, \mu, x_2, x_3, x_4)$ pour $\mu < 0$
- Si on ne fait pas cette hypothèse, on obtient une hiérarchie infinie d'équations. ($I^{1,2,1}$ dépend de $I^{1,2,1,2}$ etc.).



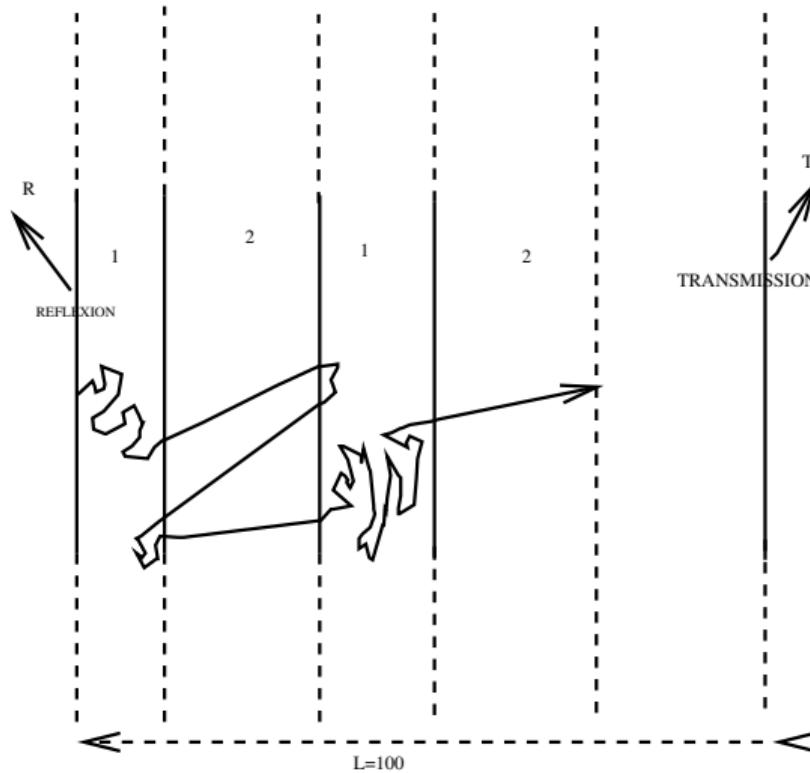
R.Sanchez
Linear Kinetic theory in stochastic media.
J.Math.Phys.30,2498 (1989)

Equation pour $I^{1,2}$, $x \in [x_2, x_3]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \partial_x I^{1,2} + \sigma_{t,2} I^{1,2} = \frac{1}{2} \sigma_{s,2} \int_{-1}^{+1} I^{1,2}(x, \mu', x_1, x_2, x_3) d\mu' \\ + 1_{\mu > 0} |\mu| \delta(x - x_2) \int_{-\infty}^{x_1} dx_0 p_2(x_0 \rightarrow x_1) I^{2,1}(x_2, \mu, x_0, x_1, x_2) \\ \text{pour } \mu < 0, I^{1,2}(x_3, \mu, x_1, x_2, x_3) = 0 \end{array} \right.$$



Test 1D stationnaire



Plan de longueur $L = 100$

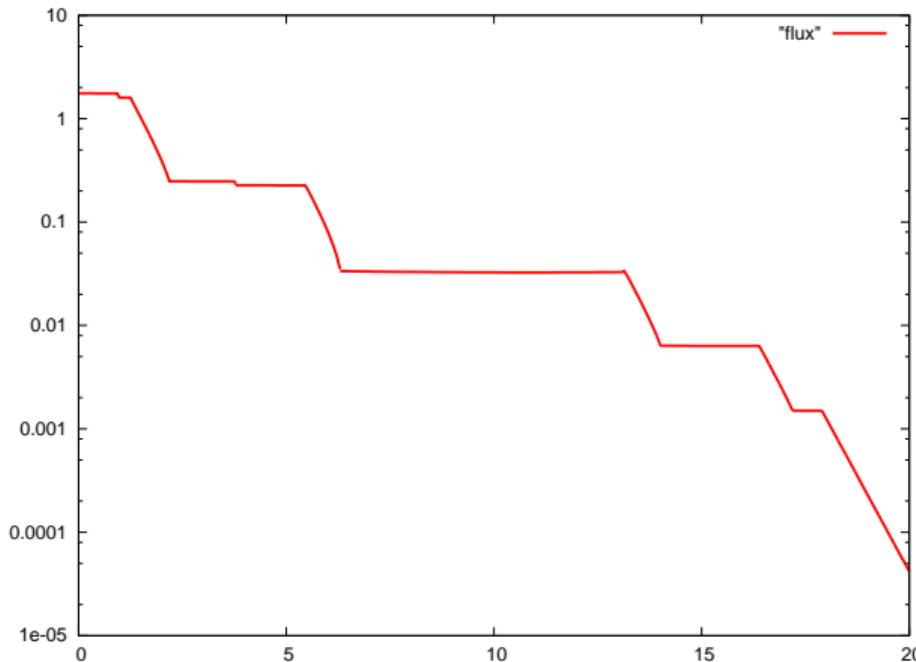
$\sigma_{t,1} = 10$, $\Lambda_1 = 1$, $\sigma_{t,2} = 0.01$, $\Lambda_2 = 2$, $\sigma_{s,1} = 9.9$, $\sigma_{s,2} = 0$, ce qui correspond à une alternance entre un matériau 2 purement absorbant et très transparent et le matériau 1 fortement diffusif (10 libre parcours par longueur de corde, $\frac{\sigma_{s,1}}{\sigma_{t,1}} = 0.99$).

La condition aux limites en $x = 0$ est $I^1(x, \mu) = 2$. et $I^2(x, \mu) = 2$. pour $\mu > 0$ de telle sorte que le flux entrant $\int_0^1 \mu(p_1 I^1(0, \mu) + p_2 I^2(0, \mu)) d\mu = 1$.

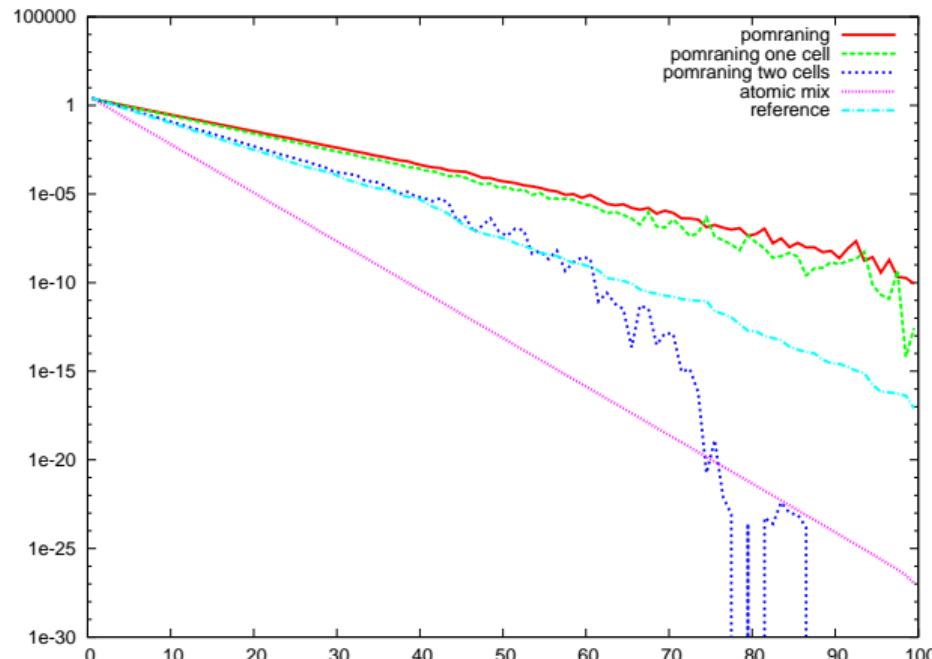
| | pomraning | pomraning une maille | pomraning deux mailles | atomic mix |
|------------|-----------|----------------------|------------------------|------------|
| R | 0.5361 | 0.626844 | 0.7146 | 0.7784 |
| ecart type | 0.00012 | 0.00013 | 0.00012 | 0. |

| | référence |
|------------|-----------|
| R | 0.74297 |
| ecart type | 0.000547 |

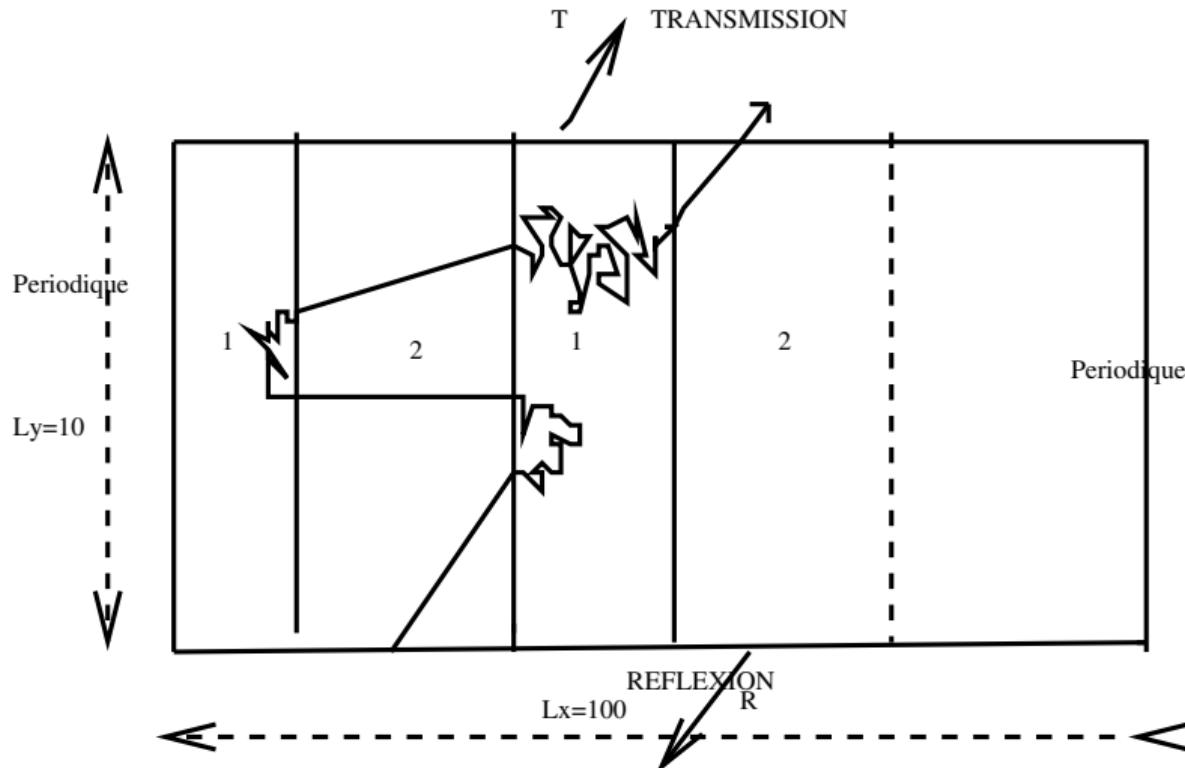
Intensité moyennée en angle pour une réalisation



Intensité moyennée en angle pour les différents modèles



Test 2D instationnaire



Rectangle de longueur $L_x = 100$ et $L_y = 10$ avec les mêmes données que dans le cas précédent :

La vitesse des particules v est choisie égale à 1.

Les milieux 1 et 2 sont disposés ici suivant des fentes traversantes en alternance perpendiculaires à l'axe des x .

La condition aux limites en $x = 0$ et $x = L_x$ est une condition périodique :

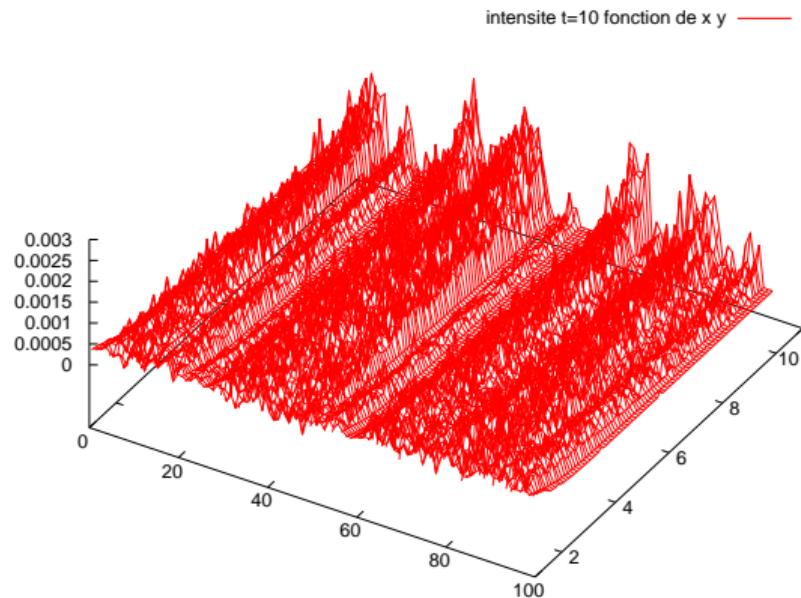
$$I^1(L_x, y, t, \mu, \phi) = I^1(0, y, t, \mu, \phi), I^2(L_x, y, t, \mu, \phi) = I^2(0, y, t, \mu, \phi)$$

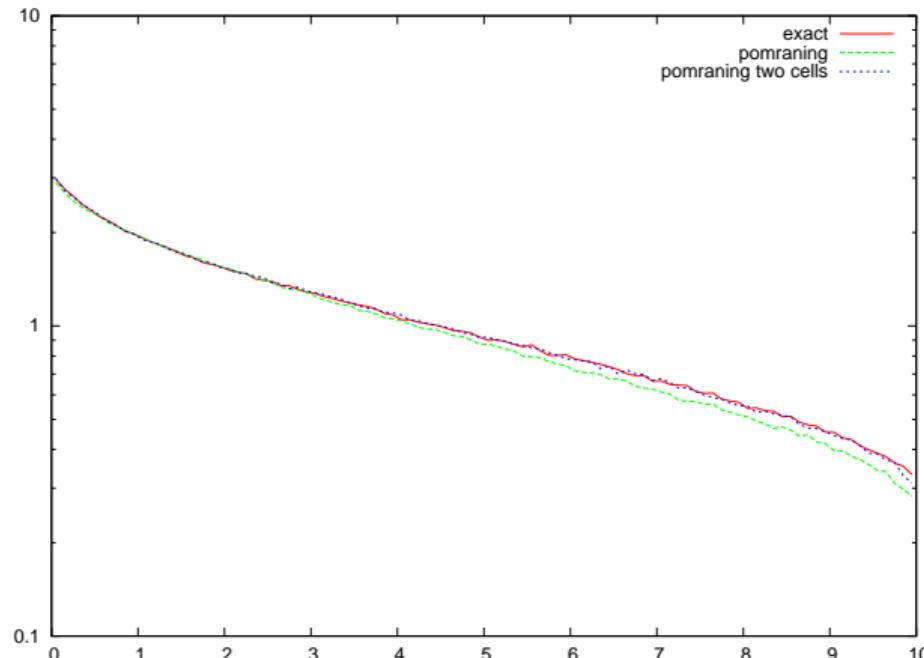
$I^1(x, 0, t, \mu, \phi) = \delta(t) \frac{1}{\pi * L_x}$, $I^2(x, 0, t, \mu, \phi) = \delta(t) \frac{1}{\pi * L_x}$ pour $\mu > 0$ de telle sorte que le flux entrant correspond à une particule lancée en loi de Lambert en $t = 0$ uniformément sur le segment $[0; L_x]$:

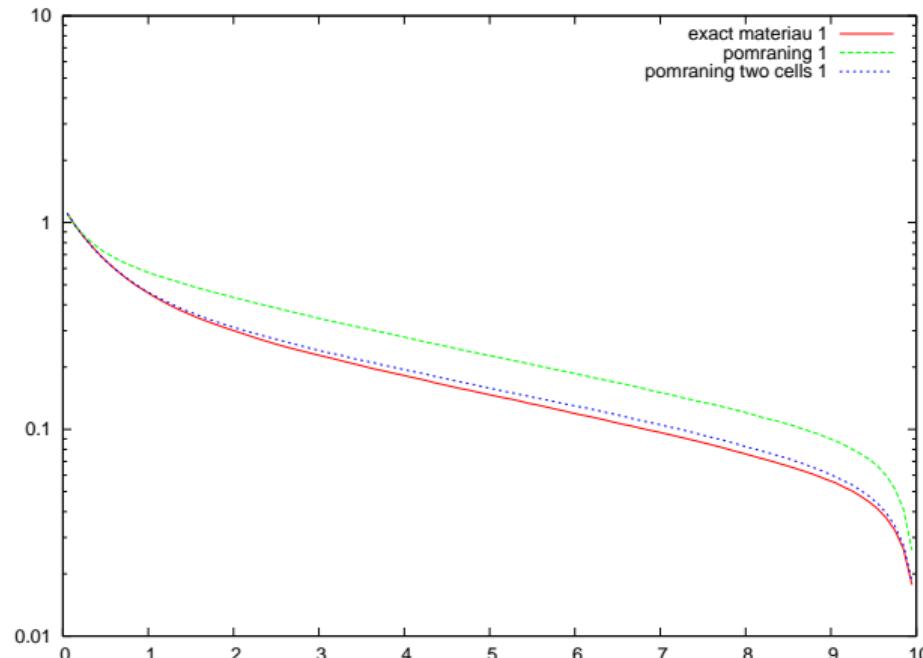
$$\int_0^{T_{max}} dt \int_0^{L_x} dx \int_0^1 \mu d\mu \int_0^{2\pi} d\phi (p_1 I^1(x, 0, t, \mu, \phi) + p_2 I^2(x, 0, t, \mu, \phi)) = 1.$$

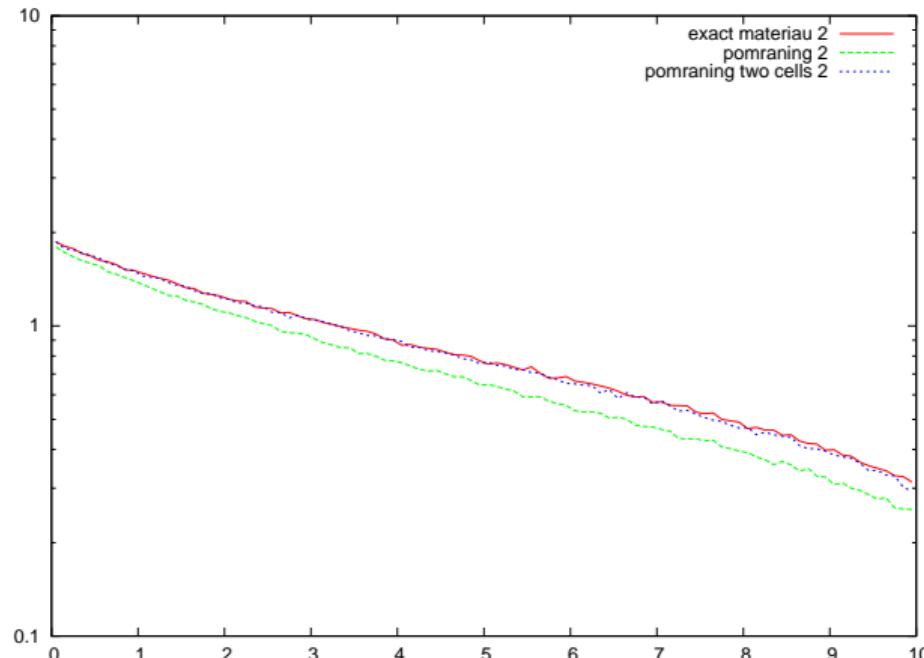
| | pomraning | pomraning deux mailles | référence |
|------------|-----------|------------------------|-----------|
| R | 0.458716 | 0.4917 | 0.496768 |
| écart type | 0.000133 | 0.00014 | |
| T | 0.1771 | 0.2012 | 0.203714 |
| écart type | 0.00011 | 0.00012 | |

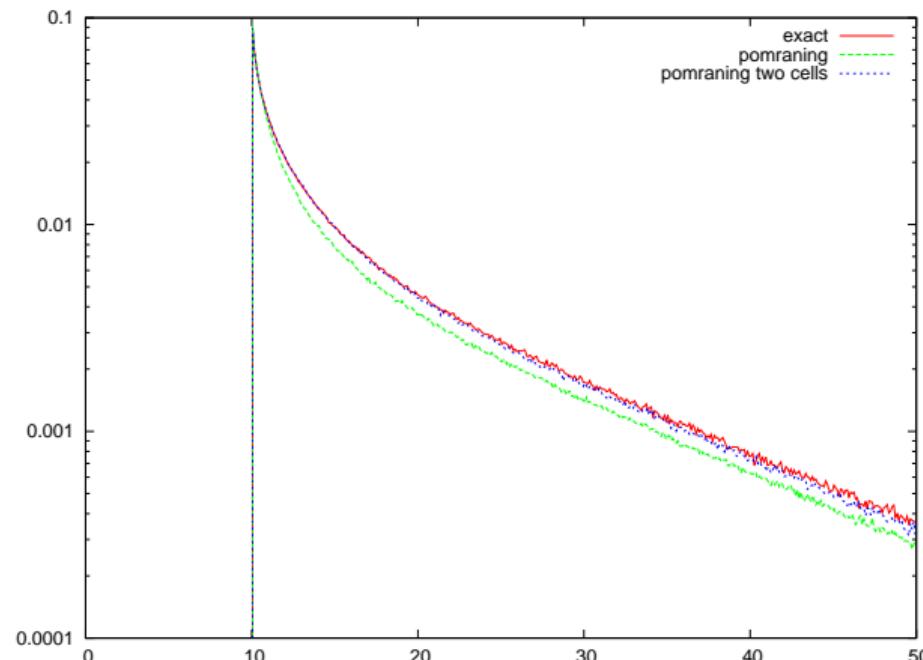
Intensité moyennée en angle pour une réalisation t=10



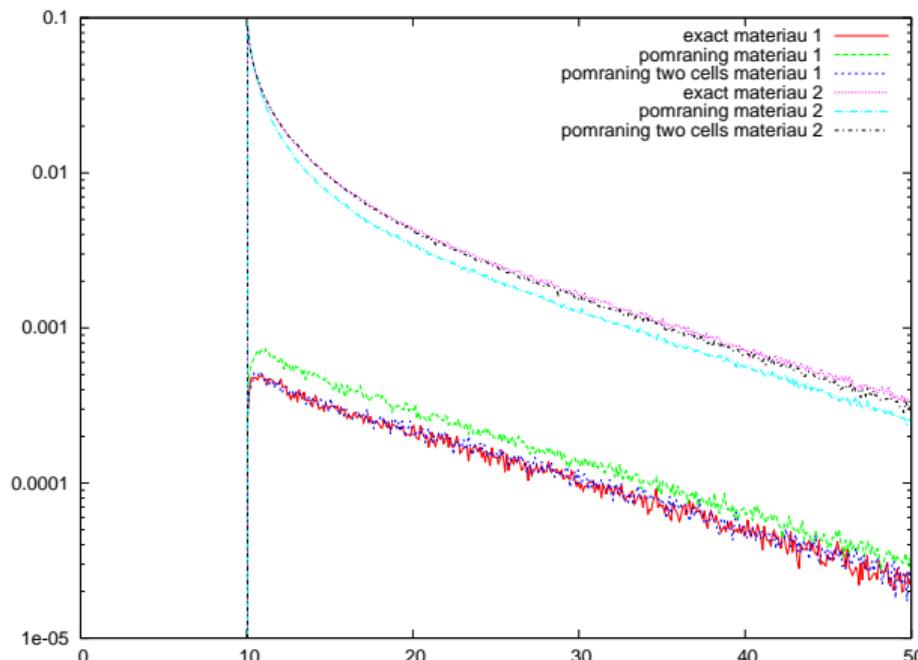
Intensité intégrée en temps et en x , moyennée en angle







Transmission instationnaire matériaux 1 et 2



Ce qui a été fait :

- Ecriture de l'équation correspondant au modèle à deux mailles, déterministe ?
- Généralisation à n interfaces en 2D et 3D permettant d'obtenir des solutions de référence.

En cours :

- Améliorer le modèle de Pomraning en introduisant un albédo au changement de matériaux.

Futur :

- Stage M2, thèse → exploiter les méthodes de Machine Learning pour retrouver certains résultats des modèles à mémoire.

BACKUP

Particule x, μ, m

En $x = 0$, on tire le matériau m suivant p_m

Puis tant que la particule n'est pas sortie du domaine :

pour $\mu > 0$, on tire x suivant la loi

$$\left(\frac{\sigma_{t,m}}{\mu} + \frac{1}{\Lambda_m} \right) \exp \left(- \left(\frac{\sigma_{t,m}}{\mu} + \frac{1}{\Lambda_m} \right) \frac{x - x_{avant}}{\mu} \right),$$

- choc avec la proba $\frac{\sigma_{t,m}}{\sigma_{t,m} + \frac{\mu}{\Lambda_m}}$
 - scattering avec la proba $\frac{\sigma_{s,m}}{\sigma_{t,m}}$
 - absorption avec la proba $1 - \frac{\sigma_{s,m}}{\sigma_{t,m}}$
- changement de matériau avec la proba $\frac{\frac{\mu}{\Lambda_m}}{\sigma_{t,m} + \frac{\mu}{\Lambda_m}}$

$$\begin{aligned} p_1 I^1(x, \mu) &= 1_{\mu > 0} \int_{-\infty}^x dx' \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' \frac{\sigma_{s,1}}{\mu} \exp(-((\sigma_{t,1} + \frac{\mu}{\Lambda_1}) \frac{x - x'}{\mu}) p_1 I^1(x', \mu') \\ &\quad + 1_{\mu > 0} \int_{-\infty}^x dx' \frac{1}{\Lambda_2} \exp(-((\sigma_{t,1} + \frac{\mu}{\Lambda_1}) \frac{x - x'}{\mu}) p_2 I^2(x', \mu) \\ &\quad + 1_{\mu < 0} \int_x^\infty dx' \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' \frac{\sigma_{s,1}}{|\mu|} \exp(-((\sigma_{t,1} + \frac{|\mu|}{\Lambda_1}) \frac{x - x'}{\mu}) p_1 I^1(x', \mu') \\ &\quad + 1_{\mu < 0} \int_x^\infty dx' \frac{1}{\Lambda_2} \exp(-((\sigma_{t,1} + \frac{|\mu|}{\Lambda_1}) \frac{x - x'}{\mu}) p_2 I^2(x', \mu) \end{aligned}$$

Particule x, μ, m, x_1, x_2, x_3

En $x = 0$, on tire le matériau m suivant p_m , on fait $x_1 = 0$, si $\mu > 0$, on tire x_2 sur $[0 : +\infty[$ suivant la loi $p_m(0 \rightarrow x_2)$, on tire x_3 sur $[x_2 : +\infty[$ suivant la loi $p_{m+1}(x_2 \rightarrow x_3)$, ($m + 1$ signifie $(m + 1) \text{ mod}(2)$)

donc entre x_1 et x_2 on a le matériau m et entre x_2 et x_3 le matériau $(m + 1)$

Puis tant que la particule n'est pas sortie de l'intervalle $[x_1, x_3]$:

on tire x suivant la loi $(\frac{\sigma_{t,m}}{|\mu|}) \exp(-(\sigma_{t,m}) \frac{x - x_{avant}}{\mu})$

sur $[x : +\infty[$ ou $] -\infty : x]$ si $\mu > 0$ (resp < 0)

si $(x_1 < x_{avant} < x_2$ et $x_1 < x < x_2)$ ou $(x_2 < x_{avant} < x_3$ et $x_2 < x < x_3)$ on avance la particule en x

- scattering avec la proba $\frac{\sigma_{s,m}}{\sigma_{t,m}}$

- absorption avec la proba $1 - \frac{\sigma_{s,m}}{\sigma_{t,m}}$

Sinon,

Si la particule sort par x_2 , $x = x_2$, on change son matériau

Si la particule sort par x_1 , on fait $x_3 = x_2$, $x_2 = x_1$, on tire le nouveau x_1 sur $] -\infty : x_2]$ suivant la loi $p_{m+1}(x_2 \rightarrow x_1)$, on change son matériau , on oublie l'ancienne interface x_3

Si la particule sort par x_3 , on fait $x_1 = x_2$, $x_2 = x_3$, on tire le nouveau x_3 sur $]x_2 : +\infty]$ suivant la loi $p_m(x_2 \rightarrow x_3)$, on change son matériau, on oublie l'ancienne interface x_1

Pour le modèle atomix mix, on a $\sigma_t = p_1 * \sigma_{t,1} + p_2 * \sigma_{t,2} = 3.34$ et $\sigma_s = p_1 * \sigma_{s,1} + p_2 * \sigma_{s,2} = 3.3$ soit $\frac{\sigma_s}{\sigma_t} = 0.988$ et $\sigma_a = 0.04$ donc un matériau fortement diffusif.

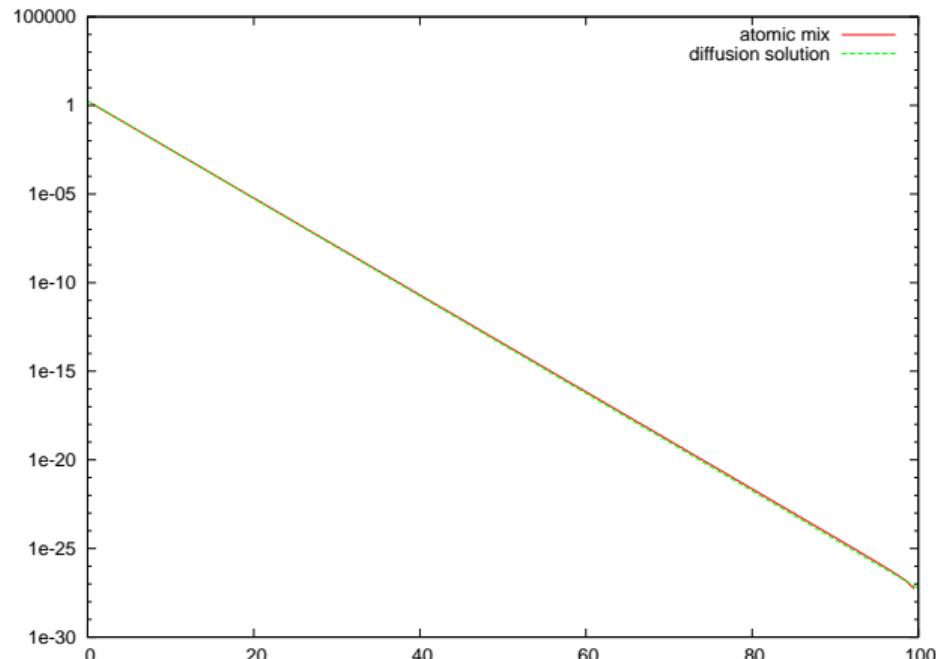
Pour vérifier, on compare la solution "atomic mix" à la solution exacte de l'équation de diffusion

$E(x) = \int_{-1}^1 I(x, \mu) d\mu$ sur $[0; \infty[$ avec ces données et une condition aux limites de Marshak en $x = 0$ est

$$4c * \exp(-\sqrt{(3 * \sigma_t * \sigma_a)} * x) \text{ avec } c = \frac{1}{1 + 2\sqrt{\frac{\sigma_a}{3\sigma_t}}} \text{ donc } c = 0.8876.$$

R pour la solution de l'équation de diffusion sur $[0; \infty[$ associée au modèle atomix mix donne

$$1 - 4c * \sqrt{\frac{\sigma_a}{3\sigma_t}} = 0.7757.$$



Le précurseur correspond aux particules issues de la condition aux limites en $z = 0$ dans le matériau transparent n'ayant subi aucune collision ni changement de matériau.

