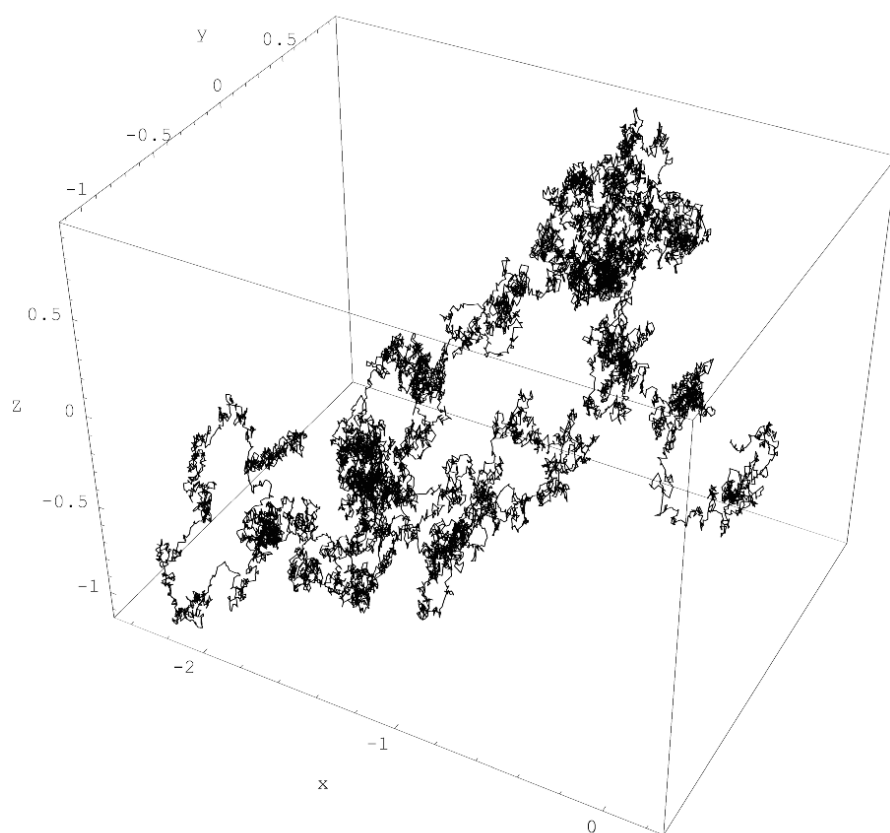


Notes de Cours de
Processus Stochastiques & Neutronique



Alain MAZZOLO, CEA-Saclay
Document rédigé en L^AT_EX par Aloÿs DUFOUR

alain.mazzolo@cea.fr

Table des matières

1	Introduction	5
2	Processus stochastiques	7
2.1	Introduction	7
2.2	Processus stochastiques	7
2.3	Processus markoviens	8
2.4	Équation maîtresse	10
2.4.1	Extraire de l'information à partir de l'équation maîtresse	12
2.5	Équation de Fokker-Planck	15
2.6	Références	16
3	Mouvement brownien	17
3.1	Brève introduction historique	17
3.2	équation de LANGEVIN	17
3.3	Mouvement brownien et théorie du potentiel	21
3.3.1	Les fonctions harmoniques	21
3.3.2	Propriétés du mouvement brownien	22
3.4	Annexe : somme de variables aléatoires indépendantes	26
3.5	Références	27
4	Diffusion des neutrons	29
4.1	Introduction	29
4.2	Les grandeurs de la neutronique	31
4.3	Interface entre deux milieux diffusifs	35
4.4	Interface entre un milieu diffusif et le vide	35
4.5	Exemples importants	36
4.6	Complément au TD sur la diffusion dans les domaines bornés	39
4.7	Références	40
5	Équation du transport	41
5.1	Introduction	41
5.2	Équation de BOLTZMANN	41
5.3	Cas stationnaire	42
5.4	Excursion dans les domaines bornés	44
5.4.1	Probabilités de collisions	48
5.4.2	Nombre moyen de collisions	49
5.5	Références	50

6	Méthode de Monte Carlo	51
6.1	Présentation	51
6.2	Échantillonnage d'une loi de probabilité	52
6.2.1	Cas discret	52
6.2.2	Cas continu	52
6.3	Réduction de variance	53
6.4	Résolution de l'équation de la diffusion par Monte Carlo	55

Chapitre 1

Introduction

Habituellement la population de neutrons sein de systèmes nucléaires, tels que les réacteurs, est décrite à l'aide d'équations macroscopiques (équation de la diffusion, équation de BOLTZMANN linéaire) qui forment l'ossature de la neutronique. De part leur dérivation, ces équations offrent une description moyennée (statistique) de la population neutronique. D'un point de vue individuel (microscopique) la vie d'un neutron est bien plus chaotique. Sa naissance qui s'accompagne d'une vitesse l'oblige à se mouvoir dans le milieu nucléaire. Dès lors son existence constituera en une succession de collisions aléatoires avec les noyaux composants la matière nucléaire. En premier lieu, le neutron peut être absorbé, auquel cas sa trajectoire se termine. Il peut aussi subir une diffusion (élastique, inélastique) sur un noyau, sa trajectoire se poursuivant avec une perte d'énergie plus ou moins importante. Enfin, sur de la matière fissible il peut donner naissance à des neutrons prompts et retardés, dans ce dernier cas sa trajectoire possède des ramifications. De fait, d'un point de vue microscopique la trajectoire d'un neutron forme généralement une marche aléatoire branchante. L'objectif de cette option est d'aborder ces deux aspects, de montrer que l'interaction entre ces deux domaines (équations du transport/marches aléatoires) permet une meilleure compréhension du comportement des neutrons dans la matière nucléaire et d'obtenir (voir de généraliser) certains résultats qui autrement seraient difficiles à établir avec des techniques purement classiques. Bien souvent on partira des marches aléatoires (aspect micro) pour aboutir à des résultats macroscopiques, mais pas seulement. En effet, l'équation de BOLTZMANN linéaire permet aussi d'obtenir des résultats profonds (et d'actualité!) sur les marches aléatoires notamment dans des domaines bornés.

Pour ce réaliser ce programme, des notions sur les processus stochastiques (en particulier markoviens) seront introduites au chapitre 2. La limite de petits sauts (que les neutrons atteignent lorsqu'ils ont perdu suffisamment d'énergie) nous conduit à aborder le vaste sujet du mouvement brownien au chapitre 3. L'équation de la diffusion pour les neutrons est ensuite établie au chapitre 4 et celle de BOLTZMANN (plus générale, mais plus difficile à résoudre) au chapitre 5. Compte tenu de la complexité de la géométrie des systèmes nucléaires, une résolution analytique des équations précédentes reste hors d'atteinte. Deux chemins s'ouvrent alors : soit on opte pour une résolution déterministe (avec des techniques fines d'analyse numérique) soit on choisit une résolution stochastique. L'orientation du cours largement axé les probabilités nous amène naturellement vers cette seconde approche, dite méthode de Monte Carlo, qui sera exposée au dernier chapitre.

Chapitre 2

Processus stochastiques

2.1 Introduction

Il existe deux grandes classes de phénomènes en physique :

- Ceux qui dépendent fortement du passé (des conditions initiales) $\Rightarrow$ systèmes déterministes.
- Ceux qui ne dépendent pas (ou faiblement) du passé et dont la valeur est partiellement prévisible. L'étude du comportement de tels systèmes est fondée sur le calcul des probabilités. Lorsqu'un tel système (à valeur dans $\mathbb{R}$, $\mathbb{R}^n$, discret, voir complexe) dépend d'un paramètre continu $\Rightarrow$ processus stochastiques. En physique, ce paramètre continu, est le temps.

2.2 Processus stochastiques

Considérons le paramètre continu $t \in \mathbb{R}$ et prenons-en une subdivision ordonnée $t_0 < t_1 < \dots < t_n < t_{n+1}$, et notons $X(t = t_i) = x_i$,

Définition 1 (Densité de probabilité). Pour des intervalles infinitésimaux $I_1, \dots, I_n$, posons

$$\begin{aligned} P[x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] dx_n \dots dx_2 dx_1 &= P[X(t_1) \in I_1; \dots; X(t_n) \in I_n] \\ &= \frac{\text{nombre de réalisations qui passent dans } I_1, \dots, I_n}{\text{nombre de réalisations totales}} \end{aligned}$$

Les densités de probabilité satisfont aux relations :

$$\begin{aligned} a) & P[x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] \geq 0 \\ b) & \int P[x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] dx_n \dots dx_2 dx_1 = 1 \\ c) & \int P[x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] dx_n = P[x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] \end{aligned}$$

Supposons que l'on ait de l'information sur le système jusqu'à un instant t_k , on cherche à le caractériser (à le décrire) pour des temps futurs.

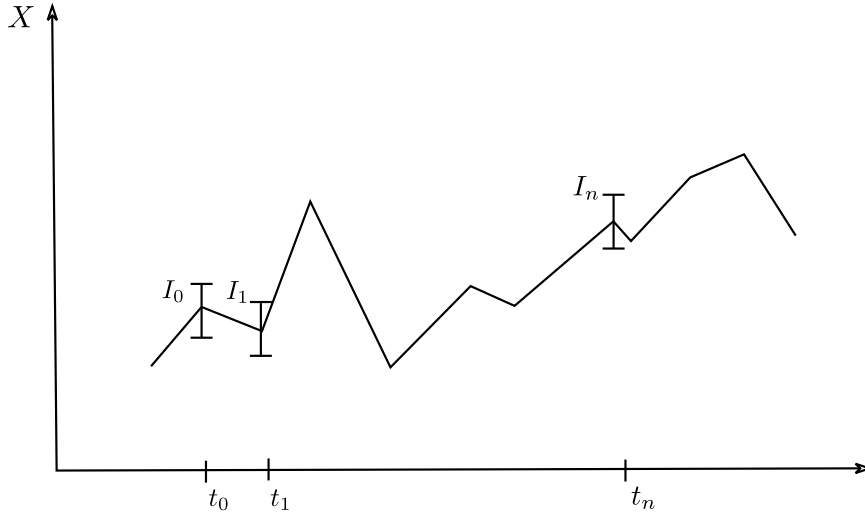


FIGURE 2.1 – Vue schématique des intervalles infinitésimaux sur un processus stochastique.

Définition 2 (Probabilité conditionnelle).

$$\begin{aligned} P[x_{n+1}, t_{n+1} \mid x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] &= P[X(t_{n+1}) \in I_{n+1} \mid X(t_1) \in I_1, \dots, X(t_n) \in I_n] \\ &= \frac{P[X(t_1) \in I_1, \dots, X(t_n) \in I_n, X(t_{n+1}) \in I_{n+1}]}{P[X(t_1) \in I_1, \dots, X(t_n) \in I_n]}. \end{aligned}$$

De plus, le caractère continu du paramètre permet le passage à la limite :

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} P[x_2, t_2 \mid x_1, t_1] = \delta(x_2 - x_1).$$

2.3 Processus markoviens

La notion de probabilité conditionnelle va nous permettre de définir une importante classe de processus dits de Markov (ou processus markoviens), *i.e.* des processus tels que

$$P[x_{n+1}, t_{n+1} \mid x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1] = P[x_{n+1}, t_{n+1} \mid x_n, t_n]. \quad (2.1)$$

Le futur du processus ne dépend pas de son passé (c'est à dire du chemin qu'il a déjà parcouru) mais seulement de l'état présent. En physique, le caractère markovien d'un processus n'est pas toujours évident à établir comme on le verra avec le mouvement brownien.

Exemple 1. la marche aléatoire libre sur un réseau est un processus markovien, la marche auto-évitante ne l'est pas. Des exemples de réalisations de ces processus sont montrés sur la figure Fig.(2.2).

Propriétés 1 (dans le cas markovien).

$$P[x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1] = P[x_3, t_3 \mid x_2, t_2] P[x_2, t_2 \mid x_1, t_1] P[x_1, t_1].$$

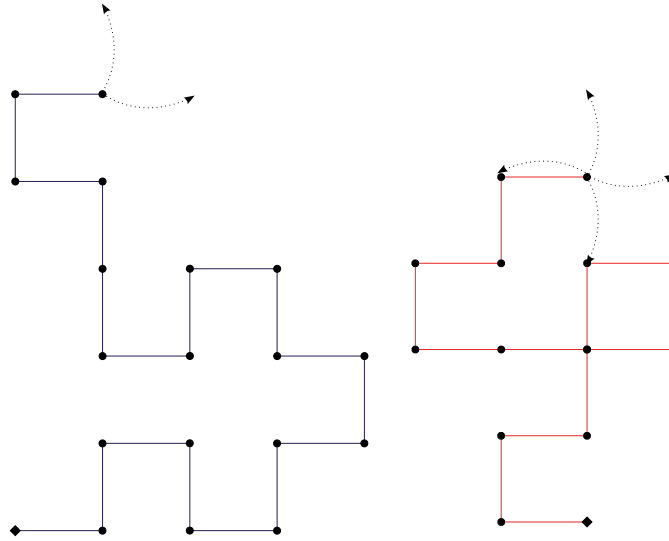


FIGURE 2.2 – Marches aléatoires sur un réseau carré : à gauche la marche auto-évitante n'est pas markovienne (certains points du réseau ne sont plus accessibles, l'état futur de la marche est donc conditionné par son passé), à droite l'état futur de la marche aléatoire libre ne dépend que du point présent, cette marche est markovienne.

Preuve. Partons de la définition de la probabilité conditionnelle

$$P[x_2, t_2; x_1, t_1] = P[x_2, t_2 | x_1, t_1] P[x_1, t_1]$$

et appliquons-la

$$P[x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1] = P[x_3, t_3 | x_2, t_2; x_1, t_1] P[x_2, t_2; x_1, t_1]$$

en se rappelant de ce qu'est un processus markovien, le résultat suit. $\square$

La relation précédente se généralise immédiatement,

$$P[x_n, t_n; \dots; x_1, t_1] = P[x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}] \times \dots \times P[x_2, t_2 | x_1, t_1] P[x_1, t_1]. \quad (2.2)$$

Par conséquent, les données de $P[x_1, t_1]$ et de la probabilité de transition $P[x_k, t_k | x_{k-1}, t_{k-1}]$ déterminent entièrement le processus de Markov.

Théorème 1 (Eq. de Chapman-Kolmogorov). *Pour les processus markoviens, la probabilité d'être à (x_3, t_3) venant de (x_1, t_1) en passant par un état intermédiaire, est donnée par*

$$P[x_3, t_3 | x_1, t_1] = \int P[x_3, t_3 | x_2, t_2] P[x_2, t_2 | x_1, t_1] dx_2 \quad (2.3)$$

Preuve.

$$\int P[x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1] dx_2 = \int P[x_3, t_3 | x_2, t_2] P[x_2, t_2 | x_1, t_1] P[x_1, t_1] dx_2$$

$$i.e. \quad P[x_3, t_3; x_1, t_1] = P[x_1, t_1] \int P[x_3, t_3 | x_2, t_2] P[x_2, t_2 | x_1, t_1] dx_2$$

$$i.e. \quad P[x_3, t_3 | x_1, t_1] P[x_1, t_1] = P[x_1, t_1] \int P[x_3, t_3 | x_2, t_2] P[x_2, t_2 | x_1, t_1] dx_2$$

d'où le résultat. $\square$

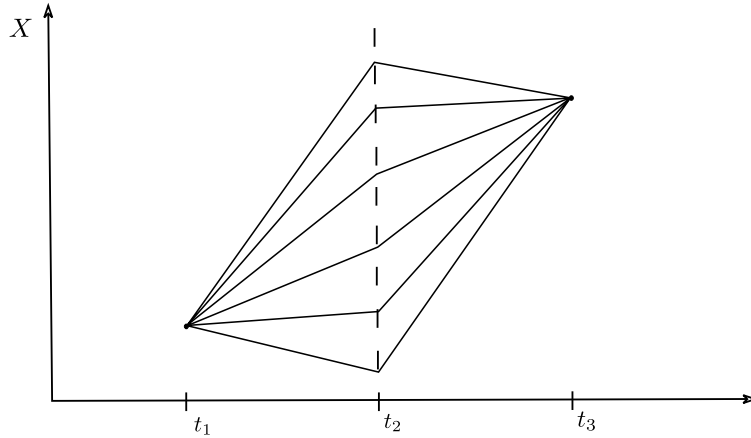


FIGURE 2.3 – Nous sommes sur toutes les étapes possibles.

2.4 Équation maîtresse

Lorsque les probabilités de transition sont stationnaires, la donnée d'un temps de départ et d'un temps d'arrivée devient superflue et seule la différence entre ces deux temps est pertinente. On se place dorénavant dans cette hypothèse et on change en conséquence la notation :

$$P[x_2, t_2 | x_1, t_1] = P[x_2, \Delta t | x_1] \quad \Delta = t_2 - t_1.$$

En plus de ce changement de notation, nous aimerions des équations plus simples à manipuler, les équations intégrales étant peu coopératives. En tant que physiciens, nous préférons généralement des équations locales. Pour cela effectuons un développement limité

$$P[x_2, \Delta t | x_1] = (1 - \lambda \Delta t) \delta(x_2 - x_1) + \underbrace{\Delta t \cdot W(x_2 | x_1)}_{\text{proba } x_1 \rightarrow x_2} + o(\Delta t) \quad (2.4)$$

W est la probabilité par unité de temps d'aller de x_1 en x_2 . L'équation précédente traduit le fait que la probabilité d'être dans l'état x_2 après Δt en partant de l'état x_1 est la somme de deux événements exclusifs : soit le processus reste dans l'état x_1 (il n'évolue pas) ce que retranscrit le terme δ soit il passe dans un autre état avec une certaine probabilité de transition. l'Eq. 2.4 exclut donc la possibilité d'avoir plusieurs événements (i.e. plusieurs changements d'état) pendant Δt .

En se servant de la normalisation,

$$\int P[x_2, \Delta t | x_1] dx_2 = 1 = 1 - \lambda \Delta t + \Delta t \int W(x_2 | x_1) dx_2$$

donc $\lambda = \int dx_2 W(x_2 | x_1)$.

Grâce à ce résultat intermédiaire, nous allons établir l'équation maîtresse. Pour cela, il faut considérer un processus stochastique markovien $X(t)$, prenons un point de départ x_1 , et un point d'arrivée $(x_3, t + \Delta t)$, et regardons un point infinitésimalement proche de l'arrivée (x_2, t) comme schématisé sur la figure Fig.(2.4) :

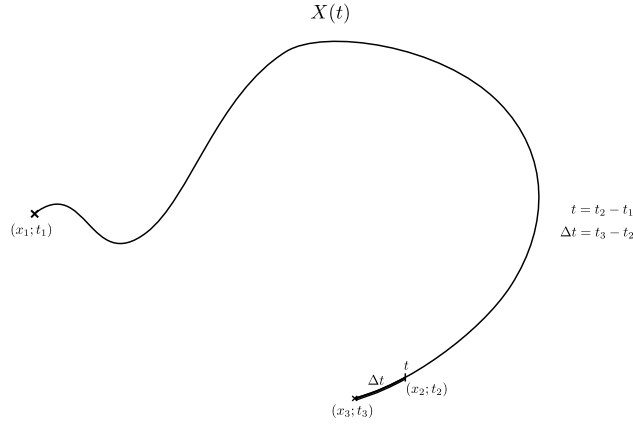


FIGURE 2.4 – Processus stochastique découpé.

$$P[x_3, t_3 - t_1 | x_1] = \int P[x_3, t_3 - t_2 | x_2] P[x_2, t_2 - t_1 | x_1] dx_2$$

$$i.e. P[x_3, t + \Delta t | x_1] = \int P[x_3, \Delta t | x_2] P[x_2, t | x_1]$$

$$i.e. P[x_3, t | x_1] + \Delta t \cdot \frac{\partial P}{\partial t}[x_3, t | x_1] = \int \left((1 - \lambda \Delta t) \delta(x_3 - x_2) + \Delta t \cdot W(x_3 | x_2) \right) \cdot P[x_2, t | x_1]$$

avec $\lambda = \int dx_0 \cdot W(x_0 | x_2)$

$$\begin{aligned} i.e. P[x_3, t | x_1] + \Delta t \cdot \frac{\partial P}{\partial t}[x_3, t | x_1] &= \left(1 - \Delta t \int dx_0 \cdot W(x_0 | x_3) \right) \cdot P[x_3, t | x_1] \\ &\quad + \Delta t \int dx_2 \cdot W(x_3 | x_2) P[x_2, t | x_1] \\ &= P[x_3, t | x_1] + \Delta t \left(\int dx_2 W(x_3 | x_2) P[x_2, t | x_1] \right. \\ &\quad \left. - \int dx_0 W(x_0 | x_3) P[x_3, t | x_1] \right). \end{aligned}$$

Finalement,

$$\frac{\partial P}{\partial t}[x_3, t | x_1] = \int dx_2 W(x_3 | x_2) P[x_2, t | x_1] - \int dx_0 W(x_0 | x_3) P[x_3, t | x_1]$$

x_1 étant le point d'origine et restant invariable, on l'omet habituellement. Afin d'aboutir à une forme plus symétrique de l'équation précédente, le point d'arrivée x_3 est noté x et les variables muettes d'intégration x' , on obtient donc

Théorème 2 (équation Maîtresse). *Pour un processus stochastique de MARKOV,*

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t}(x, t) = \int dx' \left(W(x | x') P(x', t) - W(x' | x) P(x, t) \right)} \quad (2.5)$$

Au cas où les états du systèmes sont finis ou dénombrables, la version discrète de l'équation Maître devient,

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t}(n, t) = \sum_{n'} (W(n' \rightarrow n)P(n', t) - W(n \rightarrow n')P(n, t))} \quad (2.6)$$

2.4.1 Extraire de l'information à partir de l'équation maîtresse

Regardons maintenant comment extraire de l'information (moyenne, variance, etc) à partir de l'équation Maître. Pour se faire on va travailler sur des exemples. Dans un premier temps, on considère un système caractérisé par le nombre d'individus n d'une espèce A qu'il contient à l'instant t et dont l'évolution suit un processus de décroissance (ce processus modélise une décroissance radioactive par exemple). La probabilité pour qu'un individu disparaisse pendant dt vaut λdt et le processus se représente symboliquement par :



et l'équation Maître s'écrit :

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

La valeur moyenne $\langle n(t) \rangle$ du nombre d'individus est donnée par

$$\langle n(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n P(n, t). \quad (2.8)$$

En multipliant l'équation Maître par n puis en sommant sur cet indice, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n(t) \rangle}{dt} &= \sum_{n=0}^{\infty} [\lambda(n+1)n P(n+1, t) - \lambda n^2 P(n, t)] \\ &= \lambda \sum_{n=0}^{\infty} [n(n-1) - n^2] P(n, t) \\ &= -\lambda \sum_{n=0}^{\infty} n P(n, t) \\ &= -\lambda \langle n(t) \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

avec comme condition initiale, $\langle n(t=0) \rangle = n_0$, la solution vaut :

$$\langle n(t) \rangle = n_0 e^{-\lambda t}. \quad (2.10)$$

De la même manière, on peut calculer la variance du système. Pour cela, on multiplie l'équation

Maîtresse par n^2 puis en somme sur cet indice, on obtient alors :

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle n(t)^2 \rangle}{dt} &= \sum_{n=0}^{\infty} [\lambda(n+1)n^2 P(n+1, t) - \lambda n^3 P(n, t)] \\
 &= \lambda \sum_{n=0}^{\infty} [n(n-1)^2 - n^3] P(n, t) \\
 &= \lambda \sum_{n=0}^{\infty} [n^3 - 2n^2 + n - n^3] P(n, t) \\
 &= -2\lambda \langle n(t)^2 \rangle + \lambda \langle n(t) \rangle \\
 &= -2\lambda \langle n(t)^2 \rangle + \lambda n_0 e^{-\lambda t}
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

dont la solution est donnée par

$$\langle n(t)^2 \rangle = A(t) e^{-2\lambda t}. \tag{2.12}$$

En faisant varier la constante $A(t)$ et en imposant comme condition initiale $\langle n(t=0)^2 \rangle = n_0^2$, la solution vaut :

$$\langle n(t)^2 \rangle = n_0 e^{-\lambda t} + (n_0^2 - n_0) e^{-2\lambda t} \tag{2.13}$$

et pour la variance,

$$\langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2 = n_0 e^{-\lambda t} (1 - e^{-\lambda t}) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0. \tag{2.14}$$

On considère maintenant un processus de croissance et de mort où chaque individu a une densité de probabilité par unité de temps α de donner naissance à un individu et une densité de probabilité par unité de temps μ de mourir. Sous ces hypothèses on a,

$$\begin{cases} W(n \rightarrow n+1) &= \alpha n \\ W(n \rightarrow n-1) &= \mu n \end{cases}$$

Ce processus se symbolise par :

$$\begin{cases} A &\longrightarrow 2A & \text{taux } \alpha \\ A &\longrightarrow \emptyset & \text{taux } \mu \end{cases}$$

et l'équation Maîtresse s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial P}{\partial t}(n, t) &= W(n-1 \rightarrow n) P(n-1, t) + W(n+1 \rightarrow n) P(n+1, t) \\
 &\quad - W(n \rightarrow n-1) P(n, t) - W(n \rightarrow n+1) P(n, t) \\
 &= \alpha(n-1) P(n-1, t) + \mu(n+1) P(n+1, t) \\
 &\quad - \alpha n P(n, t) - \mu n P(n, t)
 \end{aligned}$$

La valeur moyenne $\langle n(t) \rangle$ du nombre d'individus est donnée par

$$\langle n(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n P(n, t). \tag{2.15}$$

En multipliant l'équation Maître par n puis en sommant sur cet indice, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle n(t) \rangle}{dt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\alpha(n-1)nP(n-1, t) + \mu(n+1)nP(n+1, t) - \alpha n^2 P(n, t) - \mu n^2 P(n, t) \right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\alpha n(n+1) + \mu n(n-1) - \alpha n^2 - \mu n^2 \right] P(n, t) \\
&= (\alpha - \mu) \sum_{n=0}^{\infty} nP(n, t) \\
&= (\alpha - \mu) \langle n(t) \rangle
\end{aligned} \tag{2.16}$$

avec comme condition initiale, $\langle n(t=0) \rangle = n_0$, la solution vaut :

$$\langle n(t) \rangle = n_0 e^{(\alpha - \mu)t} \tag{2.17}$$

De la même manière, on peut calculer la variance du système. Pour cela, on multiplie l'équation Maître par n^2 puis en somme sur cet indice, on obtient alors :

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle n(t)^2 \rangle}{dt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\alpha(n-1)n^2 P(n-1, t) + \mu(n+1)n^2 P(n+1, t) - \alpha n^3 P(n, t) - \mu n^3 P(n, t) \right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\alpha n(n+1)^2 + \mu n(n-1)^2 - \alpha n^3 - \mu n^3 \right] P(n, t) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} [2(\alpha - \mu)n^2 + (\alpha + \mu)n] P(n, t) \\
&= 2(\alpha - \mu) \langle n(t)^2 \rangle + (\alpha + \mu) \langle n(t) \rangle
\end{aligned} \tag{2.18}$$

On se limite au cas critique où $\alpha = \mu$, $\langle n(t) \rangle = n_0$ et l'équation précédente se réduit à :

$$\frac{d\langle n(t)^2 \rangle}{dt} = (\alpha + \mu) \langle n(t) \rangle = 2\alpha n_0 \tag{2.19}$$

La solution est donnée par, $\langle n(t)^2 \rangle = 2\alpha n_0 t + n_0^2$ et la variance du système croît linéairement avec le temps

$$\langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2 = 2\alpha n_0 t. \tag{2.20}$$

Cette approche permet d'étudier de très nombreux systèmes, en voici un autre, le processus de réaction (annihilation) caractérisé par :



L'équation Maître s'écrit :

$$\frac{\partial P}{\partial t}(n, t) = \lambda \frac{(n+2)(n+1)}{2} P(n+2, t) - \lambda \frac{n(n-1)}{2} P(n, t) \tag{2.22}$$

puis,

$$\begin{aligned}\frac{d\langle n(t) \rangle}{dt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2} \left[\lambda(n+2)(n+1)nP(n+2, t) - \lambda n^2(n-1)P(n, t) \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2} \lambda \left[n(n-1)(n-2) - n^2(n-1) \right] P(n, t) \\ &= -\lambda \underbrace{\langle n(t)(n(t)-1) \rangle}_{\text{moment factoriel}}\end{aligned}$$

L'équation portant sur la moyenne fait donc intervenir le moment d'ordre 2. De la même manière, l'équation du second moment nécessiterait la connaissance du moment d'ordre 3 et ainsi de suite, de sorte que le système d'équations n'est pas fermé. Pour le rendre fermé, remarquons tout d'abord que pour $n(t)$ grand, on a $n(t)(n(t)-1) \sim n(t)^2$, on se place ensuite dans l'approximation $\langle n(t)^2 \rangle \approx \langle n(t) \rangle^2$ ce qui revient à supposer que la variance est faible, i.e. $\langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2 \ll 1$. Sous ces hypothèses l'équation de la moyenne devient,

$$\frac{d\langle n(t) \rangle}{dt} = -\lambda \langle n(t) \rangle^2 \quad \text{équation cinétique} \quad (2.23)$$

dont la solution est donnée par,

$$\langle n(t) \rangle = \frac{n_0}{1 + \lambda n_0 t}. \quad (2.24)$$

2.5 Équation de Fokker-Planck

Partons de l'équation maîtresse, avec un saut de $r = x - x'$,

$$W(x|x') = W_r(x') = W_r(x - r)$$

donc

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int dr \left(W_r(x - r)P(x - r, t) - W_{-r}(x)P(x, t) \right)$$

pour aller vers un processus de diffusion, on donc injecter des hypothèses supplémentaires : celles de petits sauts devant la taille du système. Plus précisément, on considère des sauts piqués autour de $r = 0$, et variant lentement en fonction de la position, de sorte qu'un développement dit de KRAMERS-MOYAL en $x - r$ va être possible.

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} &= \int dr \left(W_r(x)P(x, t) - r \frac{\partial}{\partial x} (W_r(x)P(x, t)) + \frac{r^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (W_r(x)P(x, t)) + \dots \right) \\ &\quad - \int dr W_{-r}(x)P(x, t)\end{aligned} \quad (2.25)$$

que l'on appelle développement de KRAMERS-MOYAL. Lorsque le développement de KRAMERS-MOYAL est arrêté à l'ordre 2 on se place dans l'hypothèse de FLOKKER-PLANCK qui consiste à négliger les termes d'ordres supérieurs. Dans l'équation précédente, deux des termes sont égaux, on simplifie,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \int dr r W_r(x)P(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int dr r^2 W_r(x)P(x, t)$$

$$\boxed{\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (P(x,t)a(x)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (b(x)P(x,t))} \quad (2.26)$$

avec $a(x) \equiv \int dr r W_r(x)$ moyenne des sauts par unité de temps et $b(x) \equiv \int dr r^2 W_r(x)$ second moment des sauts par unité de temps. Cette équation porte le nom de FOKKER (1913)-PLANCK (1917).

Exemple 2. pour la diffusion sur réseau, nous sommes effectivement dans les conditions de petits sauts (voir TD2).

2.6 Références

Les références sur ce chapitre sont nombreuses et les volumineux textes classiques (VAN KAMPEN, "Stochastic Processes in Physics and Chemistry", RISKEN "The Fokker-Planck Equation", Gardiner "Handbook of Stochastic Methods : for Physics, Chemistry and the Natural Sciences") toujours d'actualité. Pour ne pas vous disperser dans cette vaste littérature, en premier lieu, je vous recommande le cours en ligne très accessible de Bahram Houchmandzadeh sur les processus stochastiques qui contient notamment de nombreuses applications à la physique et à la biologie. Il est disponible à l'adresse suivante (voir la partie "processus stochastiques" et celle intitulée "stochastic processes and Master equations" (English lectures) :
<https://www-liphy.ujf-grenoble.fr/pagesperso/bahram/>

Chapitre 3

Mouvement brownien

3.1 Brève introduction historique

Le mouvement brownien a été mis en évidence en 1827 par Robert BROWN, un botaniste écossais, qui en observant pendant 11 mois un grain de pollen dans de l'huile constatait que son mouvement était très erratique. Puis Louis BACHELIER a travaillé sur ce sujet appliqué à la finance pour sa thèse, mais la théorie est principalement développée par des physiciens, comme EINSTEIN et LANGEVIN au début du XXe siècle. Puis les mathématiciens s'y sont intéressés. Le mouvement brownien a alors été formalisé par Nobeert WIENER en 1920. Le calcul stochastique est développé par ITO dans les années 40 avec les intégrales stochastiques. Plus proche de nous, si l'on prend l'enveloppe d'un mouvement brownien dans le plan, MANDELBROT a conjecturé en 1982 que la dimension fractale de cette courbe vaut $4/3$, un résultat récemment démontré par Gregory LAWLER, Oded SCHRAMM et Werner WENDELIN, ce dernier ayant été récompensé par une médaille Fields en 2006. Tout ceci pour dire que ce vaste thème du mouvement brownien est toujours activement étudié. En particulier, dans notre laboratoire nous nous intéressons au mouvement brownien branchant, c'est à dire quand la particule brownienne peut donner naissance à d'autres particules browniennes (dans ce cas on a affaire à des trajectoires ramifiées).

3.2 équation de LANGEVIN

L'idée de LANGEVIN est de représenter l'agitation thermique des molécules d'eau par une force aléatoire $\vec{\nu}(t)$. On a $\langle \vec{\nu}(t) \rangle = \vec{0}$, traduisant ainsi un effet des fluctuations nul en moyenne (absence de direction privilégiée). On insère la force de friction $\vec{F}_f = -m\gamma\vec{u}$ avec un temps caractéristique (macroscopique, l'inverse de γ) très grand devant le temps entre deux collisions. On va idéaliser cette situation en supposant que chaque choc est instantané et que deux chocs successifs sont décorrélés :

$$\langle \nu(t)\nu(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t')$$

en faisant un bilan des forces,

$$m \cdot \frac{d\vec{u}}{dt} = -m\gamma\vec{u} + \vec{\nu}(t).$$

On postule alors l'équation de LANGEVIN (ici à une dimension pour simplifier la notation),

$$\dot{u}(t) = -\gamma u(t) + \frac{1}{m}\nu(t) \tag{3.1}$$

À cause du terme $\nu(t)$, $u(t)$ est un processus stochastique. Historiquement, l'équation de LANGEVIN est la première équation différentielle stochastique.

Nous allons regarder l'évolution de la vitesse de la particule considérée (molécule, grain de pollen, épidémies, ...). La particule a une certaine vitesse initiale u_0 , résolvons l'équation sans second membre,

$$\exists c \in \mathbb{R} / \quad \forall t, u(t) = c \cdot e^{-\gamma t}$$

avec second membre, on utilise la variation de la constante,

$$\begin{aligned} \dot{u}(t) &= \dot{c}e^{-\gamma t} - \gamma c(t)e^{-\gamma t} \\ \dot{c}(t)e^{-\gamma t} - \gamma u(t) &= -\gamma u(t) + \frac{1}{m}\nu(t) \\ \dot{c}(t) &= \frac{1}{m}e^{\gamma t}\nu(t) \end{aligned}$$

ainsi la solution s'écrit

$$c(t) = \frac{1}{m} \int_0^t e^{\gamma t'} \nu(t') dt' + \alpha$$

i.e.

$$u(t) = \left(\frac{1}{m} \int_0^t e^{\gamma(t'-t)} \nu(t') dt' \right) + u_0 e^{-\gamma t}.$$

Chaque $u(t)$ est différent (c'est un processus stochastique). Nous pouvons en prendre la valeur moyenne sur plusieurs réalisations,

$$\begin{aligned} \langle u(t) \rangle &= \left\langle \frac{1}{m} \int_0^t e^{\gamma(t'-t)} \nu(t') dt' \right\rangle + \langle u_0 e^{-\gamma t} \rangle \\ &= \frac{1}{m} \int_0^t e^{\gamma(t'-t)} \langle \nu(t') \rangle dt' + u_0 e^{-\gamma t} \\ &= u_0 e^{-\gamma t} \end{aligned}$$

puisque la moyenne de la force aléatoire est nulle. Ce résultat indique une relaxation exponentielle vers 0 avec un temps de relaxation $\tau = \frac{1}{\gamma}$.

De la même manière, nous pouvons maintenant regarder les fluctuations de la vitesse,

$$\begin{aligned} \sigma_v^2[t] &= \langle (u(t) - \langle u(t) \rangle)^2 \rangle \\ &= \left\langle \left(\int_0^t e^{\gamma(t'-t)} \nu(t') dt' \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{m^2} \left\langle \int_0^t e^{\gamma(t'-t)} \nu(t') dt' \cdot \int_0^t e^{\gamma(t''-t)} \nu(t'') dt'' \right\rangle \\ &= \frac{1}{m^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\gamma(t'-t)} e^{\gamma(t''-t)} \langle \nu(t') \nu(t'') \rangle \\ &= \frac{\Gamma}{m^2} \int_0^t dt' e^{\gamma(t'-t)} e^{\gamma(t'-t)} \\ &= \frac{\Gamma}{m^2} \frac{1}{2\gamma} [e^{2\gamma(t'-t)}]_0^t \\ &= \frac{\Gamma}{2\gamma m^2} (1 - e^{-2\gamma t}). \end{aligned}$$

Finalement,

$$\sigma_v^2[t] = \frac{\Gamma}{2m^2\gamma}(1 - e^{-2\gamma t}).$$

Ainsi, lorsque $t \ll \tau$, il y a diffusion pour les vitesses, et lorsque $t \gg \tau$, on atteint un σ_v^2 limite (saturation).

Passons à l'étude de la position, on prendra $x(0) = x_0$,

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \int_0^t u(t') dt' \\ x(t) &= \int_0^t dt' \left(\frac{1}{m} \int_0^{t'} dt'' \nu(t'') e^{\gamma(t''-t')} + u_0 e^{\gamma t'} \right) + x_0 \\ &= x_0 + \left[-\frac{u_0}{\gamma} \cdot e^{-\gamma t'} \right]_0^t + \frac{1}{m} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{\gamma(t''-t')} \nu(t'') \\ &= x_0 + \frac{u_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{m} \int_0^t dt'' \int_{t''}^t e^{\gamma(t''-t')} \nu(t'') \\ &= x_0 + \frac{u_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{m} \int_0^t dt'' e^{\gamma t''} \nu(t'') \int_{t''}^t dt' e^{-\gamma t'} \\ &= \frac{u_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{m\gamma} \int_0^t dt'' e^{\gamma t''} \nu(t'') (e^{-\gamma t''} - e^{-\gamma t}) \\ &= \frac{u_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{m\gamma} \int_0^t dt'' \nu(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}). \end{aligned}$$

On enchaîne sur la moyenne du processus sur les réalisations, seul $\nu(t)$ est affecté, donc

$$\langle x(t) \rangle = x_0 + \frac{u_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t})$$

à grand temps, *i.e.* $t \gg \tau$, la moyenne tend vers $x_0 + \frac{u_0}{\gamma} = \text{cte}$, si de plus $u_0 = 0$ alors $\langle x(t) \rangle = x_0$ (en moyenne la particule ne bouge pas). En revanche à petit temps, la particule brownienne se déplace linéairement en fonction du temps. Finalement pour la variance on obtient,

$$\begin{aligned} \sigma_x^2(t) &= \left\langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\frac{1}{m\gamma} \int_0^t dt'' \nu(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}) \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{m^2\gamma^2} \int_0^t dt'' \int_0^t dt' (1 - e^{\gamma(t''-t)}) (1 - e^{\gamma(t'-t)}) \langle \nu(t'') \nu(t') \rangle \\ &= \frac{\Gamma}{m^2\gamma^2} \int_0^t (1 - e^{\gamma(t'-t)}) (1 - e^{\gamma(t'-t)}) \\ &= \frac{\Gamma}{m^2\gamma^2} \left(t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right). \end{aligned}$$

Pour plus de pertinence, regardons la variance par rapport à la position de départ,

$$\begin{aligned}
\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &= \langle (x(t) - \langle x(t) \rangle + \langle x(t) \rangle - x_0)^2 \rangle \\
&= \langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 \rangle + \langle (\langle x(t) \rangle - x_0)^2 \rangle + 2\langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)(\langle x(t) \rangle - x_0) \rangle \\
&= \sigma_x^2 + \frac{u_0^2}{\gamma^2} (1 - e^{-\gamma t}) \\
&\simeq \frac{\Gamma}{m^2 \gamma^2} t.
\end{aligned}$$

La particule approche l'équilibre thermodynamique lorsque $t \rightarrow +\infty$:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{2} \langle u(t)^2 \rangle = \frac{\Gamma}{4\gamma m} = \frac{1}{2} k_B T$$

nous en déduisons donc $\Gamma = 2m\gamma k_B T$. Après tous ces calculs, nous cherchons maintenant la distribution des vitesses $P(u, t)$, nous savons déjà que c'est une gaussienne car c'est une somme de bruits blancs gaussiens, or nous avons calculé sa moyenne et sa variance, on a donc immédiatement

$$\begin{aligned}
P(u, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\Gamma}{2m^2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})}} \exp \left(-\frac{u - u_0 e^{-\gamma t}}{\frac{\Gamma}{m^2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})} \right) \\
&= \left(\frac{\pi\Gamma}{m^2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m^2\gamma}{\Gamma} \frac{(u - u_0 e^{-\gamma t})^2}{1 - e^{-2\gamma t}} \right)
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Nous pouvons prendre la limite à grand temps :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} P(u, t) = \left(\frac{\pi\Gamma}{m^2\gamma} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m^2\gamma}{\Gamma} u^2 \right)$$

qui est une distribution maxwellienne si $\frac{m^2}{\Gamma}\gamma = \frac{m}{2k_B T}$. Nous constatons également que P vérifie l'équation de FOKKER-PLANCK :

$$\frac{\partial P}{\partial t}(u, t) = \frac{\partial}{\partial u} (\gamma u P(u, t)) + \frac{\Gamma}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial u^2}(u, t) \tag{3.3}$$

que l'on appelle processus d'ORSTEIN-UHLENBECK lorsque le processus vérifie l'équation précédente.

Nous pouvons également déduire des calculs des moments la distribution des positions (on se place dans les conditions $t \gg \tau$), on a alors,

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{k_B T}{m\gamma} t}} \exp \left(-\frac{m\gamma}{4k_B T t} \left(x - \frac{u_0}{\gamma} \right)^2 \right)$$

qui vérifie l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x, t) = \frac{k_B T}{m\gamma} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x, t)$$

3.3 Mouvement brownien et théorie du potentiel

Dans ce petit chapitre nous allons établir une équivalence entre deux branches des mathématiques (ou de la physique). Cette démarche consistant à mapper un problème probabiliste en un problème d'analyse nous permettra d'obtenir des résultats profonds sur le mouvement brownien bien difficiles à obtenir avec des techniques purement probabilistes.

Par théorie du potentiel, nous entendons ici la branche de la physique qui étudie l'équilibre des forces dans un corps, généralement décrites par un potentiel scalaire ou vecteur (comme en électrostatique).

3.3.1 Les fonctions harmoniques

Une fonction harmonique est une fonction $\phi(\vec{r})$ vérifiant l'équation de LAPLACE $\Delta\phi(\vec{r}) = 0$ dans un certain domaine. Résoudre un problème avec des fonctions harmoniques c'est se donner une fonction harmonique sur un certain domaine $\mathcal{D}$ et des conditions aux limites sur le bord $\partial\mathcal{D}$ de celui-ci :

$$\begin{cases} \Delta\phi(\vec{r}) = 0 & \text{dans le volume } \mathcal{D}, \\ \phi(\vec{r}) = f(\vec{r}) & \text{sur la surface } \partial\mathcal{D} \end{cases}$$

où f est une fonction donnée. Typiquement c'est l'équation vérifiée par la chaleur à l'intérieur d'un corps lorsque des températures sont imposées à sa surface.

Considérons maintenant le potentiel scalaire bien connu $u(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r}$, dont on rappelle quelques propriétés

$$\vec{\nabla}u(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\vec{r}}{r^3} \quad \Delta u(\vec{r}) = -\delta(\vec{r}) \quad \Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\vec{r})$$

Nous pouvons également faire un effort et nous rappeler d'une propriété des fonctions harmoniques, dite de la moyenne, et qui exprime le fait que la valeur de ϕ en un point de l'espace est égale à la moyenne de ses valeurs sur une sphère quelconque entourant le point considéré. Autrement dit, pour une sphère $\mathcal{S}$ de rayon a centrée en 0,

$$\phi(0) = \iint_{\mathcal{S}} \phi(\vec{r}) \frac{dS}{4\pi a^2}.$$

On peut avoir l'intuition de ce résultat en considérant le cas à une dimension. Le Laplacien se réduit alors à une dérivée seconde et une approximation discrétisée de celle-ci fournie,

$$f''(x) \cong \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2}.$$

Par conséquent $f''(x) = 0$ équivaut à $f(x) = [f(x+h) + f(x-h)]/2$: la valeur de f en x est la moyenne des valeurs en deux points voisins.

Pour généraliser ce résultat à trois dimensions on part du théorème de GREEN, valable pour toutes fonctions $\phi(\vec{r})$ et $u(\vec{r})$ sous les hypothèses de régularité qui vont bien, et que nous appliquerons à une fonction harmonique et au potentiel $u(\vec{r})$ en $1/(4\pi r)$ mentionné précédemment.

$$\iiint_{\mathcal{D}} \left(u(r) \underbrace{\Delta\phi(\vec{r}) - \phi(\vec{r})\Delta u(r)}_0 \right) d\vec{r} = \iint_{\mathcal{S}} \left(u(r) \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) - \phi(\vec{r}) \vec{\nabla}u(\vec{r}) \right) d\vec{S} \quad (3.4)$$

Grâce aux propriétés de $u(\vec{r})$ le membre de gauche de Eq. 3.4 se réduit à,

$$- \iiint_{\mathcal{D}} \phi(\vec{r}) \Delta u(r) d\vec{r} = \iiint_{\mathcal{D}} \phi(\vec{r}) \delta(\vec{r}) d\vec{r} = \phi(\vec{0}). \quad (3.5)$$

Par ailleurs, d'une part nous avons,

$$\begin{aligned}
 \langle \phi \rangle_S &= \frac{1}{4\pi a^2} \iint_S \phi(\vec{r}) \, dS \\
 &= \frac{1}{4\pi} \iint_S \phi(\vec{r}) \frac{\vec{r}}{r^3} \cdot \vec{n} \, dS \quad (\text{car } \vec{r} \text{ et } \vec{n} \text{ sont colinéaires}) \\
 &= \iint_S \phi(\vec{r}) \left[\frac{\vec{r}}{4\pi r^3} \right] \cdot d\vec{S} \\
 &= - \iint_S \phi(\vec{r}) \vec{\nabla} u(\vec{r}) \cdot d\vec{S} \quad (\text{propriété de } u(\vec{r}))
 \end{aligned}$$

et d'autre part,

$$\begin{aligned}
 \iint_S u(r) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) \, d\vec{S} &= u(a) \iint_S \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) \, d\vec{S} \quad (\text{car } u(r) = u(a) \text{ est constant sur la surface de la sphère}) \\
 &= u(a) \underbrace{\iiint_{\mathcal{D}} \Delta \phi(\vec{r}) \, d\vec{r}}_0 \quad (\text{formule d'Ostrogradsky}^1), \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

de sorte que le second membre de l'Eq. 3.4 se résume à,

$$\iint_S \left(u(r) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) - \phi(\vec{r}) \vec{\nabla} u(\vec{r}) \right) \, d\vec{S} = \langle \phi \rangle_S. \quad (3.6)$$

En égalant les expressions des membres droit et gauche de l'Eq. 3.4 on obtient le résultat annoncé,

$$\phi(\vec{0}) = \langle \phi \rangle_S, \quad (3.7)$$

la valeur de ϕ est égale à la moyenne de ses valeurs sur une sphère quelconque entourant le point considéré. Ce préambule mathématique étant établi, nous revenons maintenant au mouvement brownien.

3.3.2 Propriétés du mouvement brownien

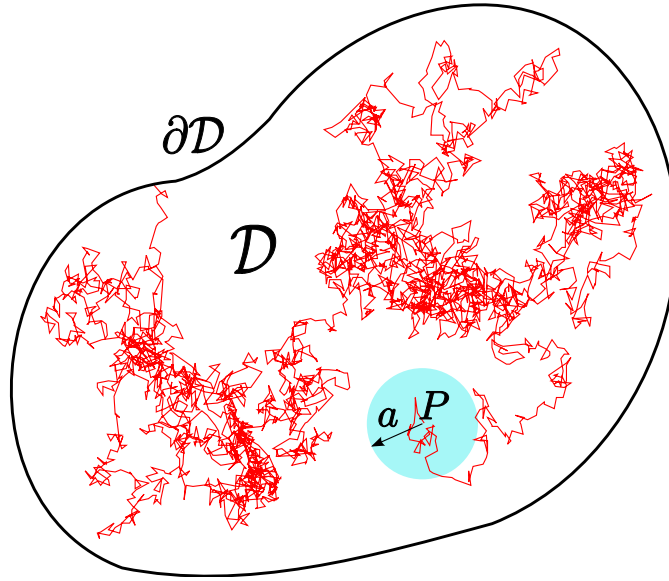
Considérons un corps quelconque, et démarrons un mouvement brownien en un point P à l'intérieur de celui-ci. On arrête ce mouvement brownien lorsqu'il touche la surface du corps pour la première fois (voir figure Fig.(3.1)). On attribue alors à ce processus stochastique la valeur d'une fonction scalaire f au point de la surface où il s'est arrêté. Nous allons montrer que l'espérance (*i.e.* la valeur moyenne, notée $\mathbb{E}[P]$ ici) de ce processus est précisément une fonction harmonique ϕ qui vaut f sur la surface.

Tout d'abord supposons que le processus parte de la surface. Dans ce cas, $\phi(P) = f(P)$ puisque le processus est immédiatement stoppé et le résultat est évident.

Supposons maintenant que le mouvement brownien commence d'un point P à l'intérieur du volume. Lorsqu'il arrive sur la surface en Q et on enregistre $f(Q)$, on réitère l'opération un grand

1. Rappel : la formule d'OSTROGRADSKY :

$$\iint_S \vec{A} \, d\vec{S} = \iiint_V \text{div } \vec{A} \, dV$$

FIGURE 3.1 – Mouvement brownien dans le domaine $\mathcal{D}$

nombre de fois. On souhaite montrer que le potentiel en un point P quelconque est donnée par la moyenne des potentiels tirés au hasard sur la frontière par un mouvement brownien issu de P . Autrement dit,

$$\phi(P) = \mathbb{E}[P]. \quad (3.8)$$

Pour cela, traçons une sphère centrée en P de rayon a , entièrement contenu dans le volume comme indiqué sur la figure Fig.(3.1). Notons $\mathbb{E}[S/P]$ l'espérance des mouvements browniens issus de P qui touchent la sphère la première fois en S . L'isotropie des mouvements browniens permet d'écrire

$$\mathbb{E}[P] = \iint_S \mathbb{E}[S/P] \frac{dS}{4\pi a^2}. \quad (3.9)$$

De plus, nous savons que le mouvement brownien est markovien. Pour un mouvement brownien passant par S cette propriété nous permet d'ignorer son passé issu de P et donc d'affirmer que

$$\mathbb{E}[S/P] = \mathbb{E}[S]. \quad (3.10)$$

En reportant cette expression dans l'Eq.(3.9) on a immédiatement que

$$\mathbb{E}[P] = \iint_S \mathbb{E}[S] \frac{dS}{4\pi a^2}. \quad (3.11)$$

$\mathbb{E}[P]$ vérifie donc la propriété de la moyenne dont la solution est la fonction harmonique du système Eq.(3.3.1). $\mathbb{E}[P]$ peut donc être déterminée par un problème d'analyse vectorielle².

Maintenant découpons la surface totale S en deux domaines S_1 et S_2 avec $S = S_1 + S_2$, et considérons le cas particulier où on attribue au processus la valeur 1 lorsqu'il touche S_1 et 0 lorsqu'il touche S_2 . Dans ce cas, l'espérance du processus pour un point P démarrant dans le volume vaut,

2. Le premier à avoir eu cette idée fut KAKUTANI en 1944.

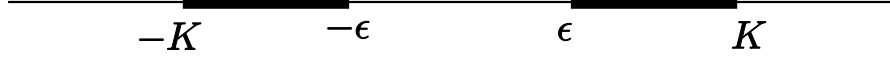


FIGURE 3.2 – Domaine en 1 dimension constitué de 2 segments disjoints.

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[P] &= 1 \times (\text{prob. de toucher } S_1) + 0 \times (\text{prob. de toucher } S_2) \\ &= \text{prob. de toucher } S_1\end{aligned}\tag{3.12}$$

Finalement considérons un mouvement brownien commençant entre deux sphères concentriques de rayons ϵ et K (avec $\epsilon < K$) et attribuons le score 1 si le processus touche la petite sphère et 0 si il touche la grande. On va considérer ce problème en 1, 2 et 3 dimensions respectivement. A chaque fois il s'agira de résoudre,

$$\Delta\phi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad \phi(\epsilon) = 1 \quad \text{et} \quad \phi(K) = 0.\tag{3.13}$$

- Cas 1D, la géométrie est constituée par deux domaines disjoints comme indiqué sur la figure Fig(3.2). Dans le domaine 1, la solution de $d^2u_1(x)/dx^2 = 0$ est $u_1(x) = a_1x + b_1$. Les conditions aux limites $u_1(\epsilon) = 1$ et $u_1(K) = 0$ impliquent

$$u_1(x) = \frac{K - x}{K - \epsilon}.\tag{3.14}$$

De la même manière dans le domaine 2, on a,

$$u_2(x) = \frac{K + x}{K - \epsilon}.\tag{3.15}$$

Étendons maintenant le domaine en faisant tendre K vers l'infini. On a alors,

$$\lim_{K \rightarrow \infty} u_1(x) = \lim_{K \rightarrow \infty} u_2(x) = 1.\tag{3.16}$$

Dans cette configuration, $u_1(x)$ est la probabilité de toucher l'intervalle $[-\epsilon; \epsilon]$ en partant de x . Les limites précédentes indiquent que quelque soit la taille de l'intervalle $[-\epsilon; \epsilon]$ (il peut être aussi petit que l'on veut) et quelque soit le point départ, le mouvement brownien est sûr (avec probabilité 1) de toucher cet intervalle. En d'autres termes le mouvement brownien est certain d'atteindre n'importe quel intervalle de la droite, on dit alors qu'il est récurrent.

- Cas 2D, la géométrie est constituée par un unique domaine compris entre deux cercles concentriques de rayons ϵ et K comme indiqué sur la figure Fig(3.3). La solution vaut,

$$u(r) = \frac{\log K - \log r}{\log K - \log \epsilon},\tag{3.17}$$

et

$$\lim_{K \rightarrow \infty} u(r) = 1,\tag{3.18}$$

donc comme dans le cas à 1 dimension le mouvement brownien bi-dimensionnel est récurrent.

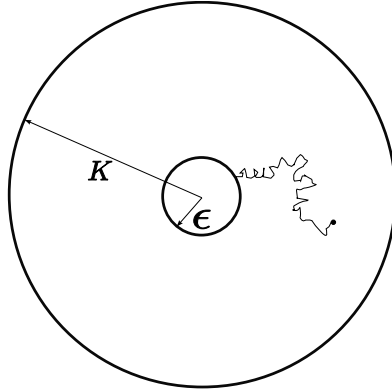


FIGURE 3.3 – Domaine en 2 dimensions.

- Cas 3D, la géométrie est constituée par un unique domaine compris entre deux sphères concentriques de rayons ϵ et K . Le Laplacien en coordonnées sphériques s'écrit,

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial u}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} \quad (3.19)$$

Les deux derniers termes de l'équation précédente sont nuls car on cherche une solution ayant la même symétrie que le problème c'est à dire sphérique. En faisant le changement de variable $u(r) = f(r)/r$ l'équation $\Delta u(r) = 0$ devient $f''(r) = 0$ qui a pour solution $f(r) = a.r + b$ et donc $u(r) = a + \frac{b}{r}$. Les deux constantes d'intégration s'obtiennent grâce aux conditions aux limites $u(\epsilon) = 1$ et $u(K) = 0$. Au final on trouve,

$$u(r) = \frac{\frac{1}{r} - \frac{1}{K}}{\frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{K}}. \quad (3.20)$$

et

$$\lim_{K \rightarrow \infty} u(r) = \frac{\epsilon}{r} < 1. \quad (3.21)$$

Contrairement aux cas en 1 et 2 dimensions, en 3 dimensions le mouvement brownien a une probabilité strictement plus petite que 1 de toucher l'intervalle $[-\epsilon; \epsilon]$. En d'autres termes, il a une probabilité non nulle de partir à l'infini sans toucher l'intervalle, dans ce cas on dit que mouvement brownien est transcient.

Plutôt que d'utiliser des termes mathématiques (transcience, récurrence), les physiciens résumant souvent ce résultat en disant que dans le plan, tous les chemins mènent à Rome ! Sur cet exemple, on constate donc que des propriétés du mouvement brownien sont liées à la dimensionnalité de l'espace. Pour le mouvement brownien branchant (avec ramification des trajectoires) on observe des phénomènes similaires : en 1 et 2 dimensions les particules clusterisent (se regroupent en amas) tandis qu'en 3 dimensions le phénomène disparaît. La compréhension du clustering des particules (pas forcément browniennes) est un sujet d'actualité dans notre laboratoire.

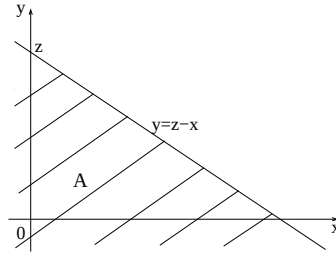


FIGURE 3.4 – Domaine d'intégration A.

3.4 Annexe : somme de variables aléatoires indépendantes

Dans ce chapitre nous avons besoin de sommer des variables aléatoires indépendantes (de même loi), il est donc naturel de répondre à la question : Si nous nous donnons deux variables aléatoires indépendantes X et Y , quelle est la loi de $Z = X + Y$?

On note $f(x)$ la densité de probabilité de la loi X , $g(y)$ celle de la loi Y et $F(x)$ et $G(y)$ leurs fonctions de répartition respectives. Avec ces notations ,

$$P[X \leq x] = F(x) = \int_{-\infty}^x f(u) du$$

$$P[Y \leq y] = G(y) = \int_{-\infty}^y g(u) du$$

On note $h(z)$ la densité de probabilité de la loi $Z = X + Y$. Pour z fixé, soit A l'ensemble des points du plan tel que $x + y \leq z$ i.e. $A = \{(x, y) : x + y \leq z\}$ comme indiqué sur la figure Fig. 3.4. Alors,

$$\begin{aligned} P[X + Y \leq z] &= \iint_A f(x)g(y) dx dy \quad (\text{car } X \text{ et } Y \text{ sont indépendantes}) \\ &= \iint_{x+y \leq z} f(x)g(y) dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \int_{-\infty}^{z-x} dy g(y). \end{aligned}$$

Il suffit maintenant de dériver cette expression pour obtenir la densité de probabilité. Avec la règle de dérivation de Leibnitz³, on obtient

$$h(z) = \frac{dP[X + Y \leq z]}{dz} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \cdot g(z - x).$$

La loi de probabilité de la somme de deux variables aléatoires indépendantes est finalement donnée par la convolution des densités de probabilités.

Nous pouvons regarder un cas particulier très utile, lorsque les deux variables aléatoires suivent

3. Règle de dérivation de Leibnitz. Pour $F(z) = \int_{a(z)}^{b(z)} dx f(x, z)$, nous avons

$$\frac{dF(z)}{dz} = -a'(z)f(a(z), z) + b'(z)f(b(z), z) + \int_{a(z)}^{b(z)} dx \frac{\partial f(x, z)}{\partial z}.$$

une même loi gaussienne de moyenne m et de variance σ (la généralisation à plusieurs gaussiennes est immédiat). En appliquant la formule précédente, pour f et g données par

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \frac{(x-m)^2}{\sigma^2}}$$

$$g(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \frac{(y-m)^2}{\sigma^2}},$$

on trouve

$$\begin{aligned} h(z) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-m)^2}{\sigma^2}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z-x-m)^2}{\sigma^2}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} ((x-m)^2 + (z-x-m)^2)\right] \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \left(2\left(x-\frac{z}{2}\right) + \frac{(z-2m)^2}{2}\right)\right] \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{1}{4\sigma^2}(z-2m)^2} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{\sigma^2}\left(x-\frac{z}{2}\right)}}_{=\sigma\sqrt{\pi}} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \frac{(z-2m)^2}{2\sigma^2}}. \end{aligned}$$

Nous obtenons donc une autre gaussienne (de moyenne $2m$ et de variance $\sqrt{2}\sigma$). C'est ce qu'il faut retenir de cet annexe mathématiques : la somme de gaussiennes est encore une gaussienne.

3.5 Références

Là encore la littérature est vaste tant le sujet a pris de l'ampleur ces cent dernières années. Pour ne pas vous perdre je vous suggère de regarder l'article de Bertrand DUPLANTIER intitulé, "le mouvement brownien, "divers et ondoyant"" qui retrace son histoire et offre un panorama des recherches actuelles. Il est disponible sur la page suivante :

<http://www.bourbaphy.fr/avril2005.html>

Chapitre 4

Diffusion des neutrons

4.1 Introduction

La neutronique est l'étude du comportement des neutrons dans les milieux nucléaires. Compte tenu de la complexité des sections efficaces et de la géométrie des systèmes nucléaires, une description exacte du comportement des neutrons est hors d'atteinte. Cependant si la vie d'un neutron est complexe (il subit des collisions de diverses natures avec les noyaux) il finit par ralentir et subir uniquement des collisions élastiques, dans ce cas il diffuse. En fait, une grande partie de son existence se limite à de la diffusion, c'est pourquoi dans un premier temps nous abordons cet aspect.

Nous allons faire une approche probabiliste de la diffusion des neutrons avec des idées minimalistes. Deux approches sont possibles pour établir l'équation de la diffusion des neutrons, soit nous écrivons l'équation de BOLTZMANN puis nous appliquons des opérateurs vectoriels et tensoriels, méthode très propre qui sera vue en M2 (Master of Nuclear Energy), ou l'approche historique, développée dans la plupart des livres et que nous présentons ci-après.

Tout d'abord, remarquons que le nombre de neutrons circulant dans un système nucléaire est de l'ordre de $10^{12} - 10^{15}$. Si ce nombre semble élevé il reste faible au regard du nombre noyaux sur lesquels ces neutrons peuvent entrer en collision et qui est à minima de l'ordre du nombre d'Avogadro. C'est pourquoi dans toute la suite du cours on négligera l'interaction neutron-neutron et légitimement on ne considérera que les seules interactions des neutrons avec les noyaux. Entre deux collisions avec un noyau les neutrons se déplacent en ligne droite, et nous allons maintenant préciser la loi entre deux sauts.

Notons $dP(x)$ la probabilité pour que le neutron interagisse avec le milieu lorsqu'il parcourt une longueur dx . L'hypothèse la plus simple que nous puissions faire, également la plus intuitive est de dire que $dP \sim dx$, ainsi si le neutron parcourt $2dx$ il aura deux fois plus de chance d'interagir avec la matière. $dP = \Sigma dx$, ou le coefficient de proportionnalité est appelé la section efficace macroscopique. Pour simplifier (mais sans perte de généralité), Σ est considérée indépendante de x . Cherchons l'instant où le neutron a sa première interaction avec la matière $p(x)dx$, dans l'intervalle $[x, x+dx]$. Notons $Q(x)$ la probabilité de l'absence de collision jusqu'en x . Ainsi, nous pouvons écrire

$$p(x)dx \doteq Q(x) \times \Sigma dx.$$

L'équation précédente exprime le fait que la probabilité d'interagir dans l'intervalle $[x, x+dx]$ est le produit de deux événements disjoints. Tout d'abord le neutron doit arriver en x sans subir de

collision, cet événement se produit avec la probabilité $Q(x)$ et ensuite le neutron doit avoir une interaction avec le milieu sur le trajet dx , événement survenant avec la probabilité Σdx . On a immédiatement, ainsi

$$p(x) = \Sigma Q(x)$$

et il reste à établir l'expression de $Q(x)$. Pour cela, étudions la probabilité de non-interaction jusqu'en $x + dx$. Là encore cet événement est le produit de deux événements disjoints : tout d'abord le neutron ne doit pas interagir jusqu'en x (événement ayant la probabilité $Q(x)$ de se réaliser) et ensuite il ne doit pas interagir sur dx (événement qui survient avec la probabilité élémentaire $1 - \Sigma dx$) comme schématisé sur la figure Fig.(4.1). Par conséquent,

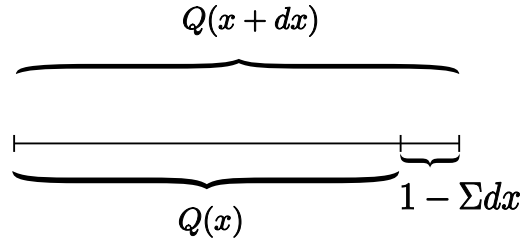


FIGURE 4.1 – Probabilité de non-interaction sur une distance $x + dx$.

$$\begin{aligned} Q(x + dx) &= Q(x) \times (1 - \Sigma dx) \\ Q(x) + Q'(x) dx &= Q(x) - \Sigma Q(x) dx \\ Q'(x) &= -\Sigma Q(x) \end{aligned}$$

donc

$$\exists A \in \mathbb{R} / \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad Q(x) = A \exp(-\Sigma x)$$

or $Q(0) = 1$, ainsi

$$Q(x) = \exp(-\Sigma x) \quad \text{et} \quad p(x) = \Sigma \exp(-\Sigma x).$$

La longueur de libre parcours moyen, notée λ est donc donnée par :

$$\begin{aligned} \lambda = \langle x \rangle &= \int_0^\infty x p(x) dx \\ &= \int_0^\infty x \Sigma e^{-\Sigma x} dx \\ &= \frac{1}{\Sigma} \end{aligned}$$

Si nous considérons un champ de noyaux de section efficace σ , pour que le neutron interagisse avec un noyau, il faut que la distance entre le centre du neutron et le centre du noyau soit plus petite que la section efficace (dans la direction de la vitesse du neutron). La probabilité qu'a le neutron d'interagir avec la matière est simplement $dP = N\sigma dx$ avec N le nombre de noyaux par unité de volume, et nous avons $\Sigma = N\sigma = N_A\sigma_A + \dots + N_B\sigma_B$.

Question ordre de grandeur $\sigma \sim 10^{-24} \text{cm}^2 = \text{barns}$. Dans un cas plus général,

$$\Sigma_{total} = \Sigma_{absorption} + \Sigma_{scattering} + \Sigma_{fission}.$$

Dans un premier temps nous nous limiterons aux milieux diffusifs (en ne considérant pas la fission) de sorte que, $\Sigma_{total} = \Sigma_{absorption} + \Sigma_{scattering}$. Si l'on considère une collision, le neutron a alors deux événements possibles disjoints, soit il diffuse, soit il est absorbé. En terme probabiliste, la probabilité d'être absorbée est $p_a = \frac{\Sigma_a}{\Sigma}$ et la probabilité d'être diffusée est $p_s = \frac{\Sigma_s}{\Sigma}$.

4.2 Les grandeurs de la neutronique

Afin d'établir l'équation de la diffusion pour les neutrons, nous partirons de l'équation bilan, équation qui régit l'évolution de la densité de neutrons $n(\vec{r}, t)$ dans le temps,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{absorption} + \text{sources} - \text{fuites}. \quad (4.1)$$

Nous allons introduire une densité directionnelle de neutrons $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, v, t)$ avec $\vec{\Omega} = \vec{v}/v$ qui est le nombre de neutrons en $\vec{r}$, à la vitesse v dans la direction $\vec{\Omega}$. La quantité $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, v, t) d\vec{r} dv d\vec{\Omega}$ représente donc le nombre de neutrons dans l'élément de volume $d\vec{r}$, avec une vitesse entre v et $v + dv$ dans une direction entre $\vec{\Omega}$ et $\vec{\Omega} + d\vec{\Omega}$. Nous introduisons une grandeur scalaire propre à la neutronique : le flux en phase :

$$\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) = n(\vec{r}, v, \vec{\Omega})v,$$

ainsi que le flux intégré :

$$\Phi(\vec{r}, v) = \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}.$$

L'interprétation physique du flux peut se faire avec le raisonnement suivant : pour n indépendant de $\vec{\Omega}$ (cela ne change rien au cas plus général), pendant dt chaque neutron parcourt $dx = v dt$, on peut écrire $\Sigma dx = \Sigma v dt$, qui est la probabilité d'interagir avec le milieu (ici les noyaux de la matière composant le milieu). En multipliant cette expression par $n(\vec{r}) d\vec{r}$, $\Sigma v n(\vec{r}) d\vec{r} dt$ est donc le nombre d'interactions neutron-matière dans $d\vec{r}$ et pendant dt . La quantité $\Sigma v n(\vec{r})$ est appelé le *taux de réaction*. C'est ainsi que l'on peut interpréter le flux neutronique, en multipliant Φ par une section efficace on obtient un taux de réaction $\Sigma \Phi$. Du flux neutronique dérive toutes les quantités d'intérêt en neutronique.

Reste à établir l'équation de la diffusion. Mais désormais, on sait qu'à partir flux neutronique, le terme d'absorption sera facile à obtenir (c'est juste le produit de la section efficace d'absorption par le flux : $\Sigma_a \Phi$). Le terme de source est également facile puisque c'est une donnée du problème. Reste les fuites. Pour cela, il faut introduire la notion de courant $\vec{j}$, *i.e.* le nombre de neutrons traversant une surface unité par unité de temps.

On considère une surface élémentaire dS , les neutrons dans la direction $\vec{\Omega}$ traversant cette surface pendant dt sont contenus le cylindre élémentaire de la figure Fig.(4.2). Son volume élémentaire est donnée par $dV = v dt \vec{\Omega} d\vec{S}$, et le nombre de neutrons traversant dS pendant dt est $\vec{j} d\vec{S} dt$, nous avons donc

$$\begin{aligned} n(\vec{\Omega}) dV &= n(\vec{\Omega}) v \vec{\Omega} d\vec{S} dt \\ &= \underbrace{\phi(\vec{\Omega}) \vec{\Omega}}_{\vec{j}(\vec{\Omega})} d\vec{S} dt \end{aligned}$$

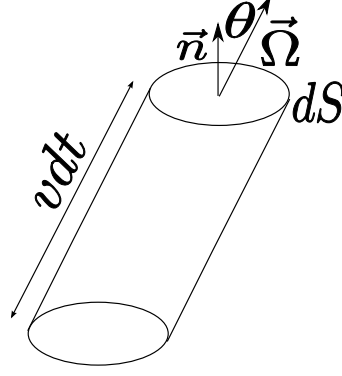


FIGURE 4.2 – cylindre élémentaire

Enfin, nous définissons le courant intégré sur la phase traversant dans le sens de la normale sortante par

$$J_+ = \iint_{\substack{0 \leq \phi \leq 2\pi \\ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}}} \vec{j} \cdot \vec{n} d^2\Omega \quad (4.2)$$

et dans l'autre sens

$$J_- = - \iint_{\substack{0 \leq \phi \leq 2\pi \\ \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi}} \vec{j} \cdot \vec{n} d^2\Omega \quad (4.3)$$

si $\phi(\vec{r}) = \phi = \text{cte}$ alors avec $d^2\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$, on a

$$\begin{aligned} J_+ &= \phi \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta \\ &= 2\phi\pi \left[\frac{1}{2} \sin^2 \theta \right]_0^{\pi/2} \\ &= \pi\phi \end{aligned}$$

idem pour $J_- = \pi\phi$. Pour le flux intégré on obtient immédiatement,

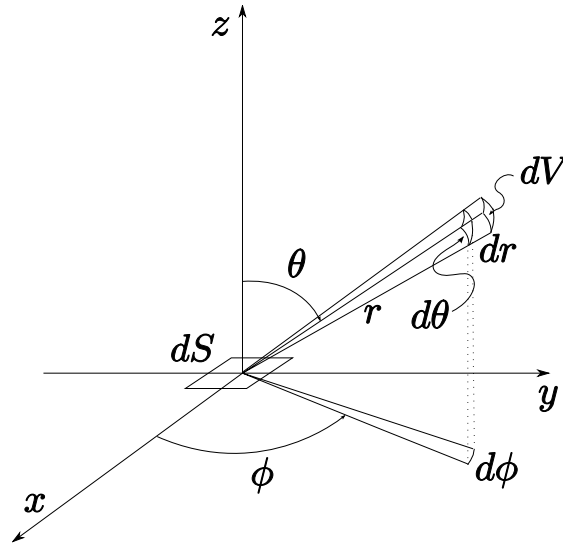
$$\Phi = \int_{4\pi} \phi d^2\Omega = 4\pi\phi$$

et donc

$$J_+ = J_- = \frac{\Phi}{4}.$$

pour un flux constant.

Reprenons le cas général où le flux varie, le nombre de collisions par seconde dans dV est donné par $\Sigma_s \Phi dV$. On fait l'hypothèse d'un choc est isotrope, dans ce cas la probabilité de partir dans une direction est la même pour toutes les directions. Nous cherchons la probabilité que le neutron passe par une petite surface dS comme indiqué sur la figure Fig.(4.3). Si celle-ci se trouvait sur une sphère de rayon r centrée sur le lieu de collision, la probabilité de passage serait $\frac{dS}{4\pi r^2}$. Dans notre cas, la surface dS est inclinée d'un angle θ par rapport à la direction de propagation du neutron, par conséquent la probabilité devient $\frac{dS}{4\pi r^2} \cos \theta$. Maintenant que le neutron se trouve dans la bonne direction, il faut encore qu'il arrive jusqu'à la surface dS ,

FIGURE 4.3 – Courant passant par dS .

autrement dit il ne faut pas que la particule soit diffusée ou absorbée pendant le trajet r . Cet événement survient avec la probabilité de non-interaction $e^{-\Sigma_t r}$. Le nombre de neutrons diffusés dans dV atteignant dS par seconde est finalement donné par

$$\Sigma_s \Phi dV \frac{dS \cos \theta}{4\pi r^2} e^{-\Sigma_t r}$$

pour simplifier, nous considérons un milieu faiblement absorbant, donc $\Sigma_t \cong \Sigma_s$. en utilisant l'élément de volume en coordonnées sphériques, $d^3V = r^2 \sin \theta d\theta d\phi$, nous obtenons

$$J_- = \int_0^{+\infty} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi/2} \frac{\Sigma_s \Phi}{4\pi} \sin \theta \cos \theta e^{-\Sigma_s r} dr d\theta d\varphi$$

nous faisons la supposition que le flux varie peu,

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z) &= \Phi_0 + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_0 x + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_0 y + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_0 z \\ &= \Phi_0 + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_0 r \cos \theta + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_0 r \sin \theta \cos \varphi + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_0 r \sin \theta \sin \varphi \end{aligned}$$

à cause des termes en $\cos \varphi$ et $\sin \varphi$, l'intégration suivant φ annule les deux derniers termes de l'expression précédente. En remplaçant les deux termes restant dans l'expression de J_- , on obtient

$$\begin{aligned} J_- &= \frac{\Sigma_s}{2} \int_0^{+\infty} \int_0^{\pi/2} \left(\Phi_0 + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_0 r \cos \theta \right) \cos \theta \sin \theta e^{-\Sigma_s r} dr d\theta \\ &= \frac{\Sigma_s}{2} \left(\Phi_0 \int_0^{+\infty} e^{-\Sigma_s r} \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta d\theta + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_0 \int_0^{+\infty} dr r e^{-\Sigma_s r} \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos^2 \theta d\theta \right) \\ &= \frac{\Phi_0}{4} + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_0 \frac{1}{6\Sigma_s}. \end{aligned}$$

Un calcul similaire conduit à

$$J_+ = \frac{\Phi_0}{4} - \frac{1}{6\Sigma_s} \frac{\partial\Phi}{\partial z} \Big|_0$$

d'où $J_z = J_+ - J_- = -\frac{1}{3\Sigma_s} \frac{\partial\Phi}{\partial z}$. En résumé, $J_z = -D \frac{\partial\Phi}{\partial z}$, avec $D = \frac{1}{3\Sigma}$. En regroupant les mêmes calculs sur les deux autres directions, nous obtenons la loi de FICK

$$\boxed{\vec{J} = -D \vec{\nabla} \Phi.} \quad (4.4)$$

Remarque. pour un flux constant on retrouve le résultat précédent, à savoir $J_+ = J_- = \frac{\Phi}{4}$.

Nous pouvons maintenant passer au calcul des fuites, le but de tous ces développements. Commençons par regarder ce qui sort le long de l'axe z (cf figure Fig.(4.4)).

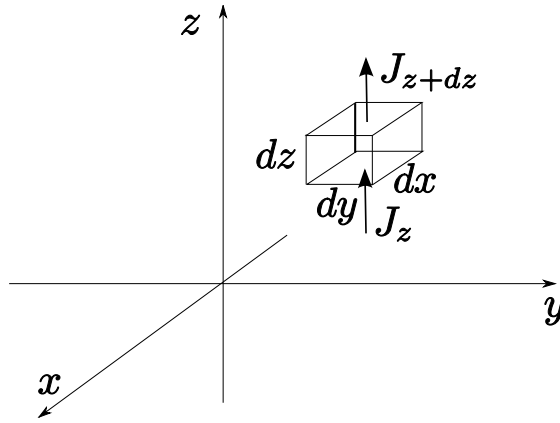


FIGURE 4.4 – Fuites selon l'axe z .

$$\begin{aligned} & J(z + dz) dS - J(z) dS \\ &= (J(z + dz) - J(z)) dx dy \\ &= \frac{\partial J_z}{\partial z} dx dy dz \\ &= -D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \end{aligned}$$

or $\Phi = nv$ et d'après (3.1), nous obtenons finalement

$$\boxed{\frac{1}{v} \frac{\partial\Phi}{\partial t} = S - \Sigma_a \Phi + D \Delta \Phi} \quad (4.5)$$

qui est l'équation de la diffusion. Cette équation est valide dans le cadre des hypothèses suivantes :

- isotropie de la diffusion,
- v est une constante, *i.e.* les neutrons sont mono-énergétiques,
- $\Sigma_a \ll \Sigma_s$, *i.e.* le flux varie peu.

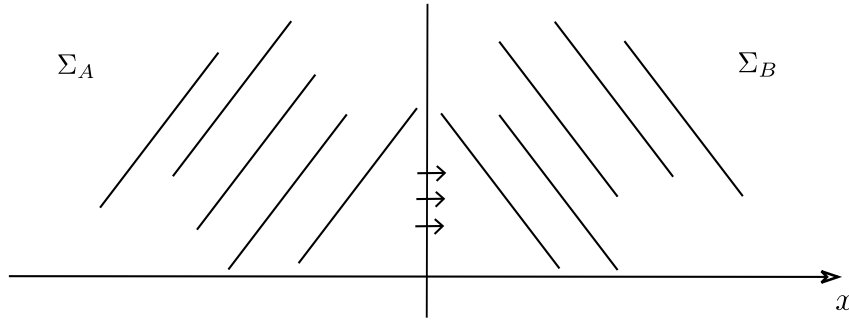


FIGURE 4.5 – Interface entre deux milieux diffusifs.

4.3 Interface entre deux milieux diffusifs

A la limite de deux milieux diffusifs, nous avons continuité du courant des neutrons dans la direction x , nous pouvons poser cela mathématiquement, $J_{+,A} = J_{+,B}$, $J_{-,A} = J_{-,B}$. Des expressions des courants suivant x ,

$$J_+ = \frac{\Phi}{4} - \frac{D}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

$$J_- = \frac{\Phi}{4} + \frac{D}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

nous avons donc,

$$\begin{cases} \frac{\Phi_A}{4} - \frac{D_A}{2} \frac{\partial \Phi_A}{\partial x} = \frac{\Phi_B}{4} - \frac{D_B}{2} \frac{\partial \Phi_B}{\partial x} \\ \frac{\Phi_A}{4} + \frac{D_A}{2} \frac{\partial \Phi_A}{\partial x} = \frac{\Phi_B}{4} + \frac{D_B}{2} \frac{\partial \Phi_B}{\partial x} \end{cases}$$

En additionnant et en soustrayant les deux équations précédentes on obtient la continuité du flux à la surface $\Phi_A = \Phi_B$ ainsi que la continuité du courant $D_A \frac{\partial \Phi_A}{\partial x} = D_B \frac{\partial \Phi_B}{\partial x}$.

4.4 Interface entre un milieu diffusif et le vide

Afin d'obtenir une condition aux limites entre un milieu diffusif et le vide (qui n'est pas un milieu diffusif!) on observe qu'à une telle interface le courant entrant J_- est nul. A l'interface

$$J_- = 0 \Rightarrow \frac{\phi_0}{4} + \frac{D}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$$

et la dérivée du flux $\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\phi_0}{2D} < 0$. L'idée consiste à prolonger linéairement le flux dans le vide, auquel cas il s'annulerait à une distance (dite d'extrapolation) $d = 2D = \frac{2}{3\Sigma} = \frac{2}{3}\lambda$ comme indiqué sur la figure Fig.(4.6). Dans la pratique la distance d (de l'ordre du centimètre) est très petite devant les dimensions du réacteur, de sorte que l'on peut simplifier le problème en imposant la condition aux limites,

$$\phi(\text{interface}) = 0.$$

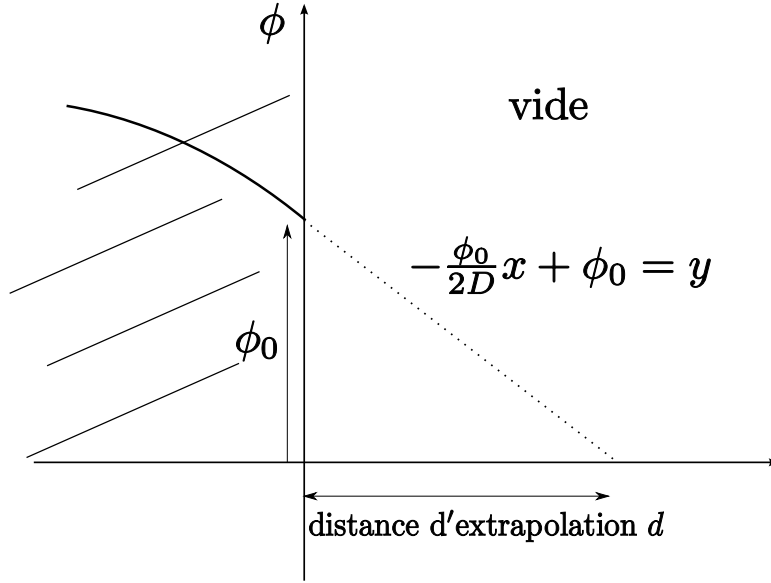


FIGURE 4.6 – distance d'extrapolation à la frontière entre un milieu diffusif et le vide

Dans la pratique cette condition aux limites permet de trouver une solution analytique au flux dans certaines géométries simples (comme nous le verrons pendant les séances de travaux pratiques).

4.5 Exemples importants

A l'équilibre l'équation de la diffusion devient

$$\boxed{D\Delta\Phi - \Sigma_a\Phi + S = 0} \quad (4.6)$$

Si de plus on se place hors des sources

$$D\Delta\Phi - \Sigma_a\Phi = 0 \quad (4.7)$$

que l'on réécrit généralement sous la forme

$$\boxed{\Delta\Phi - k^2\Phi = 0 \text{ avec } k^2 \equiv \frac{\Sigma_a}{D}} \quad (4.8)$$

Réolvons cette équation dans des cas simples :

- Source ponctuelle émettant S neutrons par unité de temps dans un milieu infini.
Au vu de la symétrie sphérique, nous prenons évidemment les coordonnées sphériques, ainsi par un simple regard à la situation :

$$\phi(r, \theta, \phi) = \phi(r),$$

nous faisant évidemment l'hypothèse d'un flux fini sauf peut-être sur la source. Dans ce système de coordonnées, hors de la source nous avons

$$\Delta\phi(r) - k^2\phi(r) = 0,$$

en se rappelant l'expression de la partie radiale du Laplacien en coordonnées sphériques, l'équation de la diffusion devient

$$\frac{d^2\phi}{dr^2}(r) + \frac{2}{r} \frac{d\phi}{dr}(r) - k^2\phi(r) = 0.$$

Lorsque l'on tombe sur ce genre d'équation, on pose $\phi(r) = \frac{f(r)}{r}$, après un calcul élémentaire, on obtient rapidement,

$$f''(r) - k^2 f(r) = 0$$

donc

$$\exists A, B \in \mathbb{R} / \quad \forall r > 0, \quad f(r) = Ae^{-kr} + Be^{kr},$$

et quelques

$$\phi(r) = \frac{A}{r}e^{-kr} + \frac{B}{r}e^{kr}.$$

Or le flux à l'infini doit être fini, ce qui impose $B = 0$, et

$$\phi(r) = \frac{A}{r}e^{-kr}.$$

Pour déterminer la constante d'intégration A , calculons le flux au travers d'une sphère centrée sur la source. Tout d'abord, le courant vaut

$$\begin{aligned} \vec{j}(r) &= -D\vec{\nabla}\phi(r) = -D\frac{d\phi}{dr}(r)\vec{u}_r \\ &= -DA\left(-k\frac{e^{-kr}}{r} - \frac{1}{r^2}e^{-kr}\right)\vec{u}_r \\ &= \frac{DA}{r^2}(1+kr)e^{-kr}\vec{u}_r \end{aligned}$$

Le flux de neutrons au travers d'une sphère $\mathcal{S}$ de rayon r centrée sur la source est donné par

$$\iint_{\mathcal{S}} \vec{j}(r) \cdot d\vec{S} = 4\pi r^2 j(r) \quad (4.9)$$

puisque le courant est constant sur la surface de $\mathcal{S}$.

Prenons la limite lorsque $r \rightarrow 0$, dans ce cas le neutron n'a pas le temps d'être absorbé par le milieu et nous sommes assuré qu'il passe par $\mathcal{S}$. D'où

$$\lim_{r \rightarrow 0} 4\pi r^2 j(r) = S \quad \text{conditions aux limites}$$

donc finalement

$$\phi(r) = \frac{S}{4\pi D} \frac{e^{-kr}}{r}.$$

- Source plane infinie émettant S neutrons par unité surface et de temps dans un milieu infini.

En coordonnées cartésiennes, par symétrie, $\phi(x, y, z) = \phi(x)$ et $\phi(-x) = \phi(x)$. On résoudra l'équation de la diffusion pour $x > 0$, dans ce système de coordonnées l'équation de la diffusion devient

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - k^2\phi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}.$$

Or le flux à l'infini doit être fini, ce qui impose $B = 0$, et

$$\phi(r) = \phi(x) = Ae^{-kx}.$$

Pour utiliser la condition sur le courant, nous prenons un petit cylindre (de surface notée S) d'axe perpendiculaire au plan des sources et à cheval sur celui-ci. On a alors

$$\lim_{x \rightarrow 0} S \times 2 \times j(x) = SS.$$

Comme

$$\begin{aligned} \vec{j}(x) &= -D \frac{d\phi}{dx} \vec{u}_x \\ j(x) &= D A k e^{-kx} \end{aligned} \tag{4.10}$$

et

$$\lim_{x \rightarrow 0} j(x) = D A k = \frac{S}{2}.$$

Par conséquent,

$$A = \frac{S}{2Dk}$$

et au final

$$\forall x \geq 0 \quad \phi(x) = \frac{S}{2Dk} e^{-kx}.$$

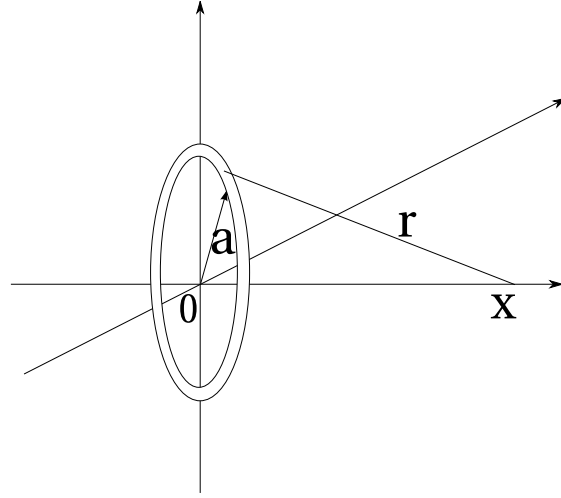
Une autre manière d'effectuer ce calcul consiste à considérer que le plan source est composé d'une infinité de sources ponctuelles accolées. Toutes les sources ponctuelles situées à une même distance r du point d'intérêt (ces sources se situent sur une petite couronne sphérique de rayon a comme indiqué sur la figure Fig. 4.7) contribuent de manière égale au flux en x , donc

$$\phi(x) = \int_0^{+\infty} 2\pi a da \times S \underbrace{\frac{e^{-kr}}{4\pi D r}}_{\text{flux source ponctuelle}}$$

En remarquant que $r^2 = a^2 + x^2$, et donc que $2r dr = 2a da$, on obtient,

$$\begin{aligned} \phi(x) &= S \int_x^{+\infty} 2\pi r dr \times \frac{e^{-kr}}{4\pi D r} \\ &= S \int_x^{+\infty} dr \frac{e^{-kr}}{2D} \\ &= \frac{S}{2D} \left[-\frac{1}{k} e^{-kr} \right]_x^{+\infty} \\ &= \frac{S}{2Dk} e^{-kx}, \end{aligned}$$

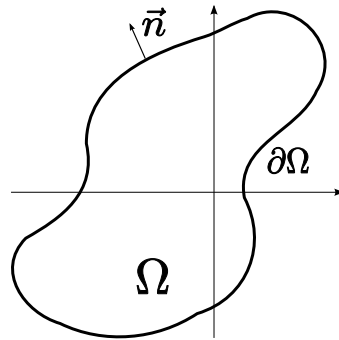
et on retrouve bien le résultat précédent.

FIGURE 4.7 – Intégration des sources dans le plan $(0,y,z)$.

4.6 Complément au TD sur la diffusion dans les domaines bornés

Le dernier exercice du TD n°5 concerne une sphère constituée d'un matériau diffusif homogène à l'intérieur de laquelle règne une source uniforme S de neutrons. Lorsque la paroi de la sphère est parfaitement réfléchissante, nous avons alors montré, par des techniques habituelles, que le flux est constant dans tout le volume. Dans ce complément, sous les mêmes hypothèses, on étend ce résultat à un domaine quelconque (au passage, notez qu'aucune hypothèse de convexité n'est requise).

Soit Ω un domaine borné (non nécessairement convexe comme celui de la figure Fig.(4.8)), on note $\partial\Omega$ sa surface et $\vec{n}$ la normale en un point de celle-ci, comme indiqué sur la figure suivante. Avoir une paroi parfaitement réfléchissante revient à imposer que le produit scalaire du courant

FIGURE 4.8 – Domiane borné Ω quelconque.

par la normale est nul sur la surface, autrement dit que $\vec{j} \cdot \vec{n} = 0$ ou comme $\vec{j} = -D\vec{\nabla}\phi$ que

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla}\phi = 0 \quad \text{sur la surface.}$$

Formellement, on doit donc résoudre ¹

$$\begin{cases} \Delta\phi - k^2\phi = -\frac{S}{D} & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial\phi}{\partial\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{\nabla}\phi = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

La solution est donnée par la solution $\tilde{\phi}$ de l'équation homogène associée plus une solution particulière qui ici vaut $\phi_{part} = \frac{S}{Dk^2} = \frac{\Sigma_a}{D}$ (constante). Il reste donc à montrer que la solution de l'équation homogène associée $\tilde{\phi}$

$$\begin{cases} \Delta\tilde{\phi} - k^2\tilde{\phi} = 0 & \text{dans } \Omega \\ \vec{n} \cdot \vec{\nabla}\tilde{\phi} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

est nulle.

Tout d'abord remarquons que

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega} \Delta\tilde{\phi} dV &= \iiint_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla}\tilde{\phi}) dV = \iint_{\partial\Omega} \vec{\nabla}\tilde{\phi} \cdot d\vec{S} \quad (\text{formule d'OSTROGRADSKY}) \\ &= \iint_{\partial\Omega} \underbrace{\vec{\nabla}\tilde{\phi} \cdot \vec{n}}_{=0} dS \\ &= 0. \end{aligned}$$

D'autre part, en intégrant l'équation homogène sur tout le volume on obtient

$$0 = \iiint_{\Omega} [\Delta\tilde{\phi} - k^2\tilde{\phi}] dV = \underbrace{\iiint_{\Omega} \Delta\tilde{\phi} dV}_{=0} - k^2 \iiint_{\Omega} \tilde{\phi} dV$$

et donc

$$\iiint_{\Omega} \tilde{\phi} dV = 0$$

Or, $\tilde{\phi}$ (qui est proportionnelle à la densité de neutrons) est une fonction positive ou nulle, par conséquent l'intégrale précédente implique que $\tilde{\phi} = 0$ partout dans Ω . La solution du problème se réduit donc à la seule solution particulière (une constante), plus précisément,

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi_{part} = \frac{\Sigma_a}{D}.$$

4.7 Références

Cette approche de la diffusion des neutrons se trouvent dans les chapitres des textes classiques tels que, WEINBERG & WIGNER "the physical theory of neutron chain reactors", GLASSTONE & EDLUND "the elements of nuclear reactor theory" ou encore CASE, HOFFMAN & PLACZEK "introduction to the theory of neutron diffusion". En français on pourra consulter par exemple le chapitre 5 du livre de REUSS "Précis de neutronique" EDP Sciences (collection Génie Atomique).

1. C'est une équation aux dérivées partielles elliptique et lorsque les conditions aux limites portent sur la dérivée normale à la surface on parle de conditions de NEUMANN.

Chapitre 5

Équation du transport

5.1 Introduction

L'équation du transport également appelée équation de BOLTZMANN (1910) est plus générale que l'équation de diffusion puisqu'elle s'affranchit des hypothèses d'isotropie ou de flux lentement variable. Pour alléger les notations nous supposons toujours que la vitesse des neutrons est constante (les neutrons ne ralentissent pas). De plus, nous négligeons toujours les interactions neutron-neutron ce qui nous conduira à une équation linéaire.

5.2 Équation de BOLTZMANN

Effectuons un bilan de conservation des neutrons. Soit dN la variation du nombre de neutrons dans V pendant dt , d'une part nous avons

$$dN = \left(\int \frac{\partial n(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} d^3V \right) \times dt$$

et d'autre part

$$dN = -\text{fuites} - \text{nb de neutrons subissant une collision} + \text{arrivée par transfert} + \text{sources}$$

Il s'agit maintenant d'obtenir les différents termes de l'équation précédente. Pour les fuites

$$\begin{aligned} \left(\oint_S \vec{j}(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) d\vec{S} \right) \times dt &= \left(\oint_S \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \vec{\Omega} \cdot d\vec{S} \right) \times dt \\ &= \left(\iiint_V \vec{\nabla}(\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \vec{\Omega}) dV \right) \times dt \quad (\text{formule d'OSTROGRADSKY}) \\ &= \left(\iiint_V \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) dV \right) \times dt \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $\vec{\Omega}$ est un vecteur constant pour passer à la dernière ligne.

Le nombre de neutrons subissant une collision, représente les neutrons qui dans le volume V avaient la direction $\vec{\Omega}$ et qui subissant une collision sont déviés dans la direction $\vec{\Omega}'$. C'est donc

une perte pour la densité de neutron dans la direction $\vec{\Omega}$, c'est pourquoi ce terme intervient avec un signe négatif dans l'Eq.(5.2). Il est directement donné par

$$\left(\iiint_S \Sigma_T(\vec{r}, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) dV \right) \times dt. \quad (5.1)$$

On notera que c'est $\Sigma_T(\vec{r}, \vec{\Omega})$ qui intervient dans l'équation précédente. En effet, qu'il soit absorbé ou diffusé dans une direction autre que $\vec{\Omega}$ le neutron ne contribue plus à $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$ ¹.

À l'opposé, les arrivées par transfert concernent les neutrons qui étant dans une direction quelconque $\vec{\Omega}'$ avant une collision dans V , se retrouvent après une diffusion (cette fois il faut pas que les neutrons soient absorbés) dans la direction d'intérêt $\vec{\Omega}$. La section efficace permettant d'aller d'une direction $\vec{\Omega}'$ à $\vec{\Omega}$ est notée $\Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ et porte le nom de section efficace différentielle de diffusion². Avec cette notation, les arrivées par transfert qui contribuent de manière positive au flux $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$ s'écrivent

$$\left(\iiint_V \iint_{\Omega'} \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) d\vec{\Omega}' dV \right) \times dt.$$

Mettons tous les morceaux ensemble pour l'équation bilan :

$$\begin{aligned} \iiint \frac{\partial n(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} dV = & - \iiint \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) dV - \iiint \Sigma_T(\vec{r}, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) dV \\ & + \iiint_V \iint_{\Omega'} \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) d\Omega' dV + \iiint Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) dV \end{aligned}$$

et finalement en se rappelant que $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = vn(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$ (avec v constante)

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) + \Sigma(\vec{r}, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \iint_{\Omega'} d\Omega' \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$$

(5.3)

c'est l'équation de BOLTZMANN linéaire pour le transport des neutrons sous la forme intégrale-différentielle.

5.3 Cas stationnaire

En régime stationnaire (c'est à dire à l'équilibre), l'équation précédente se simplifie immédiatement en

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) + \Sigma(\vec{r}, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \iint_{\Omega'} d\Omega' \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$$

(5.4)

On cherche des solutions de cette équation dans deux cas simples :

1. Remarque : il se peut que le neutron ne soit pas dévié lors de la collision (auquel cas il reste dans la "bonne" direction $\vec{\Omega}$, mais comme $\Sigma_T(\vec{r}, \vec{\Omega})$ est donnée par une densité de probabilité, c'est un événement de mesure nulle qui ne contribue pas au résultat global.

2. La section efficace de diffusion et la section efficace différentielle de diffusion sont reliées par (on intègre sur toutes les directions sortantes) :

$$\Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \iint_{\Omega'} \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (5.2)$$

- Dans le vide, source ponctuelle isotrope à l'origine.

L'équation de BOLTZMANN devient ainsi

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi} \delta(\vec{r})$$

dont la solution est donnée par

$$\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi r^2} \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_r) \quad \text{où } \vec{\Omega}_r = \frac{\vec{r}}{r}.$$

Pour le prouver nous utilisons l'astuce désormais familière, à savoir une sphère centrée sur la source et nous regardons ce qui en sort. Tout d'abord, remarquons que le neutron se propage sur une ligne droite infinie car il ne subit pas de collision. De plus, la symétrie sphérique du problème nous amène à considérer une solution radiale. On cherche donc $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ sous la forme

$$\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \phi(r) \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_r). \quad (5.5)$$

Le courant est donné par $j(\vec{r}) = \phi(r) \vec{\Omega}_r$ et est constant sur la sphère de rayon r centrée sur la source. Par conséquent le flux (physique) de particules sortant de la sphère vaut

$$\begin{aligned} \iint_S \vec{j} \cdot d\vec{S} &= \iint_S \phi(r) \vec{\Omega}_r \cdot d\vec{S} \\ &= \iint_S \phi(r) (\vec{\Omega}_r \cdot \vec{\Omega}_r) dS \\ &= \phi(r) \iint_S dS = 4\pi r^2 \phi(r) \end{aligned}$$

Dans le vide, comme il n'y a pas d'absorption, ce qui sort de cette sphère c'est précisément la source (intégrée sur les angles), on a alors

$$4\pi r^2 \phi(r) = \iint d\Omega \frac{S_0}{4\pi} = \left(\frac{S_0}{4\pi} \right) \times 4\pi = S_0 \quad (5.6)$$

et donc $\phi(r) = S_0/(4\pi r^2)$. Reporter ce résultat dans l'Eq.(5.5) conduit au résultat annoncé.

$$\phi(\vec{r}) \times 4\pi r^2 = \left(\frac{S_0}{4\pi} \right) \times 4\pi \quad \Rightarrow \quad \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi r^2} \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_r)$$

- Source ponctuelle dans un milieu purement absorbant.

On reprend le raisonnement précédent, la symétrie du problème est encore radiale de sorte que le flux (physique) de particules sortant d'une sphère de rayon r centrée sur la source vaut encore $4\pi r^2 \phi(r)$. En revanche, tous les neutrons émis par la source ne sortent pas de la sphère, plus précisément ils ont une probabilité $e^{-\Sigma_a r}$ d'arriver à la surface de la sphère. Par conséquent, l'Eq. 5.6 devient

$$4\pi r^2 \phi(r) = \left(\frac{S_0}{4\pi} \right) \times 4\pi \times e^{-\Sigma_a r} \quad \Rightarrow \quad \phi(r) = \frac{S_0}{4\pi r^2} e^{-\Sigma_a r}$$

et

$$\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{S_0}{4\pi r^2} e^{-\Sigma_a r} \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_r)$$

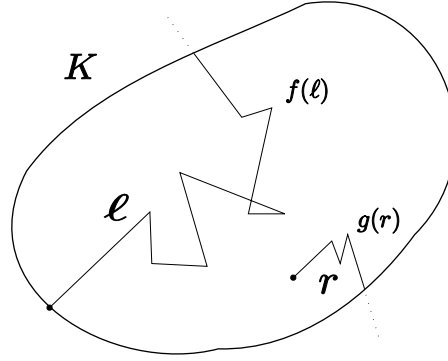


FIGURE 5.1 – Exemples de trajectoires issues du bord (longueur ℓ , densité $f(\ell)$), et issues de l'intérieur du domaine (longueur r , densité $g(r)$).

5.4 Excursion dans les domaines bornés

Dans ce chapitre nous considérons des domaines bornés. Ces domaines correspondent à la réalité physique puisque tous les systèmes nucléaires ont une extension finie dans l'espace (en particulier les détecteurs). Dans un premier temps, l'équation de BOLTZMANN que nous venons juste d'établir va nous permettre d'obtenir des résultats nouveaux sur les marches aléatoires dans des milieux bornés. Dans un second temps, ces résultats sur les marches aléatoires vont nous permettre d'améliorer considérablement certains résultats classiques de neutronique, notamment sur les probabilités dites de collisions. Il illustre de manière moderne le bénéfice de relier les deux domaines : les marches aléatoires et la neutronique.

On considère un milieu borné (on parle aussi de géométries confinées) diffusant et uniformément absorbant. Ce milieu est donc caractérisé par une section efficace de diffusion quelconque et une section efficace d'absorption constante : $\Sigma_T(\vec{r}) = \Sigma_S(\vec{r}) + \Sigma_a$. On suppose de plus que ce corps est soumis à un flux incident de neutrons uniforme et isotrope ϕ_{in} . Il existe aussi à l'intérieur de ce corps des sources internes $Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$ que nous préciserons bientôt. L'idée est de trouver un état stationnaire (en jouant justement sur les sources internes pour compenser l'absorption) puis de calculer le taux d'absorption de 2 manières différentes :

- (i) par l'équation de BOLTZMANN grâce au flux.
- (ii) par les probabilités sur les trajectoires.

Dans ce corps irradié il y a deux types de trajectoires sortantes, celles où le neutron entre par la surface (dûes à ϕ_{in}) et fait une trajectoire de longueur ℓ avant de sortir, et celles où le neutron naît dans le volume (dûes aux sources internes), dans ce cas on notera r la trajectoire totale parcourue dans le domaine. Des exemples de telles trajectoires sont montrés sur la figure Fig.(5.1). Dans chaque cas, nous pouvons définir une densité de probabilité associée à ces trajectoires. Les neutrons entrant par la surface se voient attribuer la densité de probabilité $f(\ell)$. De la même manière, les neutrons naissants dans le volume et sortants par la surface en ayant effectué une trajectoire de longueur r se voient attribuer la densité de probabilité $g(r)$.

Écrivons maintenant l'équation de BOLTZMANN avec ses conditions aux limites

$$\begin{cases} \left[\Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_a \right] \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \iint d\Omega' \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \\ \phi_{\text{surface}}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \phi_{in} \end{cases}$$

Comme annoncé dans le préambule, on cherche une solution constante dans le volume. Par continuité le flux doit être le même dans le volume qu'à la surface, cette hypothèse implique $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \phi_{in}$. Reporter un flux constant dans l'équation précédente entraîne

$$\left[\Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_a \right] \phi_{in} = \phi_{in} \iint d\Omega' \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (5.7)$$

Le terme sous l'intégrale double ne se traite pas simplement (il ne correspond pas à l'Eq 5.2 car cette fois la double intégration porte sur les directions d'entrée et non de sortie). On aimerait néanmoins pouvoir dire, si le processus est à l'équilibre, que

$$\iint \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) d\Omega' = \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}).$$

Cette relation porte le nom de "principe de la balance détaillée" (ou bilan détaillé) et est automatiquement vérifiée pour des chocs isotropes (dans ce cas $\Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = 1/(4\pi)$). Sous réserve que la section efficace de diffusion satisfasse le principe de la balance détaillée, l'Eq 5.7 se résume à

$$\left[\Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_a \right] \phi_{in} = \phi_{in} \Sigma_S(\vec{r}, \vec{\Omega}) + Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

ce qui implique que les sources valent

$$Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \Sigma_a \phi_{in}. \quad (5.8)$$

Autrement dit, des sources volumiques uniformes et constantes doivent compenser l'absorption afin d'obtenir une solution d'équilibre dans tout le domaine. Avec cette approche le taux d'absorption s'obtient aisément

$$A \equiv \iiint \Sigma_a \phi(r) dV \quad (5.9)$$

où $\phi(r)$ est le flux intégré, donné par

$$\phi(r) = \iint \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega = \iint \phi_{in} d\Omega = 4\pi \phi_{in} \quad (5.10)$$

et immédiatement des deux équations précédentes, on trouve

$$A \equiv \iiint \Sigma_a \phi(r) dV = 4\pi V \Sigma_a \phi_{in}. \quad (5.11)$$

On va maintenant effectuer ce même calcul en considérant les trajectoires des neutrons. Tout d'abord, calculons le nombre de neutrons entrant dans notre domaine, c'est le courant intégré sur la surface (comme les neutrons entrent dans le domaine, afin d'éviter des signes négatifs inutiles, nous orientons la normale vers l'intérieur). Avec cette convention et en se rappelant que

$$\vec{j}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \vec{\Omega} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

$$\begin{aligned} \oint_S \iint_{\Omega} d\Omega \vec{j}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cdot d\vec{S} &= \oint_S \iint_{\Omega} d\Omega \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \vec{\Omega} \cdot d\vec{S} \\ &= \phi_{in} \iint dS \iint d\Omega \underbrace{\vec{\Omega} \cdot \vec{n}}_{\cos \theta} \\ &= \phi_{in} \iint dS \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta d\theta \\ &= \phi_{in} \pi S. \end{aligned}$$

représente le nombre de neutrons entrants dans le domaine par unité de temps. Ces neutrons sont supportés par la densité de probabilité $f(\ell)$, mais seuls les neutrons absorbés dans le volume vont contribuer au taux d'absorption. De fait, la contribution du flux de neutrons incident au taux d'absorption vaut

$$A_{\text{flux}} = \phi_{in} \pi S \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \times \underbrace{(1 - e^{-\Sigma_a \ell})}_{\text{prob. d'être absorbé}}$$

De même, la contribution des termes de sources est donnée par

$$A_{\text{source}} = \Sigma_a \phi_{in} \times 4\pi \times V \times \int_0^{+\infty} dr g(r) (1 - e^{-\Sigma_a r})$$

Ainsi le taux d'absorption total s'écrit

$$A = A_{\text{flux incident}} + A_{\text{source}}$$

En égalant les expressions du taux d'absorption donné par les méthodes (i) et (ii), puis en développant en séries les exponentielles sous les signes d'intégration³, on obtient

$$\begin{aligned} 4\pi \Sigma_a \phi_{in} V &= \pi S \phi_{in} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) (1 - e^{-\Sigma_a \ell}) + 4\pi V \Sigma_a \phi_{in} \int_0^{+\infty} dr g(r) (1 - e^{-\Sigma_a r}) \\ &= \pi S \phi_{in} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \left(1 - \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n (\Sigma_a \ell)^n}{n!} \right) + 4\pi V \Sigma_a \phi_{in} \int_0^{+\infty} dr g(r) \left(1 - \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(\Sigma_a r)^n}{n!} \right) \\ &= -\pi S \phi_{in} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\Sigma_a^n \ell^n}{n!} - 4\pi V \phi_{in} \int_0^{+\infty} dr g(r) \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\Sigma_a^{n+1} r^n}{n!} \\ &= -\pi S \phi_{in} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \left((-1) \Sigma_a \ell + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{\Sigma_a^n \ell^n}{n!} \right) - 4\pi V \phi_{in} \int dr g(r) \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n-1} \Sigma_a^n \frac{r^{n-1}}{(n-1)!} \\ &= \pi S \phi_{in} \Sigma_a \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \ell - \pi S \phi_{in} \sum_{n=2}^{\infty} (\Sigma_a)^n \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \ell^n \\ &\quad + 4\pi V \phi_{in} \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{(\Sigma_a)^n}{(n-1)!} \underbrace{\int_0^{+\infty} dr g(r) r^{n-1}}_{\langle r^{n-1} \rangle} \\ 4\Sigma_a V &= S \Sigma_a \langle \ell \rangle - S \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\Sigma_a)^n \langle \ell^n \rangle + 4V \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n-1)!} (\Sigma_a)^n \langle r^{n-1} \rangle \end{aligned}$$

3. le rayon de convergence de la série exponentielle étant infini, on ne fait aucune approximation.

Or pour qu'un polynôme soit nul il faut que tous ses coefficients polynomiaux soient nuls, donc

$$\boxed{\langle \ell \rangle = \frac{4V}{S}}. \quad (5.12)$$

Cette formule constitue une généralisation de la formule de Cauchy qui l'avait établie pour des lignes droites.

De plus, en rassemblant les sommes de la dernière ligne de calcul, nous obtenons

$$\sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{(-1)^n}{(n-1)!} \left(- \underbrace{\frac{\langle \ell^n \rangle}{n} S + 4V \langle r^{n-1} \rangle}_{=0} \right) (\Sigma_a)^n \right) = 0$$

d'où

$$\boxed{\langle r^{n-1} \rangle = \frac{\langle \ell^n \rangle}{n \langle \ell \rangle} \quad \forall n \geq 2}. \quad (5.13)$$

Ces formules généralisent un résultat obtenu pour la première fois par DIXMIER⁴ toujours pour des lignes droites (cas beaucoup plus restrictif que le notre).

Proposition 1. la densité de probabilité $g(r)$ est donnée par :

$$g(r) = \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_r^{+\infty} f(\ell) d\ell. \quad (5.14)$$

Preuve. Commençons par vérifier la normalisation

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} g(r) dr &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} dr \int_r^{+\infty} f(\ell) d\ell \\ &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell \int_0^\ell dr f(\ell) \\ &= \frac{1}{\ell} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \int_0^\ell dr \\ &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \\ &= 1 \quad \checkmark \end{aligned}$$

4. la référence est : DIXMIER, M *Journal de Physique* 39 p873-895 (1978).

Puis, calculons les moments de $\langle r^{n-1} \rangle$ pour tout $n \geq 2$,

$$\begin{aligned}
 \langle r^{n-1} \rangle &= \int_0^{+\infty} g(r) r^{n-1} dr \\
 &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} dr r^{n-1} \int_r^{+\infty} f(\ell) d\ell \\
 &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell \int_0^\ell dr f(\ell) \\
 &= \frac{1}{\ell} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \int_0^\ell dr \\
 &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \\
 &= \frac{\langle \ell^n \rangle}{n \langle \ell \rangle}
 \end{aligned}$$

Comme deux densités de probabilité sont égales si elles ont tous leurs moments égaux, la dernière relation permet de conclure.

5.4.1 Probabilités de collisions

Tout d'abord donnons deux définitions standard en neutronique :

P_{vv} = probabilité pour qu'une particule née uniformément dans le volume et avec une direction isotrope soit absorbée par celui-ci,

$$P_{vv} = \int_0^{+\infty} g(u) (1 - e^{-\Sigma_a u}) du$$

P_{sv} = idem pour une particule entrant par la surface.

$$P_{sv} = \int_0^{+\infty} f(u) (1 - e^{-\Sigma_a u}) du$$

Proposition 2.

$$\boxed{P_{vv} = 1 - \frac{P_{sv}}{\Sigma_a \langle \ell \rangle}} \quad (5.15)$$

Preuve.

$$\begin{aligned}
 P_{vv} &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} du (1 - e^{-\Sigma_a u}) \int_u^{+\infty} f(\ell) d\ell \\
 &= \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \int_0^\ell (1 - e^{-\Sigma_a u}) du \\
 &= 1 - \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \left[-\frac{e^{-\Sigma_a y}}{\Sigma_a} \right]_0^\ell \\
 &= 1 - \frac{1}{\langle \ell \rangle} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) (1 - e^{-\Sigma_a \ell}).
 \end{aligned}$$

Grâce à nos outils probabilistes, la preuve devient très simple. La relation précédente (obtenue en 2004) généralise à des milieux diffusifs une relation bien connue pour des milieux purement absorbant (voir les textes classiques comme CASE, HOFFMAN & PLACZEK par exemple).

5.4.2 Nombre moyen de collisions

Dans ce paragraphe nous prenons en compte uniquement les trajectoires qui entrent par la surface et qui sortent du domaine. Rappelons que la loi entre deux sauts est donnée par $h(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$ (où λ est le libre parcourt moyen) et notons P_n la probabilité d'avoir exactement n collisions dans V . Ainsi le nombre moyen de collisions $\langle N \rangle$ dans V est donné par

$$\langle N \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n P_n$$

Considérons maintenant une trajectoire de longueur ℓ . Cette trajectoire contribue à P_n si (i) la longueur totale z des n premiers sauts est inférieure à ℓ et (ii) le dernier saut est supérieur à $\ell - z$ afin d'être hors du domaine. Ainsi,

$$P_n = \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \int_0^\ell dz f_{Z_n}(z) \int_{\ell-z}^{+\infty} h(x) dx$$

Or, la somme de n lois exponentielles identiques de paramètre $1/\lambda$ est donnée par une loi gamma de paramètres n et $1/\lambda$ ⁵

$$f_{Z_n}(z) = \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} \frac{e^{-z/\lambda}}{\lambda^n}.$$

En remplaçant cette expression dans celle de P_n ,

$$\begin{aligned} P_n &= \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \int_0^\ell dz \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} \frac{e^{-z/\lambda}}{\lambda^n} e^{-(\ell-z)/\lambda} \\ &= \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \frac{e^{-\ell/\lambda}}{(n-1)! \lambda^n} \int_0^\ell z^{n-1} dz \\ &= \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \frac{e^{-\ell/\lambda}}{n!} \left(\frac{\ell}{\lambda} \right)^n. \end{aligned}$$

5. Prouvons-le par récurrence, $Z = X + Y$,

$$f_{Z_n}(z) = \int_0^z f(x) f_{Z_{n-1}}(z-x) dx$$

par récurrence : $X = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$ et $Y = \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} \frac{e^{-z/\lambda}}{\lambda^n}$,

$$\begin{aligned} f_{Z_n}(z) &= \int_0^z \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda} \frac{(z-x)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{e^{-(z-x)/\lambda}}{\lambda^n} dx \\ &= \frac{e^{-z/\lambda}}{\lambda^{n+1} (n-1)!} \underbrace{\int_0^z (z-x)^{n-1} dx}_{\frac{z^n}{n}} \\ &= \frac{z^n e^{-z/\lambda}}{n! \lambda^{n+1}} \end{aligned}$$

Nous pouvons vérifier la normalisation. Le nombre moyen de collisions se calcule facilement

$$\begin{aligned}
 \langle N \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n P_n = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \frac{e^{-\ell/\lambda}}{n!} \left(\frac{\ell}{\lambda} \right)^n n \\
 &= \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) e^{-\ell/\lambda} \left(\frac{\ell}{\lambda} \right) \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{\ell}{\lambda} \right)^{n-1}}_{e^{\ell/\lambda}} \\
 &= \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) e^{-\ell/\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{\ell}{\lambda} \right)^n \\
 &= \frac{1}{\lambda} \int_0^{+\infty} d\ell f(\ell) \ell = \frac{\langle \ell \rangle}{\lambda} = \frac{4V}{\lambda S}
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

et finalement

$$\boxed{\langle N \rangle = \frac{\langle \ell \rangle}{\lambda} = \frac{4V}{\lambda S}}$$

5.5 Références

Les références pour l'équation de transport sont les mêmes que celles pour la diffusion des neutrons du chapitre précédent. Ajoutons qu'en France des générations de neutroniciens ont été formés à cette discipline au niveau M2 à travers les livres de Paul Reuss, voici une édition récente : REUSS "Précis de neutronique" EDP Sciences (collection Génie atomique) auquel on peut associer le livre d'exercices "exercices de neutronique" du même auteur.

Pour les excursions dans les domaines bornés, une partie de la littérature de recherche vous est accessible.

BLANCO & FOURNIER *Europhysics Letters* 61 (2003) p168

MAZZOLO *Europhysics Letters* 68 (2004) p350

BÉNICHOU ET AL *Europhysics Letters* 70 (2005) p42

Chapitre 6

Méthode de Monte Carlo

6.1 Présentation

Toute méthode utilisant des nombres aléatoires pour résoudre un problème est appelée méthode de MONTE-CARLO. Historiquement c'est BUFFON qui en 1777 a esquissé cette méthode pour estimer le nombre π en regardant le nombre de fois qu'une aiguille coupe des lattes régulièrement espacées. Cette méthode a été re-développée pour le projet Manhattan dans les années 45 – 50, notamment par METROPOLIS, VON NEUMANN et ULAM (premier article publié en 49), sans oublier FERMI qui dès les années 30 avait imaginé cette méthode (sans toutefois publier)¹.

Historiquement liés à la diffusion des neutrons, les domaines d'application de la méthode de MONTE-CARLO se sont grandement élargis : neutronique, physique statistique, météorologie, biologie et croissance des populations, économie et sciences sociales, pour n'en nommer que quelques uns.

La méthode de MONTE-CARLO est basée sur 2 grands théorèmes probabilistes : la loi des grands nombres et le théorème de la limite centrale. Pour rappel, donnons nous n variables aléatoires $\{X_i\}_{1 \leq i \leq n}$ indépendantes de même loi (v.a.i.).

Théorème 3 (Loi des grands nombres). *Si*

$$S_n = \sum_{i=1}^n X_i, \quad \text{et} \quad \mathbb{E}[X_i] = m < +\infty$$

alors

$$\forall \epsilon \geq 0 \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} P \left[\left| \frac{S_n}{n} - m \right| \geq \epsilon \right] = 0.$$

De plus,

Théorème 4 (Limite centrale). *Si $\sigma^2 = \mathbb{E}[X_i^2] - \mathbb{E}[X_i]^2 < +\infty$, alors*

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} P \left[\left| \frac{S_n}{n} - m \right| \geq \frac{h\sigma}{\sqrt{n}} \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_h^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Ainsi dans toute méthode de MONTE-CARLO, la précision sera en $1/\sqrt{n}$ quelque soit la dimension de l'espace.

1. Pour l'aspect historique on pourra se reporter à l'article de Metropolis "the beginning of the Monte Carlo method" disponible sur <http://library.lanl.gov/la-pubs/00326866.pdf>

6.2 Échantillonnage d'une loi de probabilité

Le but est de simuler n'importe quelle loi de probabilité (discrètes ou continues) en fonction de variables aléatoires uniformément distribuées sur $[0, 1]$ fournies par les ordinateurs.

6.2.1 Cas discret

Nous avons $p_1, p_2, \dots, p_n$ avec $\sum_{i=1}^n p_i = 1$. Pour passer d'une variable aléatoire continue $\xi \in [0, 1]$ uniforme à celle des p_i , nous associons ξ à l'évènement de probabilité p_i , si

$$\sum_{k=1}^{i-1} p_k < \xi \leq \sum_{k=1}^i p_k.$$

6.2.2 Cas continu

Pour simuler une variable distribuée avec densité de probabilité $f(x)$ avec $x \in [a, b]$, $\int_a^b f(x) dx = 1$, la correspondance avec $\xi \in [0, 1]$ peut se faire avec les aires,

$$\xi = \int_a^x f(y) dy = F(x) - F(a)$$

donc $x = F^{-1}(F(a) + \xi)$ (ce qui suppose que l'on puisse trouver une primitive de $f(x)$ et l'inverser).

Par exemple, si nous désirons simuler $f(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda} \mathbb{I}_{[0, +\infty[}$, nous obtenons $x = -\lambda \log(1 - \xi)$.

Pour $f(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{25}{6}x^4$ sur $[0, 1]$, l'inversion ne peut pas se faire analytiquement et numériquement l'inversion sera coûteuse. Nous allons donc essayer de trouver une méthode pour éviter cela. L'idée est de voir la densité comme la somme de deux lois. Tout d'abord remarquons que

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{1}{2}x^2 dx &= \frac{1}{6} \\ \int_0^1 \frac{25}{6}x^4 dx &= \frac{5}{6}. \end{aligned} \tag{6.1}$$

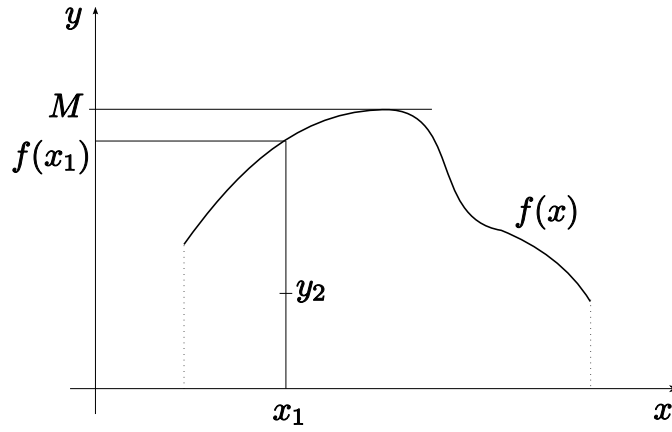
ce qui nous indique que la première loi en $\sim x^2$ à un poids de $1/6$ et la seconde en $\sim x^4$ de $5/6$. Nous tirons au hasard un couple $(\xi_1, \xi_2) \in [0, 1]^2$, si $\xi_1 < \frac{1}{6}$ alors ξ_2 est tiré selon la loi $3x^2$, et si $\xi_1 \geq \frac{1}{6}$ alors ξ_2 est tiré selon la loi $5x^4$ (les nouveaux coefficients devant x^2 et x^4 proviennent de la normalisation).

Enfin, quelque soit la densité de probabilité de la variable aléatoire que nous voulons simuler, il existe un algorithme très simple (mais pas toujours efficace) qui permet d'arriver à ce but grâce à un double tirage de nombres aléatoires entre $[0, 1]$. C'est la méthode du rejet (rejection method, hit or miss method).

Soit $f(x)$ une densité de probabilité de la variable $x \in [a, b]$. Nous tirons

$$\begin{cases} x_1 & \text{uniforme} & \in [a, b] & \rightarrow & \frac{dx_1}{b-a} \\ y_2 & \text{uniforme} & \in [0, M] & \rightarrow & \frac{dy_2}{M} \end{cases}$$

avec $M \geq \sup_{x \in [a, b]} f(x)$ comme indiqué sur la figure Fig.(6.1). Nous gardons le tirage si $y_2 <$

FIGURE 6.1 – Tirage des points x_1 et y_2 pour la méthode de rejet.

$f(x_1)$.

La probabilité pour que $x \in [x_1, x_1 + dx_1]$ et y_2 vérifiant $y_2 < f(x_1)$ est,

$$\frac{dx_1}{b-a} \times \frac{f(x_1)}{M}$$

Ainsi la probabilité pour qu'un tirage fournisse 2 nombres x_1 et y_2 vérifiant à la fois $x_1 \geq x$ et $y_2 \geq f(x_1)$ est

$$\begin{aligned} P[x] &= \frac{\int_a^x \frac{f(x_1) dx_1}{M(b-a)}}{\int_a^b \frac{f(x_1) dx_1}{M(b-a)}} \\ &= \frac{\int_a^x dx_1 f(x_1)}{\int_a^b dx_1 f(x_1)} \\ &= \int_a^x dx_1 f(x_1) \end{aligned} \tag{6.2}$$

et x est distribué selon la densité $f(x)$.

Remarque : cet algorithme est efficace pour des fonctions relativement régulières, pour des fonctions piquées le nombre de rejets devient important et l'efficacité de l'algorithme diminue.

6.3 Réduction de variance

Dans une simulation MONTE-CARLO on doit souvent évaluer l'espérance d'une certaine grandeur sous forme d'intégrale (par exemple la longueur des trajectoires des neutrons dans un détecteur). On cherche donc à calculer,

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int g(x)f(x) dx,$$

où $f(x)$ est une densité de probabilité.

Soit $\tilde{f}(x) > 0$ une autre densité (normalisée). Alors

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int \frac{g(x)f(x)}{\tilde{f}(x)} \tilde{f}(x) dx = \mathbb{E}[Z(Y)] \text{ avec } Z(Y) = \frac{g(Y)f(Y)}{\tilde{f}(Y)},$$

et on améliore l'algorithme de simulation si $\text{Var}[Z] < \text{Var}[g(X)]$.

$$\begin{aligned} \text{Var}[Z] &= \mathbb{E}[Z^2] - \mathbb{E}[Z]^2 = \int \left(\frac{g(x)f(x)}{\tilde{f}(x)} \right)^2 \tilde{f}(x) dx - \mathbb{E}[g(X)]^2 \\ &= \int \frac{g^2(x)f^2(x)}{\tilde{f}(x)} dx - \mathbb{E}[g(X)]^2, \end{aligned}$$

expression qui s'annule (on dit que le jeu est à variance nulle) en prenant

$$\tilde{f}(x) = \frac{g(x)f(x)}{\mathbb{E}[g(X)]}.$$

Mais le numérateur est inconnu ! C'est justement ce que l'on cherche à évaluer !

L'idée consiste à prendre $\tilde{f}(x)$ proche de $g(x)f(x)$ puis de normaliser (diviser par $\int \tilde{f}(x) dx$).

- Exemple simple, on cherche à calculer $\int_0^1 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) dx$ (dx représente la loi uniforme sur $[0;1]$). On prend $\tilde{f}(x)$ de la forme $\lambda(1-x^2)$ (ressemble au développement du cosinus) puis en normalisant $\tilde{f}(x) = \frac{3}{2}(1-x^2)$.

$$\begin{aligned} \text{Var}[g(X)] &= \int_0^1 \cos^2\left(\frac{\pi}{2}x\right) dx - \left(\int_0^1 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) dx\right)^2 \approx 0,0947 \\ \text{Var}[Z] &= \int_0^1 \frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}x\right)}{\frac{3}{2}(1-x^2)} dx - \left(\int_0^1 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) dx\right)^2 \approx 0,000991. \end{aligned}$$

Avec cette nouvelle loi, on gagne un facteur 100 sur la variance et un facteur 10 sur la taille de l'échantillonnage.

- Autre exemple (cas discret)

Jeu de dé $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, on encaisse $f(\omega) = \omega$ avec une probabilité uniforme $p(\omega) = 1/6$. On cherche à piper le dé en favorisant les valeurs les plus grandes (qui contribuent le plus au score) de la manière suivante :

$$\begin{cases} \tilde{p}(1) = \tilde{p}(2) = \tilde{p}(3) = \tilde{p}(4) = a \\ \tilde{p}(5) = \tilde{p}(6) = b \end{cases}$$

La normalisation $4a + 2b = 1$ impose $a = \frac{1}{4}(1 - 2b)$.

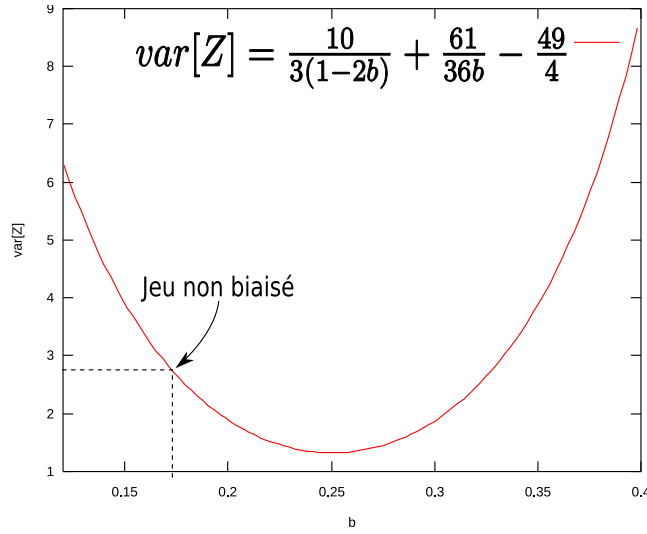
Pour la variance, on a

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\omega] &= \sum_{i=1}^6 ip(i) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 i = \frac{7}{2} \\ \mathbb{E}[\omega^2] &= \sum_{i=1}^6 i^2 p(i) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 i^2 = \frac{91}{6}, \end{aligned}$$

et donc $\text{Var}[\omega] = \mathbb{E}[\omega^2] - \mathbb{E}[\omega]^2 = \frac{35}{12}$.

Pour la nouvelle variance, on trouve

$$\text{Var}[Z] = \sum_{i=1}^4 \frac{i^2 \left(\frac{1}{6}\right)^2}{\frac{1}{4}(1-2b)} + \sum_{i=5}^6 \frac{i^2 \left(\frac{1}{6}\right)^2}{b} - \mathbb{E}[\omega]^2 = \frac{10}{3(1-2b)} + \frac{61}{36b} - \frac{49}{4}.$$

FIGURE 6.2 – Variance du système de dés biaisés en fonction du paramètre b .

$$(\text{Var}[Z])' = \frac{10}{3} \frac{2}{(1-2b)^2} - \frac{61}{36b^2}$$

et

$$(\text{Var}[Z])' = 0 \Rightarrow b = \frac{1 - \sqrt{2\frac{60}{61}}}{\frac{4}{61}} \approx 0.251$$

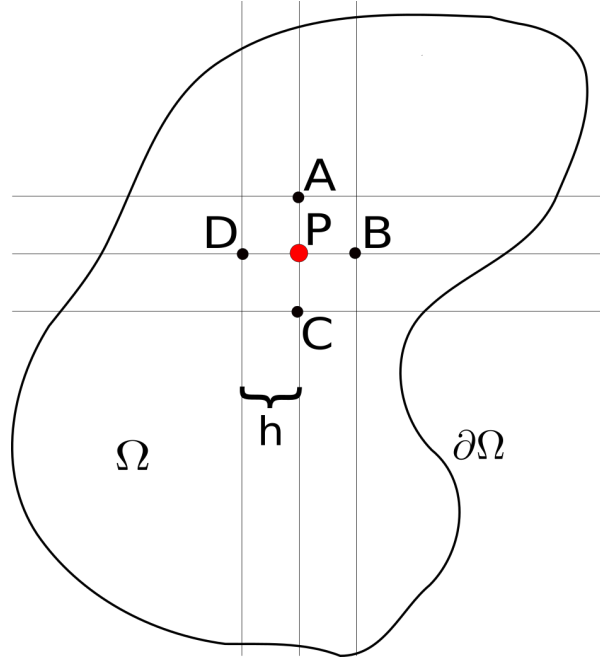
L'allure de la variance en fonction du paramètre libre b est montrée sur la figure Fig.(6.2). Elle montre notamment que la variance peut se dégrader avec un choix de paramètres de biaisage mal adapté.

6.4 Résolution de l'équation de la diffusion par Monte Carlo

On considère un domaine bi-dimensionnel (pour simplifier l'écriture) Ω diffusif homogène de frontière $\partial\Omega$, caractérisé par le coefficient k^2 du chapitre 4. De plus, on impose sur la frontière du domaine des conditions aux limites données par une fonction quelconque $f(x, y)$. Sous ces hypothèses, l'équation de la diffusion vérifiée par le flux neutronique $\phi(x, y)$ s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} - k^2 \phi(x, y) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \phi(x, y) = f(x, y) & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (6.3)$$

Cette équation pour $f(x, y)$ et Ω quelconques n'admet pas de solution analytique exacte. On va chercher à la résoudre, en un point $P \in \Omega$ à l'aide de la méthode de Monte Carlo. Pour se faire, on recouvre le domaine Ω par un maillage carré de pas h comme indiqué sur la figure Fig(6.3) et on discrétise l'équation précédente autour du point P . Sur le réseau, celui-ci a quatre voisins libellés par les lettres A, B, C, D et en développant ϕ autour de ces quatre points pour h petit on

FIGURE 6.3 – Maillage du domaine Ω .

obtient :

$$\begin{aligned}\phi(A) &= \phi(P) + \frac{\partial\phi(x,y)}{\partial y}h + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2}\frac{h^2}{2} + o(h^3) \\ \phi(B) &= \phi(P) + \frac{\partial\phi(x,y)}{\partial x}h + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2}\frac{h^2}{2} + o(h^3) \\ \phi(C) &= \phi(P) - \frac{\partial\phi(x,y)}{\partial y}h + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2}\frac{h^2}{2} + o(h^3) \\ \phi(D) &= \phi(P) - \frac{\partial\phi(x,y)}{\partial x}h + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2}\frac{h^2}{2} + o(h^3)\end{aligned}$$

La somme des quatre équations précédentes donne dans la limite de h petit

$$\begin{aligned}\phi(A) + \phi(B) + \phi(C) + \phi(D) &= 4\phi(P) + \left(\frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2} \right) \frac{h^2}{2} \\ &= 4\phi(P) + k^2 h^2 \phi(P)\end{aligned}$$

et donc

$$\phi(P) = \frac{1}{4 + k^2 h^2} [\phi(A) + \phi(B) + \phi(C) + \phi(D)].$$

En remarquant que pour un point $Q \in \partial\Omega$ on a immédiatement que $\phi(Q) = f(Q)$, on résume ces résultats par le système d'équations

$$\begin{cases} \phi(P) = \frac{1}{4 + k^2 h^2} [\phi(A) + \phi(B) + \phi(C) + \phi(D)] & \text{pour } P \in \Omega \\ \phi(Q) = f(Q) & \text{pour } Q \in \partial\Omega \end{cases} \quad (6.4)$$

qui constitue la version discrétisée du système d'équation Eq.(6.3). Il faut maintenant définir un jeu Monte Carlo qui mime ce système d'équation. Pour ce faire on définit le jeu suivant : une particule part du point $P \in \Omega$ et se déplace sur les nœuds du réseau par sauts de $\pm h$ dans les directions Ox et Oy avec les probabilités suivantes :

$$\begin{cases} \text{probabilité d'aller sur un site voisin} & : \frac{1}{4 + k^2 h^2} \\ \text{probabilité d'être absorbée en } P & : \frac{k^2 h^2}{4 + k^2 h^2} \end{cases}$$

le jeu Monte carlo s'arrête dans l'un des deux cas suivants :

1. La particule atteint un point Q du bord.
2. La particule est absorbée en un point à l'intérieur du domaine.

Le jeu Monte Carlo étant fixé il reste à préciser son score. Ce score noté X est défini de la manière suivante :

1. Si la particule s'arrête sur un point Q du bord alors $X = f(Q)$.
2. Si la particule est absorbée en un point à l'intérieur du domaine, alors $X = 0$.

Proposition 1. L'espérance mathématique de X est égale à la solution de Eq.(6.3) en P :

$$\boxed{\mathbb{E}[X] = \phi(P)} \quad (6.5)$$

Preuve. Tout d'abord désignons par $Pr[P \rightarrow Q]$ la probabilité pour qu'une marche aléatoire issue de P se termine sur un point du bord Q . Cette marche au hasard commençant en P se poursuit (comme indiqué sur la figure Fig(6.3)) par l'une des cinq éventualités (disjointes) suivantes : passage en A , B , C , ou D ou bien un arrêt en P . On a donc

$$Pr[P \rightarrow Q] = \frac{1}{4 + k^2 h^2} [Pr[A \rightarrow Q] + Pr[B \rightarrow Q] + Pr[C \rightarrow Q] + Pr[D \rightarrow Q]] \quad \text{pour } P \in \Omega. \quad (6.6)$$

Par ailleurs, pour un point $Q' \in \partial\Omega$ on a manifestement :

$$Pr[Q' \rightarrow Q] = \begin{cases} 1 & \text{si } Q' = Q \\ 0 & \text{si } Q' \neq Q \end{cases} \quad (6.7)$$

Si $X(P)$ désigne le score pour une marche aléatoire issue de P , on a alors

$$\mathbb{E}[X(P)] = \sum_Q Pr[P \rightarrow Q] f(Q), \quad (6.8)$$

compte tenu du fait que les chemins se terminant par une absorption dans le domaine ne contribuent pas au score. Remarquons que pour une marche commençant en un point Q sur le bord, on a immédiatement $\mathbb{E}[X(Q)] = f(Q)$. Pour une marche démarrant d'un point P à l'intérieur du domaine, en injectant l'Eq.(6.6) dans l'Eq.(6.8), on obtient

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X(P)] &= \sum_Q \frac{1}{4 + k^2 h^2} [Pr[A \rightarrow Q] + Pr[B \rightarrow Q] + Pr[C \rightarrow Q] + Pr[D \rightarrow Q]] f(Q) \\ &= \frac{1}{4 + k^2 h^2} [\mathbb{E}[X(A)] + \mathbb{E}[X(B)] + \mathbb{E}[X(C)] + \mathbb{E}[X(D)]] . \end{aligned} \quad (6.9)$$

L'espérance du processus suivant qu'il démarre de l'intérieur ou du bord du domaine se résume par

$$\begin{cases} \mathbb{E}[X(P)] = \frac{1}{4+k^2h^2} [\mathbb{E}[X(A)] + \mathbb{E}[X(B)] + \mathbb{E}[X(C)] + \mathbb{E}[X(D)]] & \text{pour } P \in \Omega \\ \mathbb{E}[X(Q)] = f(Q) & \text{pour } Q \in \partial\Omega \end{cases} \quad (6.10)$$

Les systèmes d'équations Eqs.(6.4) et Eqs.(6.10) étant identiques, sous réserve de l'unicité de la solution, l'espérance mathématique de $X(P)$ est donc bien la solution en P du problème posé.