



HAL
open science

Suppression du régime transitoire initial des simulations Monte-Carlo de criticité

Yann Richet

► **To cite this version:**

Yann Richet. Suppression du régime transitoire initial des simulations Monte-Carlo de criticité. Mathématiques générales [math.GM]. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2006. Français. NNT : 2006EMSE0036 . tel-00779772

HAL Id: tel-00779772

<https://theses.hal.science/tel-00779772>

Submitted on 22 Jan 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° d'ordre : 429 MA

THESE
présentée par

Yann RICHET

Pour obtenir le grade de Docteur
de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne

Spécialité : Mathématiques Appliquées

*SUPPRESSION DU RÉGIME TRANSITOIRE INITIAL
DES SIMULATIONS MONTE-CARLO DE CRITICITÉ*

Soutenue à Saint-Etienne le 13 décembre 2006

Membres du jury

Président :	Anestis Antoniadis	Professeur, Université Joseph Fourier
Rapporteurs :	Cheikh Diop	Chef du Laboratoire d'Etudes de Protection et de Probabilités, Commissariat à l'Energie Atomique
	Anestis Antoniadis	Professeur, Université Joseph Fourier
Examineurs :	Paul Reuss	Professeur, Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires
	Patrick Cousinou	Adjoint au Directeur de la Sûreté des Usines et Laboratoires, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
	Xavier Bay	Maître Assistant, Ecole des Mines de Saint-Etienne
Directeur :	Laurent Carraro	Professeur, Ecole des Mines de Saint-Etienne
IRSN :	Eric Letang	Chef du Laboratoire d'Etudes, Recherches et Développement, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
	Olivier Jacquet	Ingénieur de Recherche et de Développement, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire

● Spécialités doctorales :

SCIENCES ET GENIE DES MATERIAUX
 MECANIQUE ET INGENIERIE
 GENIE DES PROCÉDES
 SCIENCES DE LA TERRE
 SCIENCES ET GENIE DE L'ENVIRONNEMENT
 MATHEMATIQUES APPLIQUEES
 INFORMATIQUE
 IMAGE, VISION, SIGNAL
 GENIE INDUSTRIEL
 MICROELECTRONIQUE

Responsables :

J. DRIVER Directeur de recherche – Centre SMS
 A. VAUTRIN Professeur – Centre SMS
 G. THOMAS Professeur – Centre SPIN
 B. GUY Maître de recherche
 J. BOURGOIS Professeur – Centre SITE
 E. TOUBOUL Ingénieur
 O. BOISSIER Professeur – Centre G2I
 JC. PINOLI Professeur – Centre CIS
 P. BURLAT Professeur – Centre G2I
 Ph. COLLOT Professeur – Centre CMP

● Enseignants-chercheurs et chercheurs autorisés à diriger des thèses de doctorat (titulaires d'un doctorat d'Etat ou d'une HDR)

BATTON-HUBERT	Mireille	MA	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
BENABEN	Patrick	PR 2	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
BERNACHE-ASSOLANT	Didier	PR 1	Génie des Procédés	CIS
BIGOT	Jean-Pierre	MR	Génie des Procédés	SPIN
BILAL	Essaïd	MR	Sciences de la Terre	SPIN
BOISSIER	Olivier	PR 2	Informatique	G2I
BOUDAREL	Marie-Reine	MA	Sciences de l'inform. & com.	DF
BOURGOIS	Jacques	PR 1	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
BRODHAG	Christian	MR	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
BURLAT	Patrick	PR 2	Génie industriel	G2I
COLLOT	Philippe	PR 1	Microélectronique	CMP
COURNIL	Michel	PR 1	Génie des Procédés	SPIN
DAUZERE-PERES	Stéphane	PR 1	Génie industriel	CMP
DARRIEULAT	Michel	ICM	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
DECHOMETTS	Roland	PR 2	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
DESRAYAUD	Christophe	MA	Mécanique & Ingénierie	SMS
DELAFOSSE	David	PR 2	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
DOLGUI	Alexandre	PR 1	Informatique	G2I
DRAPIER	Sylvain	PR 2	Mécanique & Ingénierie	CIS
DRIVER	Julian	DR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
FOREST	Bernard	PR 1	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
FORMISYN	Pascal	PR 1	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
FORTUNIER	Roland	PR 1	Sciences & Génie des Matériaux	CMP
FRACZKIEWICZ	Anna	MR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
GARCIA	Daniel	CR	Génie des Procédés	SPIN
GIRARDOT	Jean-Jacques	MR	Informatique	G2I
GOEURIOT	Dominique	MR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
GOEURIOT	Patrice	MR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
GRAILLOT	Didier	DR	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
GROSSEAU	Philippe	MR	Génie des Procédés	SPIN
GRUY	Frédéric	MR	Génie des Procédés	SPIN
GUILHOT	Bernard	DR	Génie des Procédés	CIS
GUY	Bernard	MR	Sciences de la Terre	SPIN
GUYONNET	René	DR	Génie des Procédés	SPIN
HERRI	Jean-Michel	PR 2	Génie des Procédés	SPIN
KLÖCKER	Helmut	CR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
LAFOREST	Valérie	CR	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
LE COZE	Jean	PR 1	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
LI	Jean-Michel	EC (CCI MP)	Microélectronique	CMP
LONDICHE	Henry	MR	Sciences & Génie de l'Environnement	SITE
MOLIMARD	Jérôme	MA	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
MONTHEILLET	Frank	DR 1 CNRS	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
PERIER-CAMBY	Laurent	MA1	Génie des Procédés	SPIN
PIJOLAT	Christophe	PR 1	Génie des Procédés	SPIN
PIJOLAT	Michèle	PR 1	Génie des Procédés	SPIN
PINOLI	Jean-Charles	PR 1	Image, Vision, Signal	CIS
STOLARZ	Jacques	CR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
SZAFNICKI	Konrad	CR	Sciences de la Terre	SITE
THOMAS	Gérard	PR 1	Génie des Procédés	SPIN
TRAN MINH	Cahn	MR	Génie des Procédés	SPIN
VALDIVIESO	Françoise	CR	Génie des Procédés	SPIN
VALDIVIESO	François	MA	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
VAUTRIN	Alain	PR 1	Mécanique & Ingénierie	SMS
VIRICELLE	Jean-Paul	CR	Génie des procédés	SPIN
WOLSKI	Krzysztof	CR	Sciences & Génie des Matériaux	SMS
XIE	Xiaolan	PR 1	Génie industriel	CIS

Glossaire :

PR 1	Professeur 1 ^{ère} catégorie
PR 2	Professeur 2 ^{ème} catégorie
MA(MDC)	Maître assistant
l'Environnement	
DR 1	Directeur de recherche
Ing.	Ingénieur
MR(DR2)	Maître de recherche
CR	Chargé de recherche
EC	Enseignant-chercheur
ICM	Ingénieur en chef des mines

Centres :

SMS	Sciences des Matériaux et des Structures
SPIN	Sciences des Processus Industriels et Naturels
SITE	Sciences Information et Technologies pour
G2I	Génie Industriel et Informatique
CMP	Centre de Microélectronique de Provence
CIS	Centre Ingénierie et Santé

à Marion, à Violette.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à exprimer ma reconnaissance à Laurent Carraro pour avoir accepté d'être le directeur de cette thèse.

Mes remerciements vont conjointement et particulièrement à Olivier Jacquet et Xavier Bay pour leur encadrement et leur soutien. Les enseignements scientifiques qu'ils m'ont apportés m'ont aussi enrichi à titre personnel.

Pour ses encouragements et son assistance scientifique, merci à Joachim Miss.

Grâce à leur volonté de me donner un espace de travail au sein du Service d'Etudes de Criticité et de ses activités industrielles accaparantes, Eric Letang, Patrick Cousinou et Véronique Rouyer ont activement soutenu ce projet.

Messieurs Anestis Antoniadis, Cheikh Diop, Paul Reuss, Patrick Cousinou, Eric Letang, Xavier Bay, Olivier Jacquet m'ont fait l'honneur de participer au Jury de soutenance; je les en remercie profondément.

Je tiens finalement à mentionner le plaisir que j'ai eu à travailler au sein du Service d'Etudes de Criticité, et j'en remercie ici tous les membres pour avoir contribué à créer cet espace singulier où la recherche et l'expertise industrielle sont soudées par la convivialité et l'ouverture, pour le plus grand intérêt de chacun.

Table des matières

I Introduction	1
I.1. Problématique industrielle du risque de criticité	2
I.2. Les calculs Monte-Carlo de criticité	4
I.2.1. Exploitation industrielle	4
I.2.2. Convergence des sources	4
II Le simulateur Monte-Carlo de criticité MORET	7
II.1. Description du système	8
II.2. Description des sources de neutrons	8
II.3. La simulation	9
III Une introduction aux tests d'hypothèses en statistique	13
III.1. Modélisation	15
III.2. Formalisme probabiliste	16
III.3. Conclusions	19
IV Environnement technique et modélisation des calculs Monte-Carlo de criticité	20
IV.1. Stationnarité des simulations Monte-Carlo de criticité : hypothèses	21
IV.2. Suppression du régime transitoire initial des k-effectifs d'étapes	21
IV.3. Modélisation des séquences de k-effectifs d'étapes	23
V Méthodologies de suppression du régime transitoire initial	26
V.1. Détection du régime transitoire initial : test de stationnarité	27
V.1.1. Conformité d'échantillon	31
V.1.2. Sommes cumulées normalisées (vers le pont brownien)	33
V.1.3. Ponts d'homogénéité de sous-échantillons	39
V.1.4. Conclusion	47
V.2. Suppression du régime transitoire initial	48
VI Mise en œuvre et applicatifs calculs Monte-Carlo de criticité	50
VI.1. Paramétrage des méthodes de suppression du régime transitoire des k-effectifs d'étapes	51
VI.1.1. Statistiques libres pour le test de stationnarité	53
VI.1.2. Tabulation des distributions sous hypothèse nulle	55
VI.1.3. Paramètres de nuisance	57
VI.1.4. Paramétrage des heuristiques de suppression du transitoire	60
VI.1.5. Inventaire des méthodes de suppression du régime transitoire	60
VI.2. Plan d'expériences de transitoires théoriques	63
VI.2.1. Critères de performance	66
VI.2.2. Analyse des résultats	69
VI.2.3. Conclusions	77
VI.3. Configurations géométrico-chimiques de criticité	78
VI.3.1. Réseaux de sphères d'uranium métallique	78
VI.3.2. Réseaux de crayons d'UO ₂ irradiés	88

VI.3.3. Conclusions	98
VI.4. Considérations techniques sur l'implémentation	99
VII Perspectives	101
VII.1. Adaptation des indicateurs de performance de suppression de transitoire	102
VII.2. Exploitation des caractéristiques des processus ponts	103
VII.3. Contrôle de la portée de sur-troncature	104
VII.4. Généralisation de la modélisation des régimes transitoires	105
VII.5. Variables de discrimination de la stationnarité	111
VII.5.1. Pont de vraisemblance d'échantillons autocorrélés	111
VIII Conclusion	116
IX Sémantique et notations	120
IX.1. Lois et densités de probabilité	122
IX.2. Séquence des k-effectifs d'étapes et processus associés	122
IX.3. Statistiques de test ou de décision	124
IX.4. Méthodes de suppression de transitoire	125
X Bibliographie et références	126
X.1. Neutronique et criticité	127
X.1.1. Documents IRSN	128
X.2. Mathématiques appliquées	129
X.3. Environnement informatique	130

I Introduction

I.1. Problématique industrielle du risque de criticité

Les matières fissiles, tels les isotopes utilisés dans le cycle du combustible nucléaire (uranium, plutonium), peuvent être à l'origine d'une réaction de fission nucléaire en chaîne incontrôlée causant une forte irradiation à proximité d'un tel accident. Par exemple, 60 kilogrammes d'uranium tel que celui utilisé dans les centrales d'EDF, mélangés à de l'eau, peuvent suffire à amorcer une réaction de fissions en chaîne [COUS].

La réaction de fission nucléaire est due à la collision d'un neutron avec un noyau fissile, qui génère elle-même des neutrons pouvant à leur tour entrer en collision avec d'autres noyaux fissiles. Chaque réaction consomme un neutron, mais en produit environ 2,5 en moyenne dans le cas de la fission de l'uranium 235. Ainsi, lorsque cette production de neutrons en chaîne n'est pas compensée par une perte suffisante de neutrons (par fuites ou absorptions stériles), le système tend à produire de plus en plus de neutrons, la réaction n'est plus contrôlée et conduit alors à un accident de « criticité ».

Plus précisément, les conditions de criticité d'un milieu où se déroulent des réactions de fission en chaîne résultent du bilan de production de neutrons par fission et de leur perte par capture et par fuite (illustration 1). Ainsi, l'état du milieu fissile se caractérise par le coefficient de multiplication neutronique effectif, le « k-effectif », qui peut être défini comme le rapport entre le nombre de neutrons de deux générations successives. Trois cas de figure sont possibles :

- si $k\text{-effectif} < 1$, la réaction est inhibée. Il s'agit de l'état sous-critique qui caractérise l'état de sûreté recherché dans le fonctionnement des installations nucléaires,
- si $k\text{-effectif} = 1$, la réaction est maîtrisée. Dans ce cas, la population des neutrons reste constante, c'est l'état juste critique qui est visé dans un réacteur en fonctionnement mais qu'il convient de ne jamais atteindre (sauf expérimentation particulière) dans les autres installations nucléaires,
- si $k\text{-effectif} > 1$, il s'agit de l'état sur-critique, situation conduisant à l'accident de criticité. Une réaction de fission en chaîne démarre, entraînant une production importante de neutrons non compensée par les pertes.

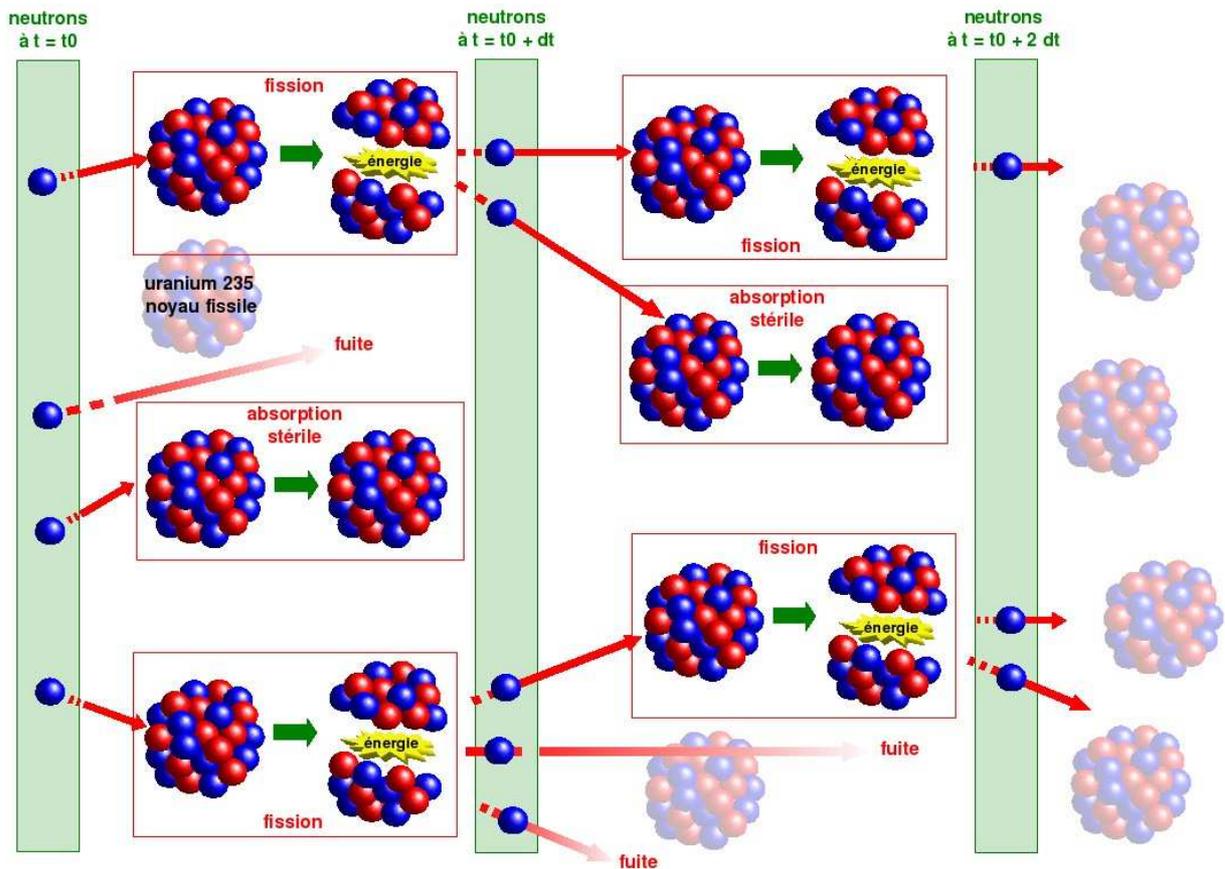


Illustration 1 : Évolution du nombre de neutrons par réaction de fission en chaîne.

Tous les systèmes industriels utilisant des matières fissiles présentent un risque de criticité, qui doit être maîtrisé et préalablement évalué. Dans ces configurations industrielles, souvent complexes, le k-effectif est généralement estimé au moyen d'un modèle informatique.

La réglementation impose qu'un exploitant industriel qui veut mettre en production une installation du cycle du combustible ou un emballage de transport de matière fissile produise préalablement un dossier de sûreté pour son projet. En particulier, pour prévenir le risque de criticité, il doit prouver que des marges existent par rapport à l'état critique (correspondant à un k-effectif de 1), en particulier en conditions accidentelles. Ainsi, pour garantir la sous-criticité, une marge de sécurité sur l'estimation du k-effectif intègre globalement les incertitudes concernant :

- la fiabilité du calcul,
- le conservatisme de la modélisation géométrico-chimique du calcul,
- la qualification des codes de calcul,
- la vraisemblance du scénario correspondant à la situation simulée,
- la sensibilité du k-effectif à la variation de certains paramètres mal connus.

I.2. Les calculs Monte-Carlo de criticité

I.2.1. Exploitation industrielle

L'estimation du risque de criticité est obtenue par la modélisation du transport des neutrons régie par l'équation de Boltzmann. Toutefois, la complexité des configurations étudiées vis-à-vis du risque de criticité n'en permet pas la résolution numérique par des méthodes déterministes. L'emploi de méthodes Monte-Carlo consistant à simuler la vie d'un très grand nombre de neutrons dans le système est alors nécessaire pour estimer les caractéristiques neutroniques telles que le coefficient de multiplication des neutrons.

L'évolution technologique de l'environnement d'exécution des calculs de criticité (mémoire, vitesse d'exécution) permettant de modéliser des configurations géométrico-chimiques de plus en plus complexes, les pratiques industrielles tendent à rendre ces modélisations plus réalistes, réduisant ainsi la marge du conservatisme de la modélisation géométrico-chimique garantissant la non criticité. Pour évaluer la marge de sécurité globale, les techniques de calcul doivent évoluer afin d'améliorer la fiabilité de l'estimation du coefficient de multiplication des neutrons de configurations complexes. Il s'agit notamment de l'amélioration des méthodes Monte-Carlo dont certains défauts sont bien identifiés, telle la problématique de convergence des sources.

I.2.2. Convergence des sources

Un calcul Monte-Carlo de criticité consiste en la réalisation de N itérations (étapes) simulant la propagation de P neutrons pour estimer le facteur de multiplication des neutrons du système. On estime alors ce k -effectif du système comme la moyenne des N k -effectifs d'étapes définis pour chaque étape par le quotient :

$$\frac{\text{nombre de neutrons produits}}{\text{nombre de neutrons initiaux}}$$

Toutefois, ces N étapes sont corrélées car les sites de naissance des neutrons d'une étape sont définis parmi les sites de fission (ou sites potentiels de fission, telles les collisions dans les milieux fissiles) des neutrons de l'étape précédente. Cette évolution des sites de naissance permet au fil des étapes de faire converger la répartition spatiale des P neutrons vers la distribution réelle des neutrons du milieu, initialement mal connue.

Le positionnement initial des sources, laissé à l'arbitrage de l'utilisateur, n'étant pas a priori un échantillon de cette distribution réelle, la convergence de la distribution des sources pendant les premières étapes peut donc biaiser fortement la simulation.

On peut voir cette simulation comme une simulation Monte-Carlo par chaîne de Markov (McMC) de la distribution spatiale des neutrons (on génère en fait un P -échantillon de cette loi).

La séquence des N k -effectifs d'étapes est alors « contaminée » par un transitoire initial et biaise l'estimation du k -effectif du système (illustration 2). Notons que le transitoire pouvant être croissant ou décroissant, le biais d'estimation du k -effectif du système peut être négatif ou positif, ne garantissant en rien le conservatisme du calcul du point de vue du risque de criticité.

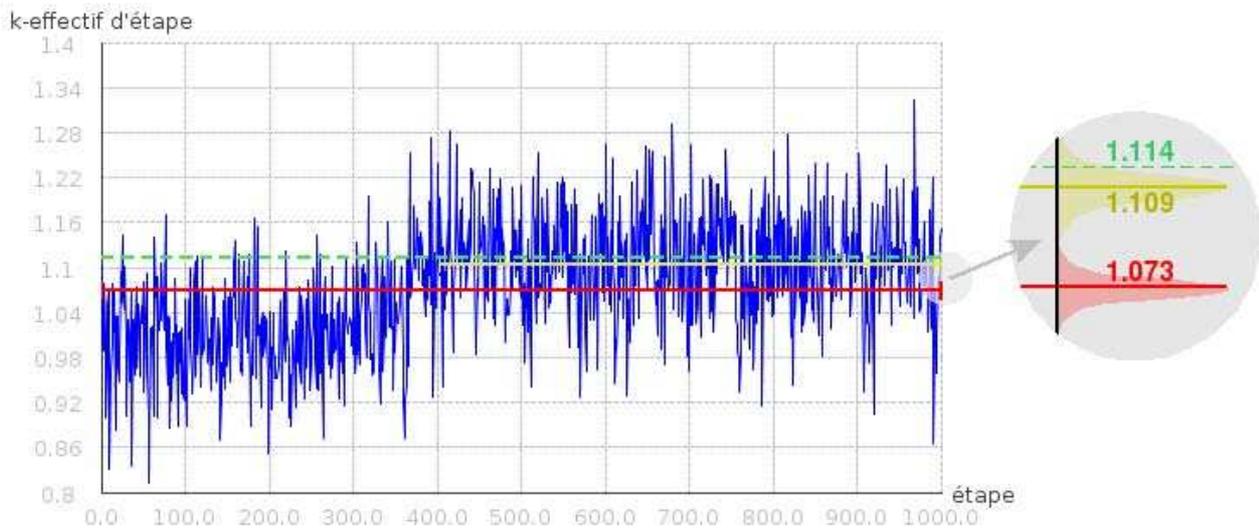


Illustration 2 : Benchmark OCDE n°4 [EGSC] : Séquence de k -effectifs d'étapes, présentant un transitoire induit par l'évolution de la distribution des sources :

- k -effectif réel du système : 1.114,
- estimation du k -effectif sur les 1000 étapes : moyenne 1.07266, et écart-type 0.00260,
- estimation du k -effectif sur les 600 dernières étapes : moyenne 1.10852, et écart-type 0.00286.

En supposant que la simulation considérée permette de faire converger la distribution des neutrons simulés vers leur distribution réelle, la suppression du régime transitoire initial des k -effectifs d'étapes permet alors d'éliminer le biais d'estimation du k -effectif du système.

L'objet de ce travail de thèse est le développement d'une méthodologie de suppression du régime transitoire initial des k-effectifs d'étapes.

Dans un premier temps, nous détaillerons la simulation Monte-Carlo de criticité implémentée dans le code MORET développé à l'IRSN, ensuite utilisé pour générer des séquences de k-effectifs d'étapes réels. Puis, nous donnerons quelques éléments de base de la théorie des tests d'hypothèses en statistique. Dans notre contexte, des statistiques de test seront utilisées pour retenir ou non l'hypothèse de stationnarité d'une séquence de k-effectifs d'étapes.

Une formalisation du contexte technique d'exploitation des calculs Monte-Carlo de criticité permettra ensuite d'établir un modèle simplifié des séquences de k-effectifs d'étapes. Divers tests de stationnarité basés sur ce modèle seront alors utilisés dans une heuristique itérative de troncature du régime transitoire.

La mise en œuvre de cette méthodologie sera détaillée, puis exploitée pour une comparaison de ses différentes déclinaisons d'une part sur un plan d'expériences représentatif des calculs Monte-Carlo de criticité, et d'autre part sur des calculs de configurations de criticité réelles.

Enfin, nous présenterons les perspectives envisagées et les conclusions de cette étude.

II Le simulateur Monte-Carlo de criticité MORET

Le code Monte-Carlo MORET [JACQ2] est développé depuis 1970 au Service d'Etudes de Criticité, et a été appliqué à la criticité des procédés industriels mis en œuvre dans les laboratoires et usines du cycle du combustible nucléaire. Il permet de calculer le coefficient de multiplication effectif des neutrons de toute configuration modélisée en trois dimensions.

II.1. Description du système

La géométrie du système est décrite au moyen d'un ensemble de formes simples convexes (sphère, parallélépipède, cylindre, cône, demi-espace, prisme droit) qui peuvent se combiner sous forme d'opérations booléennes. L'ensemble est placé dans un volume extérieur dont les faces externes permettent de simuler différentes conditions aux limites.

Les lois d'interaction neutron-matière sont régies par l'utilisation de sections efficaces. Dans le code MORET, le domaine énergétique est découpé en un nombre réduit d'intervalles, appelés groupes, sur lesquels les sections efficaces, fonctions de l'énergie du neutron et du noyau avec lequel le neutron

est entré en collision, sont supposées constantes (méthode « multigroupe »). Elles sont calculées de façon à conserver le flux moyen :

$$\sigma_g = \frac{\int \sigma(E)\Phi(E)dE}{\int_g \Phi(E)dE} \quad (\Phi : \text{flux} ; E : \text{énergie} ; \sigma_g : \text{section efficace multigroupe}).$$

Chaque matériau est considéré comme un milieu uniforme et homogène : les différents nucléides sont remplacés globalement par un noyau moyen, caractérisé par les sections efficaces macroscopiques calculées à partir des sections efficaces microscopiques des nucléides constituants.

II.2. Description des sources de neutrons

Dans le code MORET, les neutrons sont simulés par « paquets » de quelques centaines ou milliers au cours de ce qu'on appelle une génération. La distribution spatiale des sources n'est pas préalablement connue. Comme les neutrons sont créés à partir de fissions, la simulation est un processus itératif permettant de choisir parmi les fissions de la génération i , les sources de neutrons de la génération $i+1$. Les générations sont donc corrélées et c'est à l'utilisateur de choisir une distribution arbitraire pour initialiser le processus.

II.3. La simulation

Le calcul MORET consiste à simuler des neutrons qui se déplacent dans le système depuis leur naissance jusqu'à leur disparition. La vie du neutron est une succession d'événements élémentaires séparés dans l'espace, qui sont déterminés de façon aléatoire au moyen des lois de probabilité. Considérons un système limité par une frontière, et suivons le parcours du neutron dans ce système depuis son origine jusqu'à la fin de son histoire.

- La **position initiale du neutron** \vec{r} est choisie au hasard à partir de la distribution des sources, et le **groupe d'énergie initial** g à partir du spectre d'émission des neutrons de fission dans le milieu considéré. La **direction initiale** $\vec{\Omega}$ est tirée de façon isotrope dans l'espace.
- La **longueur de parcours probable** en ligne droite avant la prochaine collision est choisie à partir de la loi du parcours qui précise la probabilité qu'un neutron parcourt une longueur s sans choc dans un milieu et subisse une collision entre s et $s+ds$:

$$p(s)ds = \Sigma_t e^{-\Sigma_t(g)s} ds$$
 , où $\Sigma_t(g)$ est la section macroscopique totale du milieu. La position aléatoire de la prochaine collision est alors déterminée par : $\vec{r}' = \vec{r} + s\vec{\Omega}$.
- Si le parcours probable conduit le neutron en dehors du milieu, le neutron est déplacé jusqu'à l'intersection du parcours et de la frontière du milieu.
 - Soit le neutron pénètre dans un nouveau milieu et alors un nouvel échantillonnage de la longueur du parcours avant la prochaine collision est réalisé en tenant compte de la section macroscopique totale du nouveau milieu.
 - Soit le neutron est arrivé sur la frontière du système. Selon les conditions de réflexion sur cette frontière, le neutron :
 - **fuit** définitivement du système et l'histoire de ce neutron est terminée. La simulation d'un autre neutron est entreprise, si la génération n'est pas terminée,
 - est renvoyé dans le système. Un nouveau tirage de la longueur du parcours avant la prochaine collision est réalisé.
- Si le parcours probable ne conduit pas le neutron en dehors du milieu, une **collision** a bien lieu en \vec{r}' . Le **type de réaction** est tiré aléatoirement à partir des sections efficaces d'absorption Σ_a et de diffusion Σ_t .
 - Toute collision dans un milieu fissile ayant une probabilité $\frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}$ d'être une fission,

chaque site de collision dans un milieu fissile est considéré comme un site potentiel de fission, dont on enregistre les coordonnées spatiales, ainsi que le nombre potentiel de neutrons produits $w_f = w \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_t}$ (où w est le poids du neutron et ν le nombre moyen de neutrons produits par fission) permettant de construire la distribution des sources pour la génération suivante.

- Une **absorption** (de probabilité $\frac{\Sigma_a}{\Sigma_t}$) entraîne la disparition du neutron. La simulation d'un autre neutron est entreprise, si la génération n'est pas terminée.
- Dans le cas d'une **diffusion** (de probabilité complémentaire $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$), l'énergie après choc est déterminée par les sections de transfert entre chaque groupe énergétique. La direction du neutron après choc est déterminée au moyen des lois d'anisotropie reconstituées à partir des premiers coefficients du développement en polynômes de Legendre des sections de transfert (qui sont des fonctions du cosinus de l'angle de diffusion). Le poids du neutron est multiplié par le nombre moyen de neutrons émis après diffusion $1 + \frac{\Sigma_e}{\Sigma_s}$, tenant compte de l'existence de réactions (n, xn) émettant x neutrons et caractérisées par la section efficace d'excès Σ_e . L'histoire du neutron se poursuit alors par tirage aléatoire d'une longueur de parcours probable avant la prochaine collision.

Lorsque tous les neutrons de la génération ont été simulés, on peut donner une estimation du k-effectif de l'étape comme étant le ratio du nombre de neutrons produits par fission sur le nombre de neutrons au début de la génération. Il existe en réalité un certain nombre d'estimateurs différents, mais statistiquement équivalents, du k-effectif. Le code MORET en estime six à partir de l'enregistrement détaillé des événements (collisions, longueurs de parcours, absorptions, fuites) survenant aux neutrons au cours de la génération.

La simulation est ensuite poursuivie jusqu'à ce que la précision statistique sur le k-effectif moyen des k-effectifs d'étapes soit suffisante, ou que le nombre de générations demandé soit atteint.

En somme, le déroulement d'une simulation Monte-Carlo de criticité par le code MORET peut être schématisé de la manière suivante (voir illustrations 3, 4) où apparaissent les différents estimateurs du k-effectif d'étape (estimateurs corde, choc ou absorption), issus du comptage d'événements survenant dans la "vie" des P neutrons simulés. En régime stationnaire, c'est-à-dire lorsque les neutrons simulés sont un P -échantillon de la distribution des neutrons réels, ces estimateurs ont pour espérance le k-effectif du système [DUPA].

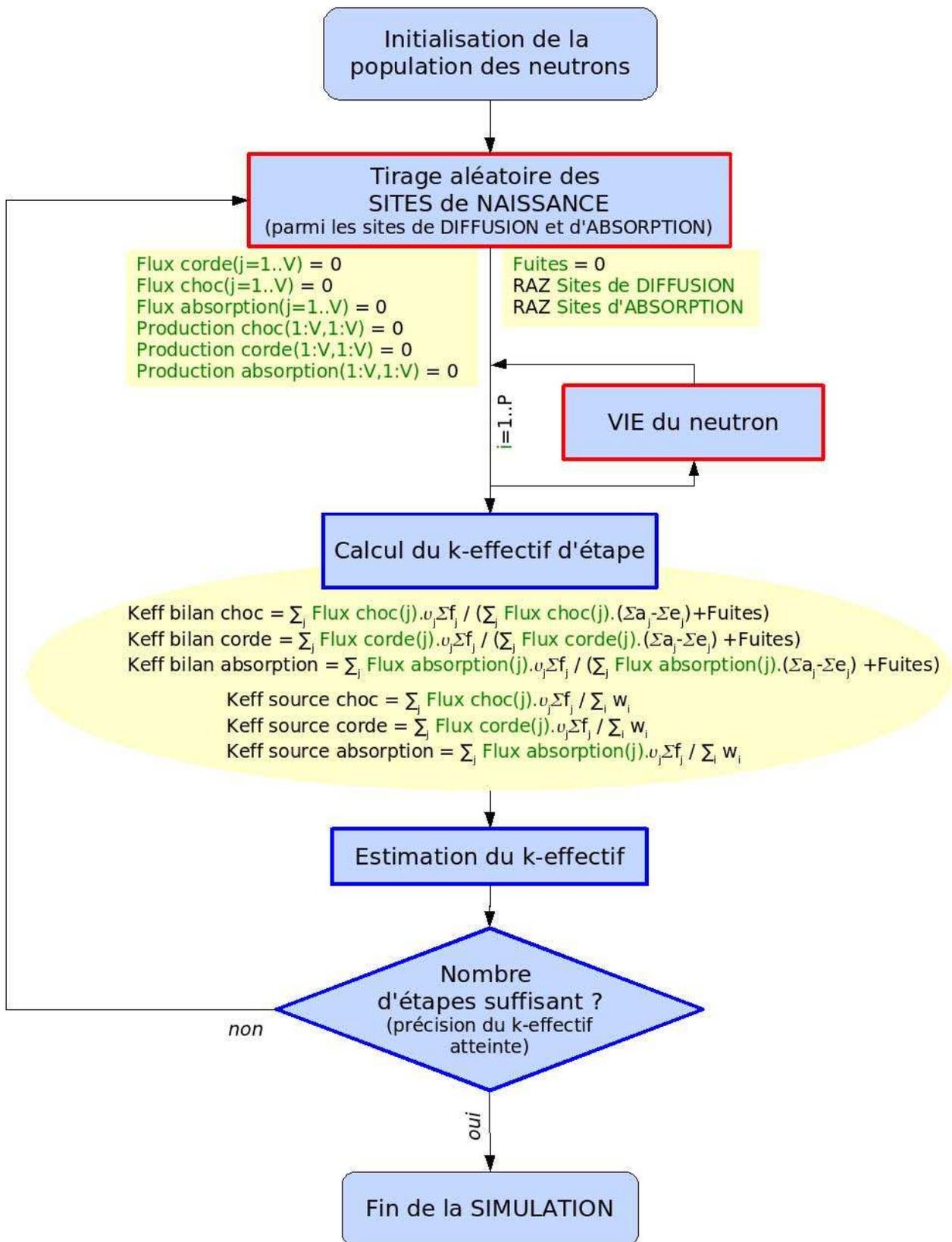


Illustration 3 : Itération des étapes Monte-Carlo dans le code MORET
P : nombre de neutrons de la population simulée
V : nombre de volumes du système géométrico-chimique
i : indice du neutron considéré
j : indice du volume considéré

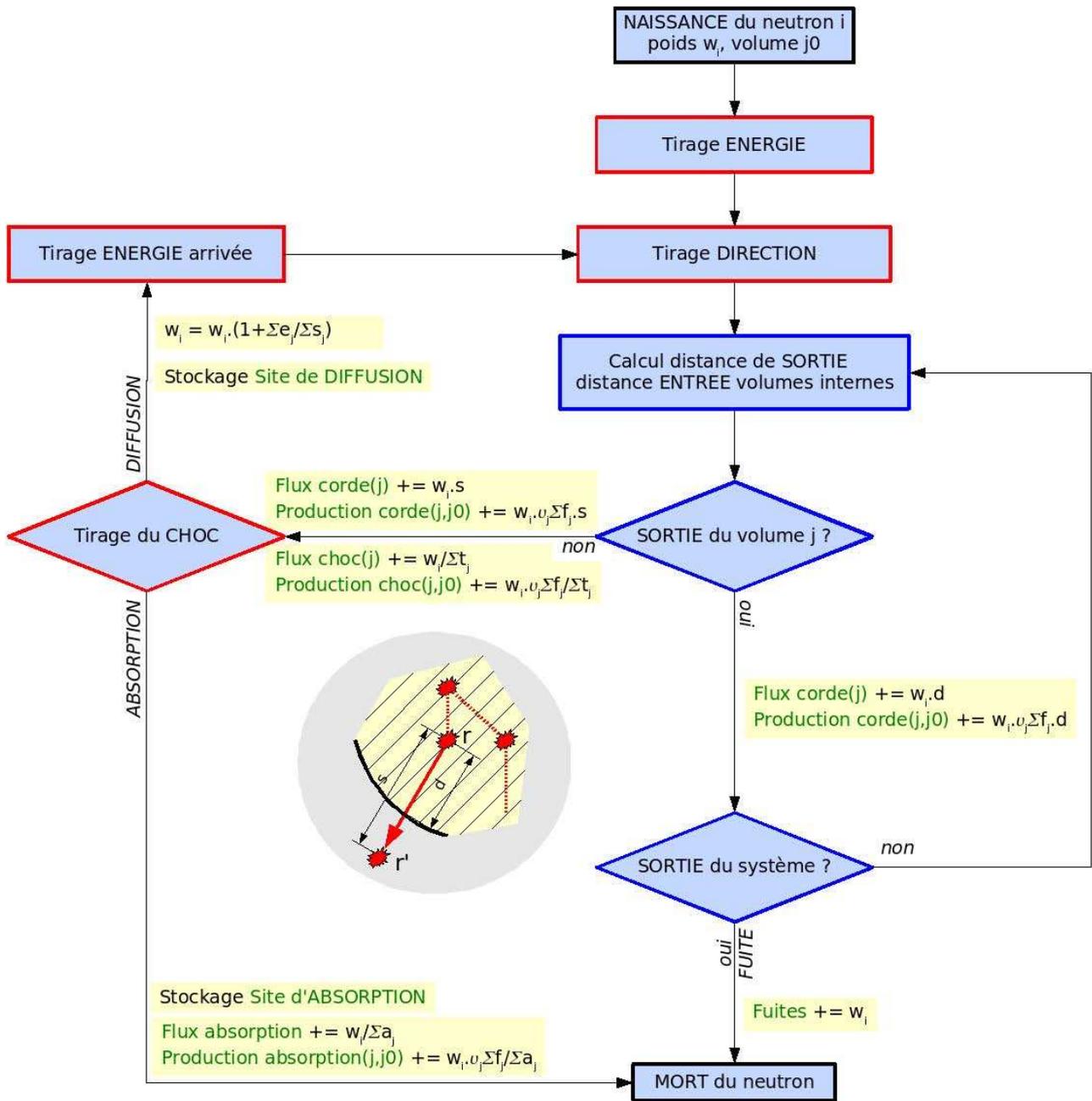


Illustration 4 : Vie du neutron dans le code MORET

P : nombre de neutrons de la population simulée

V : nombre de volumes du système géométrico-chimique

i : indice du neutron considéré

j : indice du volume considéré

l'expression « $x += y$ » désigne l'opération d'ajout de y à la valeur de la variable x .

III Une introduction aux tests d'hypothèses en statistique

La méthodologie des tests en statistique vise à exploiter au mieux un échantillon d'une population afin de trancher entre deux hypothèses (pas nécessairement contraires) relatives aux propriétés de la « population » dont est issu l'échantillon (on parle encore d'inférence statistique). Cette approche sera à la base de la procédure de suppression de transitoire qui teste la stationnarité de l'échantillon des k-effectifs d'étapes.

Pour familiariser le lecteur éventuellement néophyte, un exemple de test est présenté dans un cadre volontairement très simplifié du domaine de la criticité. Cet exemple doit permettre de mieux appréhender les tests statistiques, mais n'est en aucun cas pertinent pour une application directe. Le sujet étant d'actualité dans le cadre des activités de recherche et développement de l'IRSN, nous avons choisi de tester la pertinence de la discrétisation énergétique pour les simulations Monte-Carlo de criticité.

Selon le niveau de compromis entre la précision et la vitesse du calcul, les simulations Monte-Carlo de criticité peuvent modéliser les lois d'interaction neutron-noyau de deux manières différentes :

- soit comme des fonctions continues de l'énergie du neutron,
- soit comme des fonctions constantes sur des intervalles d'énergie du neutron, appelés groupes énergétiques. L'ensemble des groupes est une partition du domaine énergétique.

Dans le premier cas, on parle d'une représentation ponctuelle ou continue en énergie. Durant la simulation, l'énergie du neutron est connue de manière explicite. Dans le deuxième cas, on parle d'une représentation multigroupe. Durant la simulation, l'énergie du neutron n'est pas connue de manière explicite : on sait seulement dans quel groupe énergétique elle se situe.

Si le coût d'un calcul multigroupe est suffisamment faible (de l'ordre de quelques minutes), le coût d'un calcul ponctuel peut lui être supérieur d'un à deux ordres de grandeurs (plusieurs heures). La modélisation ponctuelle, bien qu'a priori plus précise, n'est donc pas privilégiée pour l'utilisation courante dans des études de criticité pouvant de plus en plus nécessiter un grand nombre de calculs. Par exemple, le formulaire de calcul de criticité CRISTAL [JACQ2] permet l'utilisation des deux voies de calcul, la première multigroupe, la deuxième continue :

- la voie standard, utilisée pour les calculs de « production », basée sur l'enchaînement du code de calcul APOLLO2 et du code de calcul Monte-Carlo multigroupe MORET 4 ; cette voie utilise un découpage énergétique en 172 groupes,
- la voie dite de « référence », basée sur l'utilisation du code Monte-Carlo ponctuel TRIPOLI4.

En réalité, les différences entre ces deux voies de calcul sont plus nombreuses, mais nous nous concentrons sur la problématique de la représentation énergétique.

Dans une première approche, l'expert de sûreté-criticité se préoccupe principalement de savoir si l'approximation multigroupe risque de conduire à sous-estimer le k-effectif (c'est-à-dire le risque de criticité), sans se préoccuper de savoir si elle conduit à sur-estimer le k-effectif (situation sans impact pour le risque de criticité).

III.1. Modélisation

La grandeur qui modélise la criticité du système est le k-effectif, estimé comme la moyenne des "k-effectifs d'étapes" évalués au cours du calcul. Ainsi, en utilisant un paramétrage de simulation identique entre les deux voies de calcul (même système géométrico-chimique, même population correctement initialisée de neutrons simulés, et même nombre d'étapes de calcul N) les k-effectifs sont alors les moyennes empiriques de deux échantillons de tailles identiques, supposés gaussiens, de variances proches, et dont les moyennes peuvent différer du seul fait de l'approximation multigroupe.

Nous nous intéressons à la problématique de sous-estimation du k-effectif du fait de la discrétisation énergétique, sans considération pour une éventuelle sur-estimation. La question de l'expert peut alors être formulée comme suit :

« L'approximation multigroupe conduit-elle à sous-estimer le k-effectif ? »

A priori, on ne s'attend pas à une différence significative entre les deux moyennes, d'où le choix de l'hypothèse dite nulle :

H_0 : "le k-effectif estimé sans l'approximation multigroupe est **égal** au k-effectif estimé avec cette approximation" : $k_{\text{effectif}}(\text{calcul multigroupe}) = k_{\text{effectif}}(\text{calcul ponctuel})$

Il s'agit maintenant de contrôler le risque de rejeter à tort cette hypothèse, c'est-à-dire le risque de conduire inutilement des calculs ponctuels par ailleurs plus coûteux en temps "machine".

Mais, on souhaite parallèlement minimiser le risque de conclure à tort qu'il n'y ait pas de différence entre les calculs multigroupes et ponctuels. Comme l'expert de sûreté se préoccupe essentiellement de savoir si l'approximation multigroupe conduit à sous-estimer le k-effectif et non pas de savoir si elle conduit à sur-estimer le k-effectif, il fait le choix de l'hypothèse alternative suivante (qui n'est pas la contraposée de H_0) :

H_1 : "le k-effectif estimé avec l'approximation multigroupe est **inférieur** au k-effectif estimé sans cette approximation" : $k_{\text{effectif}}(\text{calcul multigroupe}) < k_{\text{effectif}}(\text{calcul ponctuel})$

L'expert, qui privilégie ici le temps de calcul, ne souhaite accepter H_1 que si H_0 est significativement contredite par les données, par exemple avec une probabilité arbitraire de 99%. Cela signifie qu'il accepte de rejeter H_0 à tort avec une probabilité de 1% : c'est l'**erreur dite de première espèce** α . Dans ces 1% de cas marginaux, il estimerait le k-effectif en n'utilisant pas l'approximation multigroupe et pénaliserait donc la vitesse du calcul sans apport significatif pour la sûreté-criticité.

Ce risque est contrôlé (risque d'un calcul trop coûteux), à l'opposé du risque d'acceptation à tort de H_0 alors que H_1 est vraie : c'est l'**erreur de seconde espèce** β .

Probabilité	quand H_0 vraie	quand H_1 vraie
d'acceptation de H_0	$1 - \alpha$	β (inconnu)
de rejet de H_0	α	$1 - \beta$ (inconnu)

L'objectif (le rejet de H_0 quand H_1 est vraie) est obtenu avec une probabilité $1 - \beta$; c'est la **puissance** du test. En réalité, le travail de l'expert est de construire un test qui soit le plus puissant possible par rapport à son objectif de sûreté de ne pas sous-estimer le k-effectif, tout en contrôlant parfaitement le risque d'utiliser sans nécessité un calcul ponctuel. C'est précisément ce travail qui sera envisagé dans le cadre de la suppression de transitoire.

III.2. Formalisme probabiliste

Nous posons :

$X = \{X_i\}_{1 \leq i \leq N}$ les k-effectifs d'étapes du calcul multigroupe, de moyenne $\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$ et de variance σ_X^2 ,

$Y = \{Y_i\}_{1 \leq i \leq N}$ les k-effectifs d'étapes du calcul ponctuel, de moyenne $\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i$ et de variance σ_Y^2 .

Note : comme souvent en probabilités, l'usage de grandes lettres pour les k-effectifs d'étapes signale que l'on s'intéresse à la variabilité des données, i.e. au fait qu'ici la considération de deux autres échantillons conduirait à d'autres valeurs pour les k-effectifs d'étapes.

Les deux estimateurs (ou par abus usuel "estimations") du k-effectif \bar{X} et \bar{Y} sont

indépendants, de loi normale de variances respectives $\frac{\sigma_X^2}{N}$ et $\frac{\sigma_Y^2}{N}$.

Si l'hypothèse nulle (i.e. hypothèse a priori) est vraie, alors \bar{X} et \bar{Y} ont la même moyenne.

Puisqu'il s'agit d'étudier l'écart des k-effectifs avec et sans approximation multigroupe, il est naturel

de s'intéresser à $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ qui suit aussi (toujours sous l'hypothèse nulle) une loi normale de

moyenne nulle et de variance $\frac{1}{N}$. La quantité $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ est appelée **statistique du test** ou

variable de décision (illustration 5). C'est une fonction des observations.

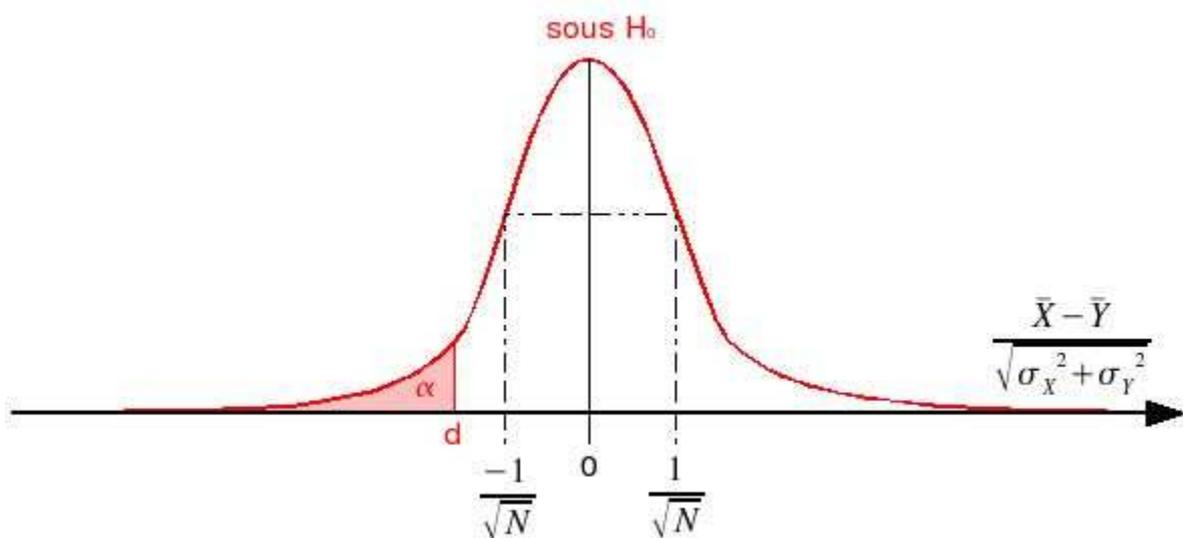


Illustration 5: Distribution de la variable de décision $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ sous hypothèse nulle H_0 .

Sous l'hypothèse nulle, on s'attend à ce que la statistique de test ne soit pas trop négative (voir la figure). On prend donc la règle de décision suivante :

- si $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ est trop négatif, c'est-à-dire inférieur à un seuil d , on optera pour H_1 ,
- si $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}} \geq d$, on conservera H_0 faute de preuves suffisantes.

La zone $] -\infty, d[$ est l'ensemble des valeurs que l'on rejette pour la variable $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ sous

H_0 : c'est la **région critique** ou région de rejet de H_0 .

Le risque de première espèce α (rejet de H_0 à tort) est la probabilité que $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}} < d$ qui

vaut $\alpha = \int_{-\infty}^d \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2}x^2} dx$ sous H_0 . La valeur de d est imposée par le choix arbitraire de α .

Si l'hypothèse H_1 est vraie, alors la distribution réelle de $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ n'est plus centrée en 0 mais en une valeur négative inconnue μ , que l'on peut caractériser comme le biais d'estimation du k-effectif dû à l'approximation multigroupe.

Dans ce cas, la probabilité d'acceptation à tort de H_0 est β (i.e. l'erreur de seconde espèce), la

probabilité que $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}} \geq d$ sous H_1 , soit $\beta = \int_d^{+\infty} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2}(x-\mu)^2} dx$ (illustration 6).

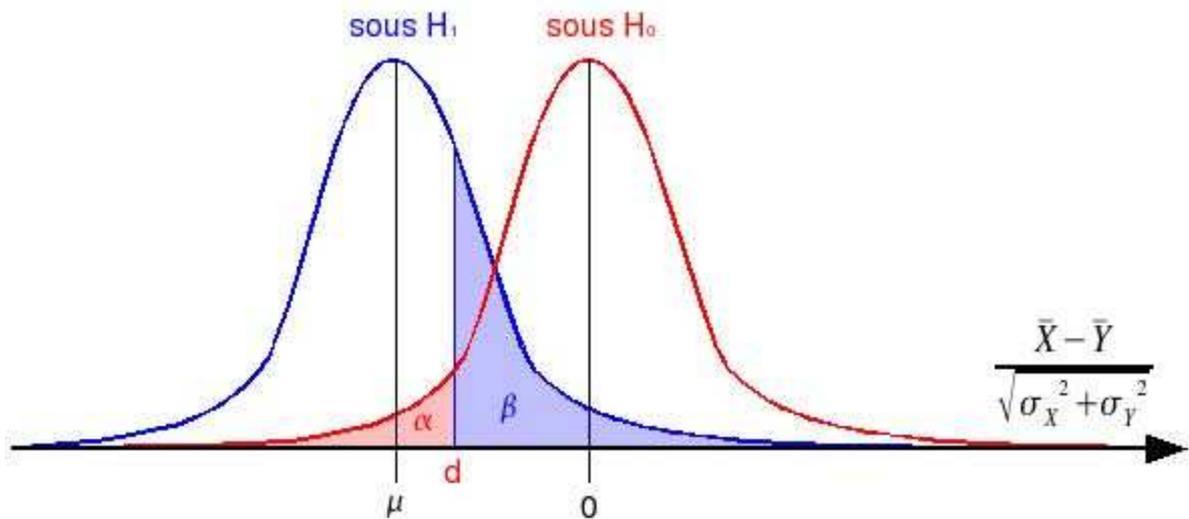


Illustration 6 : Distributions de $\frac{\bar{X}-\bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2+\sigma_Y^2}}$ sous hypothèse nulle H_0 et sous hypothèse alternative H_1 . L'erreur de deuxième espèce β est le risque d'acceptation de H_0 sous H_1 .

Notons que α et β sont liés car tous les deux fonctions de d . En particulier, pour un α donné, un test est d'autant plus efficace (ou encore "puissant") que β est faible.

Mais avec un test d'efficacité donnée, si l'expert souhaite diminuer le risque de deuxième espèce β (i.e. le risque d'effectuer un calcul multigroupe pénalisant pour la sûreté), il doit en contrepartie accepter d'augmenter le risque de première espèce le conduisant à effectuer sans nécessité un calcul ponctuel, coûteux en temps.

En pratique, le seul degré de liberté permettant d'améliorer la qualité du test, sans augmenter le risque de première espèce, consisterait à réduire la variance des distributions sous H_0 et H_1 . Ici, cela reviendrait à affiner l'estimation de la moyenne en augmentant l'effectif de la population : N (illustration 7).

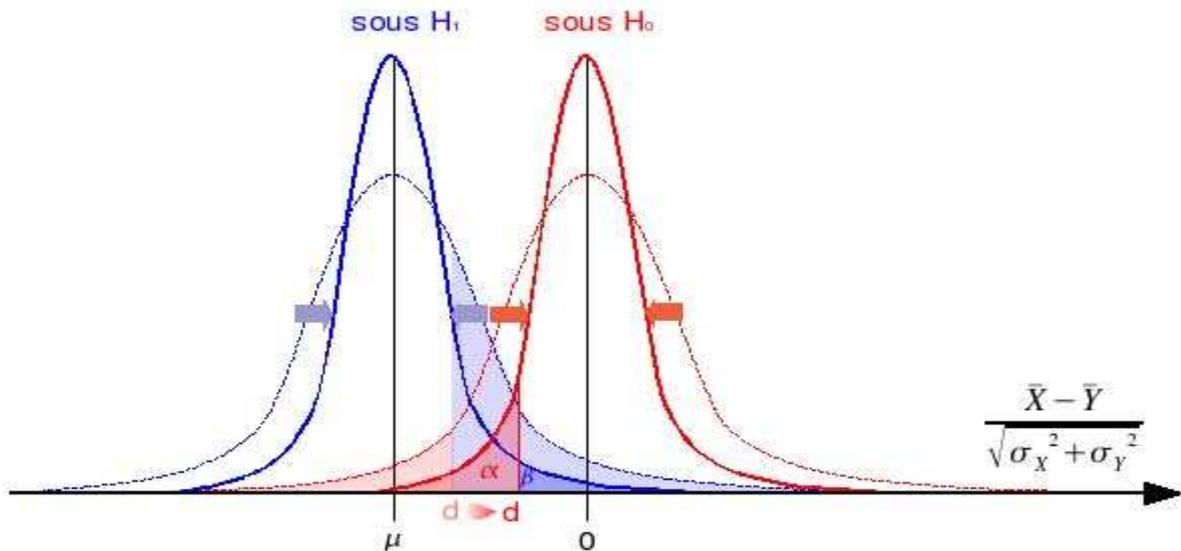


Illustration 7 : Distributions de $\frac{\bar{X} - \bar{Y}}{\sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}}$ sous hypothèse nulle H_0 et sous hypothèse alternative H_1 pour N augmentant. L'amélioration de la puissance du test est obtenue en réduisant le risque de seconde espèce β pour un risque de première espèce α défini constant.

Intuitivement on comprend qu'en augmentant le nombre d'observations (i.e. le nombre de k-effectifs d'étapes) on améliore l'estimation de la moyenne, c'est-à-dire la précision des deux calculs avec et sans l'approximation multigroupe. Il est alors plus facile de décider si le calcul multigroupe sous-estime ou non le k-effectif.

On fait alors un compromis entre l'amélioration de la puissance du test et le coût de la simulation de l'échantillon de taille N .

III.3. Conclusions

Les tests d'hypothèses en statistique permettent de gérer les risques liés à une prise de décision à partir d'un échantillon d'une population (décision qui comporte nécessairement des risques d'erreurs). Sur la base de considérations propres au domaine d'application de ces tests, le choix de l'hypothèse nulle est déterminant sur les risques qui sont contrôlés ou non. Il est également important de bien formuler l'hypothèse alternative en rapport avec le risque de deuxième espèce que l'on souhaite le plus petit possible.

La suppression du régime transitoire initial des calculs Monte-Carlo de criticité exploitera cet outil de décision pour valider ou non la stationnarité des séquences de k-effectifs d'étapes.

IV Environnement technique et modélisation des calculs Monte-Carlo de criticité

IV.1. Stationnarité des simulations Monte-Carlo de criticité : hypothèses

Les simulations Monte-Carlo de criticité itèrent la propagation d'une population de neutrons pour en estimer à chaque étape le facteur de multiplication : le k-effectif d'étape. Sans aborder une théorie, nous supposons l'existence d'un état stationnaire, défini comme un état d'équilibre stable où la population des neutrons simulés est un échantillon de la distribution réelle des neutrons du milieu. Dans cet état, les étapes de la simulation produisent une séquence de k-effectifs d'étapes dits également « stationnaires », issus d'une même loi de probabilité dont l'espérance est le k-effectif du système modélisé (voir la "Modélisation des séquences de k-effectifs d'étapes" décrite plus bas). En outre, nous supposons explicitement que le régime stationnaire est atteint avant la fin de la simulation, produisant alors - au moins parmi les dernières étapes - des k-effectifs d'étapes non contaminés par un régime transitoire. Sous cette hypothèse, on peut envisager la suppression du régime transitoire initial des k-effectifs d'étapes en post-traitement du calcul ("off-line processing", [BASS]).

Nous allons donc modéliser, implémenter, puis optimiser, une méthodologie de suppression du régime transitoire initial en post-traitement.

IV.2. Suppression du régime transitoire initial des k-effectifs d'étapes

Le régime transitoire ne contaminant que les premières étapes (hypothèse d'existence et de stabilité du régime stationnaire en temps fini), une procédure itérative supprime les étapes non stationnaires initiales de la séquence des k-effectifs d'étapes tant qu'un diagnostic de stationnarité n'est pas établi.

En contexte industriel, le critère d'arrêt des itérations dans les calculs Monte-Carlo de criticité est généralement défini par l'écart-type de l'estimation du k-effectif du système à atteindre, estimé empiriquement comme l'écart-type de la moyenne des k-effectifs d'étapes.

Cet écart-type est augmenté par la présence du biais des k-effectifs d'étapes transitoires. La suppression de ces étapes initiales conduit alors :

- à réduire la contamination de l'écart-type de l'estimation par le biais des étapes initiales,
- à augmenter l'écart-type de la moyenne faite sur un nombre réduit d'étapes.

Pour l'utilisateur du code Monte-Carlo de criticité, bien que le calcul ne soit plus biaisé, la précision peut apparaître légèrement dégradée par le post-traitement de suppression du transitoire (illustration 8).

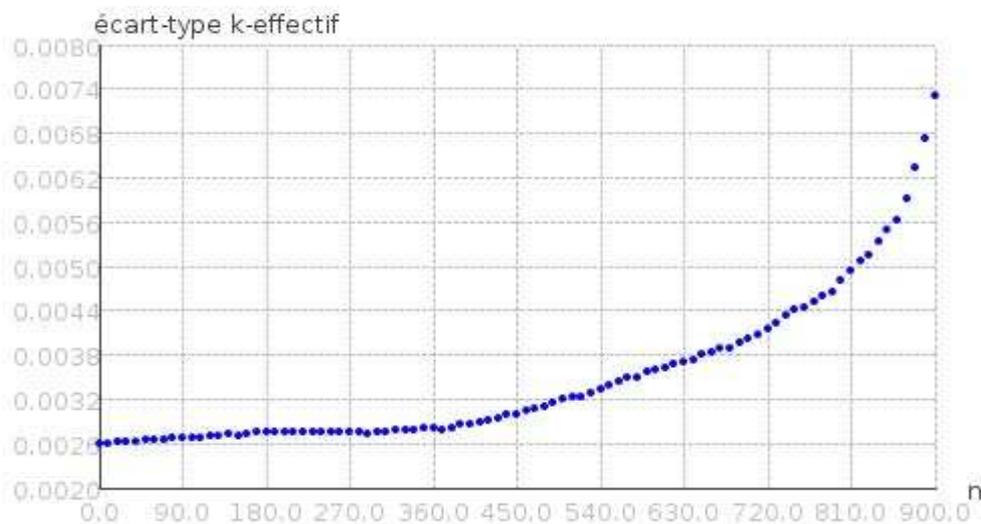
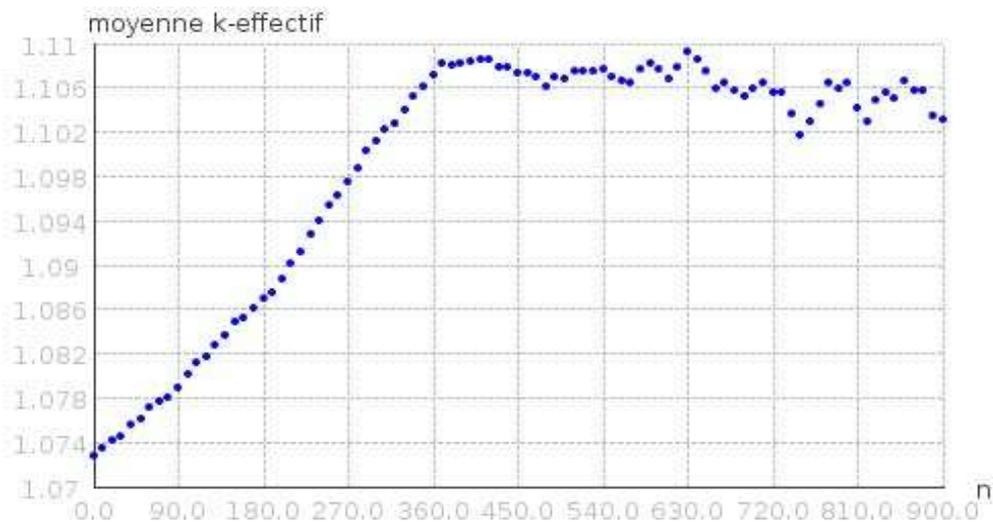


Illustration 8 : Benchmark OCDE n°4 : évolution du modèle estimé du k-effectif du système (moyenne et écart-type) en fonction du nombre d'étapes initiales supprimées.

Il importe donc que l'élimination de la totalité du régime transitoire ne conduise pas à supprimer à tort un trop grand nombre d'étapes non transitoires (sur-troncature).

Le risque de sur-troncature est directement lié au faux diagnostic de non stationnarité, c'est-à-dire à l'erreur de première espèce d'un quelconque test de stationnarité (où l'hypothèse nulle serait la stationnarité des k-effectifs d'étapes). Notons que le choix de cette hypothèse nulle est dicté par la considération des calculs Monte-Carlo de criticité : nous savons définir la stationnarité d'une séquence de k-effectifs d'étapes, en revanche les régimes transitoires sont très variables et dépendent de la configuration géométrico-chimique du calcul considéré. Nous avons donc choisi comme hypothèse nulle la stationnarité des k-effectifs d'étapes et comme hypothèse alternative une

hypothèse composite de non stationnarité incluant tous les régimes transitoires possibles. Ce choix implique donc que nous ne pourrions contrôler que le risque de rejet à tort de l'hypothèse de stationnarité (risque de sur-troncature), mais pas le risque d'acceptation à tort de l'hypothèse nulle de stationnarité (risque de sous-troncature : conservation à tort d'étapes contaminées par le transitoire).

Les différentes méthodes de suppression de transitoires seront paramétrées par différents risques de sur-troncature, puis leurs erreurs d'estimation de la longueur du transitoire seront comparées sur un ensemble de transitoires proches de ceux rencontrés en criticité. Finalement, ces méthodes seront appliquées à des séquences de k -effectifs d'étapes issues de calculs Monte-Carlo de criticité réels et leurs erreurs résiduelles d'estimation du k -effectif du système (comme moyenne des k -effectifs d'étapes restants) seront analysées.

IV.3. Modélisation des séquences de k -effectifs d'étapes

Le processus de génération aléatoire des différents k -effectifs d'étapes étant particulièrement complexe, nous allons adopter une modélisation simple basée sur des observations expérimentales pour optimiser et tester les différentes méthodes de suppression de régime transitoire.

Le retour d'expérience et l'analyse des séquences de k -effectifs d'étapes du code MORET nous conduisent ainsi à utiliser un processus gaussien autorégressif pour modéliser les k -effectifs d'étapes :

- **loi normale** : cette loi pour chaque k -effectif d'étapes peut être justifiée par le théorème central limite en modélisant le k -effectif d'étape comme une moyenne des contributions des P neutrons simulés (où P est de l'ordre de 10^3). En outre, si les neutrons simulés sont un P -échantillon de la distribution des neutrons réels (i.e. l'étape considérée est stationnaire), alors ces contributions ont pour espérance le k -effectif du système et leur variance dépend uniquement de la configuration géométrico-chimique du système. Finalement, la loi du k -effectif d'étape - moyenne de ces contributions - est donc gaussienne, et si l'étape est stationnaire, son espérance est alors le k -effectif du système, et sa variance dépend de la configuration géométrico-chimique et du nombre de neutrons P .
- **processus autorégressif** : l'échantillonnage des sites de naissance des neutrons d'une étape parmi les sites de collisions de l'étape précédente explique la présence de corrélation entre les étapes de la simulation. Des études statistiques ont montré la pertinence des modèles ARMA gaussiens [CHAJ], en particulier du modèle autorégressif d'ordre 1 (AR1) qui présente l'avantage d'être simple à ajuster et à interpréter.

Finalement, on modélise la séquence $K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ des N k -effectifs d'étapes stationnaires d'une simulation Monte-Carlo de criticité par un processus AR1 :

- $\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, k_{i+1} = k_{\text{effectif}} + \rho(k_i - k_{\text{effectif}}) + \epsilon_i$, (ϵ_i) étant un bruit blanc gaussien d'espérance nulle et de variance σ_ϵ^2 ,
- $k_1 \equiv LG_{k_{\text{effectif}}, \frac{\sigma_\epsilon^2}{1-\rho^2}}$.

Le régime transitoire initial d'un calcul Monte-Carlo de criticité résulte de l'évolution de la distribution des sites de naissances des neutrons simulés. En effet, le positionnement initial des neutrons défini par l'utilisateur n'étant pas a priori un échantillon de la distribution réelle (et inconnue) des neutrons, la distribution statistique des sites de naissances de chaque étape converge vers la distribution réelle des neutrons. La configuration géométrico-chimique et la distribution initiale des neutrons déterminent donc les caractéristiques du régime transitoire des k -effectifs d'étapes.

L'analyse de régimes transitoires des k -effectifs d'étapes issus de benchmarks de calculs Monte-Carlo de criticité [BAY] suggère le modèle de rampe abrupte $T = \{t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ suivant :

- pour $i \leq a, t_i = -A$,
- pour $i > a, t_i = 0$.

La simulation Monte-Carlo contaminée par un tel transitoire est alors la somme du processus stationnaire K et de cette composante déterministe T : $K + T = \{k_i + t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ (illustration 9).

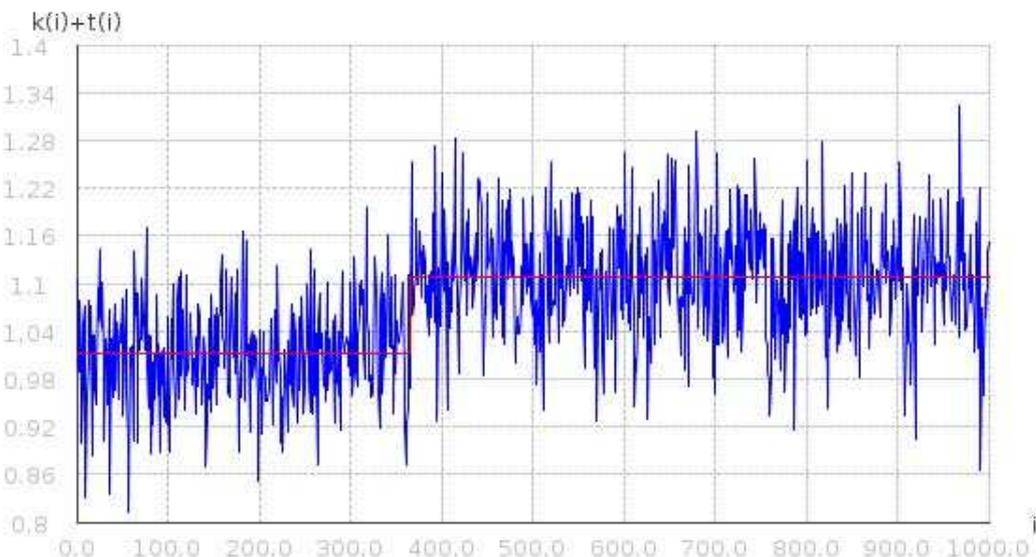


Illustration 9 : Benchmark OCDE n°4 : Séquence des k -effectifs d'étapes et composante transitoire déterministe estimée.

Ce modèle de transitoire "abrupt" [BASS] intègre plusieurs choix sous-jacents :

- l'hypothèse d'**existence d'un état d'équilibre instable** sur a étapes. Cet équilibre instable pourrait être un mode propre non fondamental de la chaîne de Markov sur l'espace de la population des neutrons ;
- la **migration instantanée** des neutrons vers l'état stationnaire après ces a étapes. En réalité, la configuration géométrico-chimique, la distribution initiale et le nombre des neutrons influent sur le nombre d'étapes réellement nécessaires à la migration des neutrons et sur la longueur de l'état d'équilibre instable. Si en réalité cette migration n'est pas instantanée, elle ne concerne généralement au plus que quelques dizaines d'étapes ;
- le modèle **gaussien autorégressif** de l'état transitoire (i.e. les a premières étapes) diffère uniquement par la moyenne. Implicitement, cela réduit la notion de régime transitoire à une variation de l'espérance des k-effectifs d'étapes. En pratique, une séquence réelle de k-effectifs d'étapes présente effectivement des modèles proches, en état d'équilibre instable ou stationnaire, ne différant sensiblement que par leurs espérances.

Cette modélisation du régime transitoire sera définie par les paramètres suivants :

- le **biais normalisé de l'espérance du k-effectif du système** : $\frac{a A}{\sigma \sqrt{N}}$, c'est-à-dire le quotient du biais $\frac{a A}{N}$ sur l'écart-type de l'estimation du k-effectif du système $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$, où σ^2 est la variance des k-effectifs d'étapes,
- le **longueur relative de contamination** : $\frac{a}{N}$.

Cette modélisation des séquences de k-effectifs d'étapes contaminés par un régime transitoire abrupt définit donc implicitement le régime transitoire comme une dérive constante d'amplitude A , de longueur finie a , sur l'espérance de la séquence des k-effectifs d'étapes. Les différentes méthodes de suppression du régime transitoire chercheront donc à détecter, puis tronquer, la partie ainsi contaminée de la séquence des k-effectifs d'étapes.

V Méthodologies de suppression du régime transitoire initial

Le cadre formel et les outils présentés précédemment vont maintenant être exploités dans la description de la méthodologie de suppression du régime transitoire initial de la séquence des k-effectifs d'étapes.

Nous commencerons par détailler la détection du transitoire initial utilisant des tests statistiques de stationnarité. Une première approche simple, utilisée actuellement dans les codes Monte-Carlo de criticité tel MORET, consiste à valider la normalité des k-effectifs d'étapes pris comme échantillon (test statistique de « conformité »). Puis, partant du concept de somme cumulée normalisée proposé par Schruben [SCHR1] (en fait sous la forme du « pont Brownien »), nous généraliserons cette seconde approche à différentes statistiques de comparaison d'échantillons. Enfin, les heuristiques de suppression du régime transitoire basée sur les précédents tests de stationnarité seront présentées. Les problématiques de mise en œuvre et de validation des déclinaisons de cette méthodologie seront abordées dans le chapitre suivant.

V.1. Détection du régime transitoire initial : test de stationnarité

La plupart des codes Monte-Carlo de criticité cherchent à valider les propriétés statistiques de la séquence des k-effectifs d'étapes pour l'estimation du k-effectif du système (moyenne de ces k-effectifs d'étapes). Une première approche consiste donc à vérifier que ces k-effectifs d'étapes, pris comme un échantillon, suivent bien la loi normale attendue [DEMA]. Cette approche est peu performante pour détecter un transitoire car souvent la proportion des k-effectifs d'étapes « contaminés » par le transitoire est relativement faible, et les tests statistiques d'ajustement utilisés sont peu efficaces pour détecter un tel transitoire. Par exemple, le code MORET inclut un test du χ^2 sur les six « estimateurs » du k-effectif (ces « estimateurs » au sens neutronique sont présentés dans la simulation Monte-Carlo de criticité du code MORET : Illustrations 3, 4 [DUPA]) permettant de valider l'hypothèse :

$$H_0 : \text{"Les k-effectifs d'étapes } \{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \text{ sont issus d'une loi normale"}$$

contre l'hypothèse alternative :

$$H_1 : \text{"Les k-effectifs d'étapes } \{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \text{ ne sont pas issus d'une loi normale"}$$

La formulation de ces hypothèses sera précisée ultérieurement pour prendre en compte la modélisation précédente (voir « Modélisation des séquences de k-effectifs d'étapes »).

Ces informations doivent ainsi conduire l'utilisateur à s'inquiéter de la validité de l'estimation du k-effectif.

La mise en évidence dans les données de sorties du code MORET de cet indicateur témoigne de l'attention portée à la problématique de validité du calcul, dont la stationnarité des k-effectifs d'étapes est une condition importante.

Parmi quelques codes Monte-Carlo de criticité industriels, nous pouvons lister les méthodes de détection de non stationnarité utilisées :

Code	Organisation	Condition d'acceptation de la stationnarité
MORET	IRSN Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire	Test de normalité : χ^2 sur les six estimateurs du k-effectif.
MCNP	LANL Los Alamos National Laboratory	Test de normalité et comparaison des moyennes des k-effectifs d'étapes sur la première et deuxième moitié des étapes.
VIM	ANL Argonne National Laboratory	La différence des moyennes des k-effectifs d'étapes sur la première et deuxième moitié des étapes doit être inférieure à 2 écart-type du k-effectif estimé.
KENO	ORNL Oak Ridge National Laboratory	Test de normalité : χ^2 sur un seul estimateur du k-effectif.

Plus précisément, le test du χ^2 implémenté dans le code MORET utilise les 12 classes suivantes :

$$\begin{aligned}
 c_1 &=]-\infty, \hat{\mu} - 5\hat{\sigma}] & c_2 &= [\hat{\mu} - 5\hat{\sigma}, \hat{\mu} - 4\hat{\sigma}] & c_3 &= [\hat{\mu} - 4\hat{\sigma}, \hat{\mu} - 3\hat{\sigma}] & c_4 &= [\hat{\mu} - 3\hat{\sigma}, \hat{\mu} - 2\hat{\sigma}] \\
 c_5 &= [\hat{\mu} - 2\hat{\sigma}, \hat{\mu} - \hat{\sigma}] & c_6 &= [\hat{\mu} - \hat{\sigma}, \hat{\mu}] & c_7 &= [\hat{\mu}, \hat{\mu} + \hat{\sigma}] & c_8 &= [\hat{\mu} + \hat{\sigma}, \hat{\mu} + 2\hat{\sigma}] \\
 c_9 &= [\hat{\mu} + 2\hat{\sigma}, \hat{\mu} + 3\hat{\sigma}] & c_{10} &= [\hat{\mu} + 3\hat{\sigma}, \hat{\mu} + 4\hat{\sigma}] & c_{11} &= [\hat{\mu} + 4\hat{\sigma}, \hat{\mu} + 5\hat{\sigma}] & c_{12} &= [\hat{\mu} + 5\hat{\sigma}, +\infty[
 \end{aligned}$$

dont les probabilités théoriques sous l'hypothèse H_0 sont estimées pour $j \in \llbracket 1, 12 \rrbracket$ par

$$p_j = \int_{c_j} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hat{\sigma}^2}} e^{-\frac{(k-\hat{\mu})^2}{2\hat{\sigma}^2}} dk, \text{ où } \hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (k_i - \hat{\mu})^2 \text{ et } \hat{\sigma} = \sqrt{\hat{\sigma}^2}.$$

La mesure $D^2 = \sum_{j=1}^{12} \frac{(N p_j - N_j)^2}{N p_j}$ où $N_j = \text{card}(\{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \in c_j)$ est alors testée comme une

variable du χ^2 : on rejette H_0 si D^2 dépasse le quantile à 95 % du χ_d^2 pour $d=12-3=9$ degrés de liberté, soit 16.919.

Note : les conditions d'applications exactes du test du χ^2 ne sont pas réunies dans cette implémentation, cette description n'est donnée ici qu'à titre d'information.

En pratique, le résultat de ce test est accessible dans le fichier "listing" et le fichier "graph" produits en sortie du code MORET (texte 1, illustration 10).

Propagation des neutrons dans la sphere de rayon (n+2)LPM (avec LPM = 0.654)

Estimateur individuel de plus faible ecart type a la fin du calcul : BILAN-CHOC

TEST KHI2 - L'hypothese d'une distribution normale est rejete

Valeur du KHI2 = 21.14 - Probabilite = 1.3%

Keff etape

Theorique

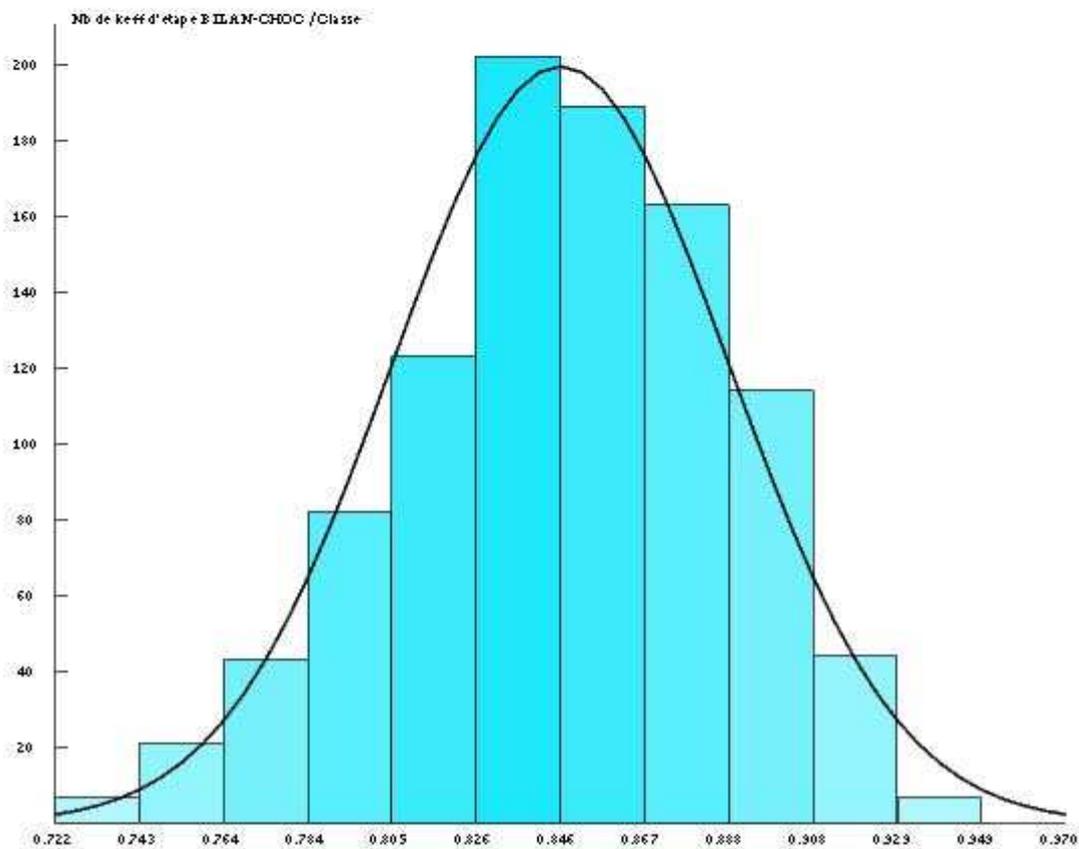
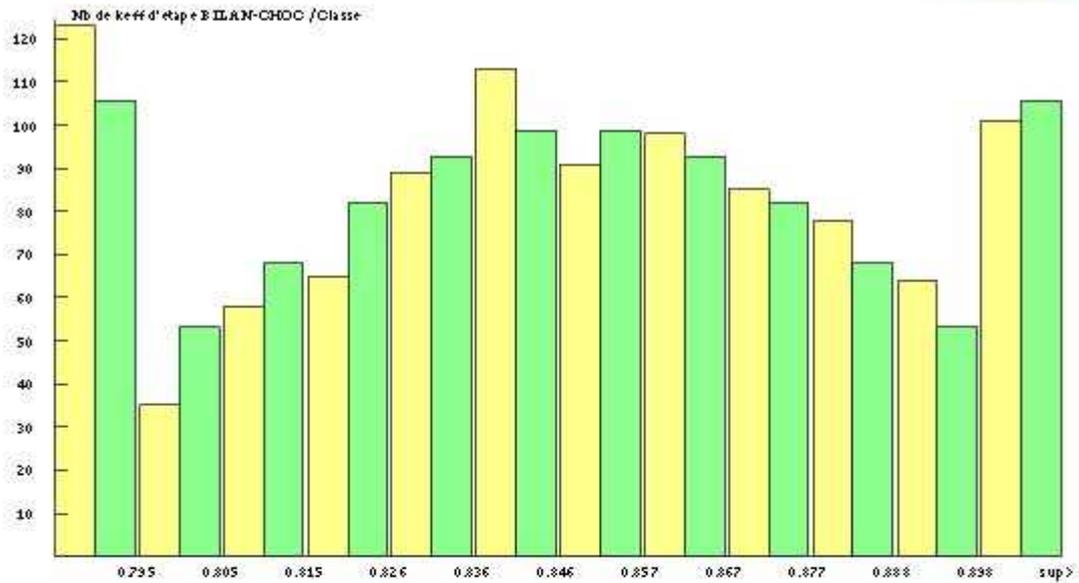


Illustration 10 : Extrait d'un fichier "graph" du code MORET concernant le test du χ^2 .

TEST DE NORMALITE
DE LA DISTRIBUTION DES KEFF D'ETAPE
PAR LA METHODE DU KHI2
POUR CHAQUE ESTIMATEUR INDIVIDUEL

Le test du Khi2, effectue dans MORET, teste la vraisemblance de l'hypothese selon laquelle les keff d'etape doivent etre statistiquement distribues selon une loi normale, si les sources sont correctement placees dans les milieux fissiles en debut de chaque etape.

Le Khi2, calcule dans MORET, compare les frequences des valeurs de keff d'etape reparties en 12 classes aux frequences theoriques attendues (basees sur l'hypothese d'une repartition gaussienne ideale de l'echantillon des valeurs de keff d'etape).

La valeur du Khi2 :

- est nulle lorsque les frequences observees sont egales aux frequences attendues, c'est-à-dire lorsqu'il y a concordance absolue entre la distribution observee et la distribution attendue ;
- est d'autant plus grande que les ecart entre les frequences observees et attendues sont grands.

Pour des echantillons de taille suffisamment grande, issus d'une loi normale, la probabilite que le Khi2 obtenu soit superieur a une valeur x est connue et tabulee en fonction de x et du nombre de degres de liberte. Bien que la probabilite d'obtenir une valeur de Khi2 elevee soit non nulle, les plus faibles valeurs sont les plus probables.

Par exemple, il y a seulement 5 % de chance que la valeur du Khi2 soit superieure a 16.919 pour un echantillon issu d'une loi normale, de moyenne et d'ecart type fixes, reparti en 12 classes (9 degres de liberte). Comme on attend que la distribution des keff d'etape soit normale, on attend que le Khi2 de l'echantillon des keff d'etape ne soit pas "anormalement" eleve.

De facon arbitraire on considere que les valeurs de Khi2 superieures a 16.919 sont "anormalement" elevees car il y a moins de 5 % de chance qu'un echantillon issu d'une loi normale conduise a de telles valeurs.

Le test du Khi2 est un critere d'aide a la decision permettant de trancher entre 2 hypotheses :

H0: l'echantillon des keff d'etape est issu d'une loi gaussienne.

H1: l'echantillon des keff d'etape n'est pas issu d'une loi gaussienne.

Il consiste a fixer un seuil ARBITRAIRE (5 %), tel que lorsque la probabilite associee a la valeur du Khi2 :

- est superieure au SEUIL, H0 est consideree comme PLAUSIBLE (mais non prouvee) et est donc ACCEPTEE ;
- est inferieure au SEUIL, H0 est consideree comme PEU PLAUSIBLE et est donc REJETEE au profit de H1.

Il existe deux RISQUES :

- le risque ALPHA de rejeter a tort l'hypothese de normalite (egal au SEUIL arbitraire de 5 %) ;
- le risque BETA d'accepter a tort l'hypothese de normalite.

Plus le SEUIL (ALPHA) est faible et plus BETA est grand : aucun test n'est fiable a 100 % ...

	SOURCE CHOC	SOURCE CORDE	SOURCE ABSOR.	BILAN CHOC	BILAN CORDE	BILAN ABSOR.	NB ESTIM. NORMAUX
Valeur du KHI2	5.991	7.682	8.341	21.145	25.874	8.341	
Proba. associee	74.1 %	56.7 %	50.0 %	1.3 %	0.3 %	50.0 %	
Hypothese normalite	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	rejete	acceptee	4 / 6

TEST DE NORMALITE
APRES SUPPRESSION DES ETAPES ACTIVES INITIALES

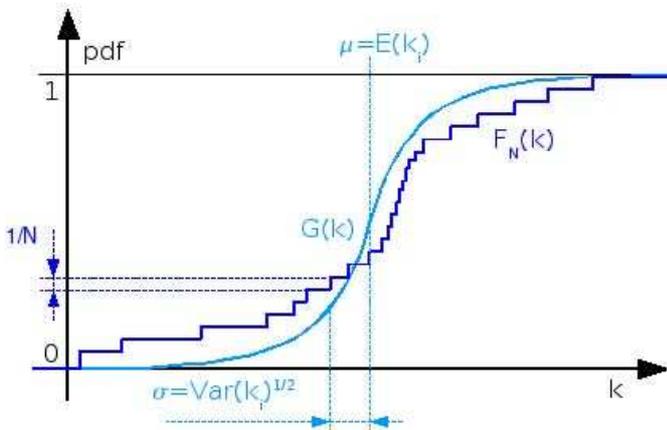
NB ETAPES SUPPRIM.	TEST KHI2	SOURCE CHOC	SOURCE CORDE	SOURCE ABSOR.	BILAN CHOC	BILAN CORDE	BILAN ABSOR.	NB ESTIM. NORMAUX
0	KHI2	5.991	7.682	8.341	21.145	25.874	8.341	
	Proba.	74.1 %	56.7 %	50.0 %	1.3 %	0.3 %	50.0 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	rejete	acceptee	4 / 6
100	KHI2	5.820	6.988	6.600	16.082	20.115	6.600	
	Proba.	75.8 %	63.8 %	67.9 %	6.9 %	1.9 %	67.9 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	acceptee	5 / 6
200	KHI2	8.546	8.216	4.518	14.005	18.606	4.518	
	Proba.	48.1 %	51.3 %	87.1 %	12.8 %	3.0 %	87.1 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	acceptee	5 / 6
300	KHI2	8.633	8.968	1.594	11.610	15.006	1.594	
	Proba.	47.3 %	44.2 %	99.6 %	23.8 %	9.3 %	99.6 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	6 / 6
400	KHI2	9.041	9.920	1.913	11.643	18.718	1.913	
	Proba.	43.5 %	35.9 %	99.2 %	23.6 %	2.9 %	99.2 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	acceptee	5 / 6
500	KHI2	5.023	4.722	3.737	13.599	20.365	3.737	
	Proba.	82.9 %	85.4 %	92.6 %	14.4 %	1.7 %	92.6 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	acceptee	5 / 6
600	KHI2	5.886	3.260	4.011	18.325	26.860	4.011	
	Proba.	75.1 %	95.3 %	90.9 %	3.3 %	0.2 %	90.9 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	rejete	acceptee	4 / 6
700	KHI2	7.378	9.893	5.468	17.755	27.587	5.468	
	Proba.	59.8 %	36.1 %	79.2 %	4.0 %	0.1 %	79.2 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	rejete	acceptee	4 / 6
800	KHI2	16.181	7.617	4.588	14.655	23.806	4.588	
	Proba.	6.7 %	57.4 %	86.5 %	10.1 %	0.5 %	86.5 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	acceptee	acceptee	rejete	acceptee	5 / 6
900	KHI2	4.880	5.267	21.114	13.507	12.073	21.114	
	Proba.	84.1 %	80.9 %	1.3 %	14.8 %	21.0 %	1.3 %	
	Normalite	acceptee	acceptee	rejete	acceptee	acceptee	rejete	4 / 6

Texte 1 : Extrait du fichier "listing" en sortie du code MORET concernant le test du χ^2 .

V.1.1. Conformité d'échantillon

Selon la même approche de contrôle de la conformité (ou d'ajustement) à une loi normale de l'échantillon des k-effectifs d'étapes, d'autres variables de décision peuvent être envisagées [SAPO] en prenant les mêmes hypothèses de test de la normalité de la distribution des k-effectifs d'étapes $\{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$: les statistiques de Kolmogorov et Cramer von Mises.

Pour ces 2 statistiques, on pose F_N la fonction de répartition empirique de l'échantillon des N k-effectifs d'étapes, et G la distribution gaussienne théorique des k-effectifs d'étapes (illustration 11). En pratique, les paramètres de G seront estimés :



- moyenne $\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i$,
 - écart type $\hat{\sigma} = \sqrt{\hat{\sigma}^2}$,
- avec $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (k_i - \hat{\mu})^2$.

Illustration 11 : Fonctions de répartition empirique F_N et théorique G des k-effectifs d'étapes.

Nous présentons plus précisément ces deux statistiques.

V.1.1.1. La statistique de Kolmogorov

La variable discriminante testée est l'écart maximal entre la fonction de répartition empirique F_N et la fonction de répartition théorique gaussienne G . On sait que la variable $\sqrt{N} D_N = \sqrt{N} \sup |F_N(k) - G(k)|$ suit asymptotiquement la loi de Kolmogorov sous H_0 (illustration 12).

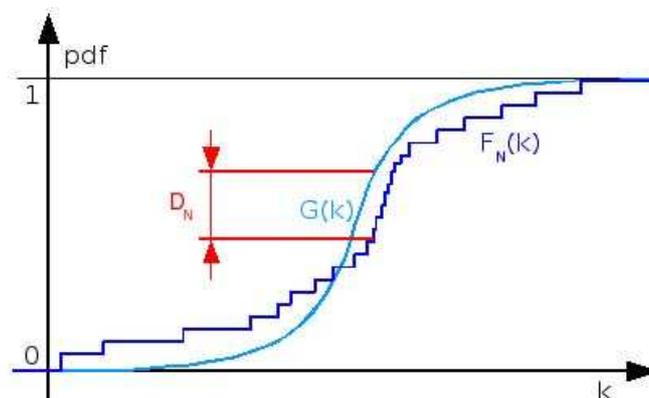


Illustration 12: Statistique de Kolmogorov.

V.1.1.2. La statistique de Cramer von Mises

La variable discriminante testée est l'écart quadratique cumulé entre la fonction de répartition empirique F_N et la fonction de répartition théorique G gaussienne. On teste la variable

$$N \omega_N^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (F_N(k) - G(k))^2 dG(k) \quad \text{qui suit la loi de Cramer von Mises sous } H_0 \text{ (illustration 13).}$$

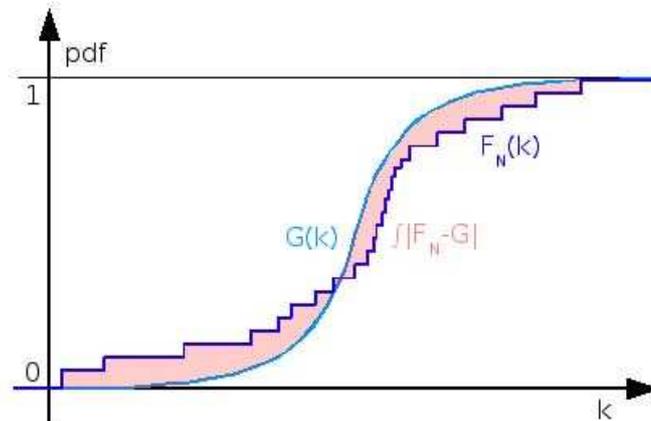


Illustration 13 : Statistique de Cramer von Mises.

Les performances de détection de stationnarité basée sur les trois statistiques d'ajustement suivantes :

- statistique χ^2 : D^2 ,
- statistique de Kolmogorov : $\sqrt{N} D_N$,
- statistique de Cramer von Mises : $N \omega_N^2$,

seront comparées aux autres méthodes proposées par la suite. En particulier, l'utilisation du test du χ^2 tel qu'implémenté dans le code MORET donnera un ordre de grandeur de l'efficacité des méthodes actuellement utilisées dans les codes Monte-Carlo de criticité.

V.1.2. Sommes cumulées normalisées (vers le pont brownien)

Outre cette tentative de détection du transitoire initial par des tests statistiques de conformité de la population des k-effectifs d'étapes (χ^2 , Kolmogorov, Cramer von Mises), une méthode de détection du transitoire initial proposée par Schruben [SCHR2] est basée sur la

transformation suivante (technique de sommes cumulées) $\{b_{0\ n}\}_{0 \leq n \leq N}$ où $b_{0\ n} = \frac{n(\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{1,N})}{\tau \sqrt{N}}$

, avec les notations suivantes :

- $\hat{\mu}_{1,n}$ désigne la moyenne empirique du sous-échantillon $K_{1,n} = \{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$,
- $\hat{\mu}_{1,N}$ désigne la moyenne empirique de l'échantillon complet $K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$,
- $\frac{\tau^2}{N}$ désigne alors la variance asymptotique de l'estimateur de la moyenne de la séquence K .

Ce nouveau processus, une fois normalisée en temps $\hat{B}_0 = \left\{ B_0 \left(\frac{n}{N} \right) \right\}_{0 \leq n/N \leq 1}$ où $B_0 \left(\frac{n}{N} \right) = b_{0\ n}$

et sous certaines hypothèses assez générales [BILL], converge vers le pont brownien.

Ce dernier peut être défini de la manière suivante : $B_0(t) = W_t - tW_1$ où W désigne le mouvement brownien standard (ou processus de Wiener standard) (illustrations 14, 15).

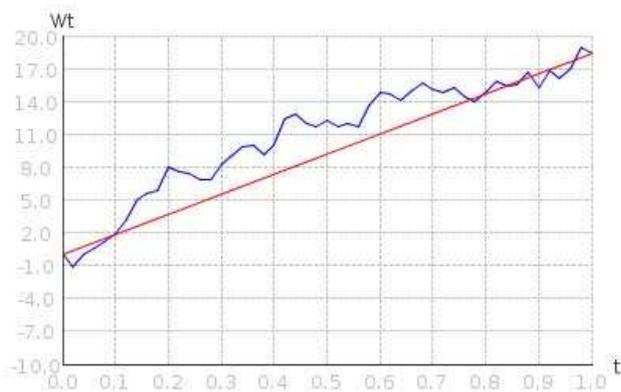


Illustration 14: Mouvement brownien.



Illustration 15: pont brownien.

Le pont brownien est aussi le processus gaussien de caractéristiques suivantes :

- $B_0(0)=0, B_0(1)=0$ (d'où l'appellation de "pont"),
- $\forall t \in [0,1], E(B_0(t))=0$,
- $\forall t \in [0,1], Var(B_0(t))=t(1-t)$,
- $\forall s \in [0,1], t \in [0,1], Cov(B_0(s), B_0(t))=min\{s, t\}(1-max\{s, t\})$.

En outre, le processus empirique $\left\{ \hat{B}_0\left(\frac{n}{N}\right) \right\}_{0 \leq \frac{n}{N} \leq 1}$ présente la même "régularité" que le pont brownien lorsque la séquence des k-effectifs d'étapes est stationnaire, et une "singularité" au voisinage de $n = a$ dans le cas d'une séquence des k-effectifs d'étapes contaminée par un transitoire de longueur a (illustrations 16, 17).

Différents auteurs suggèrent d'utiliser les statistiques suivantes pour tester la stationnarité [RICH1]:

- $\int_0^1 B_0(t)^2 dt$ convergeant vers une loi de Cramer von Mises [HEID],
- $\int_0^1 \frac{B_0(t)^2}{t(1-t)} dt$ convergeant vers une loi d'Anderson Darling [HEID],
- $sup\{B_0(t): 0 \leq t \leq 1\}$ et $inf\{B_0(t): 0 \leq t \leq 1\}$ convergeant vers une loi de Kolmogorov-Smirnov [VASS],
- $\frac{B_0(t^+)^2}{t^+(1-t^+)}$ où $B_0(t^+) = sup\{B_0(t): 0 \leq t \leq 1\}$ et $\frac{B_0(t^-)^2}{t^-(1-t^-)}$ où $B_0(t^-) = inf\{B_0(t): 0 \leq t \leq 1\}$ convergeant vers une loi du χ^2 à 3 degrés de liberté χ_3^2 [SCHR1],
- $\frac{B_0(t^+)}{-B_0(t^-)}$ et $\frac{-B_0(t^-)}{B_0(t^+)}$ convergeant vers une loi de fonction de répartition donnée par

l'expression $F(r) = 1 - \frac{\pi r}{(1+r)^2} \left(\frac{1+r}{\pi} - \cot\left(\frac{\pi}{1+r}\right) \right)$ [BAY].

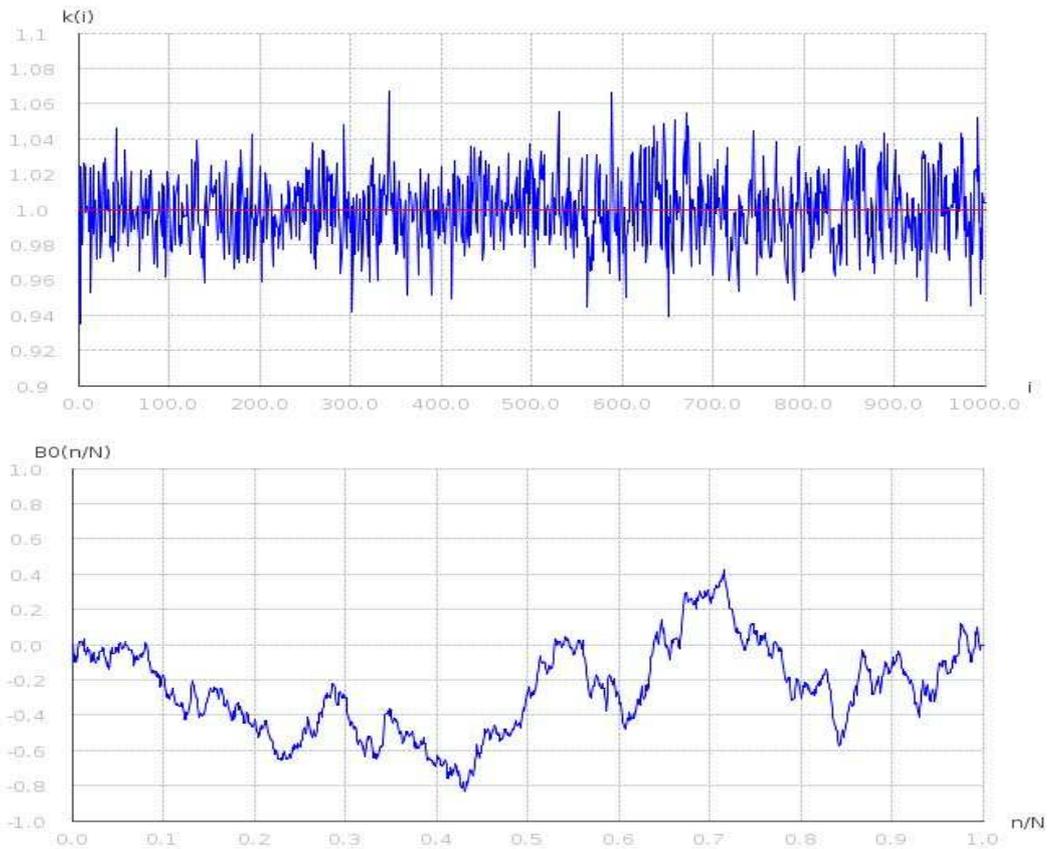


Illustration 16 : Séquence et pont brownien de k -effectifs d'étapes stationnaires.

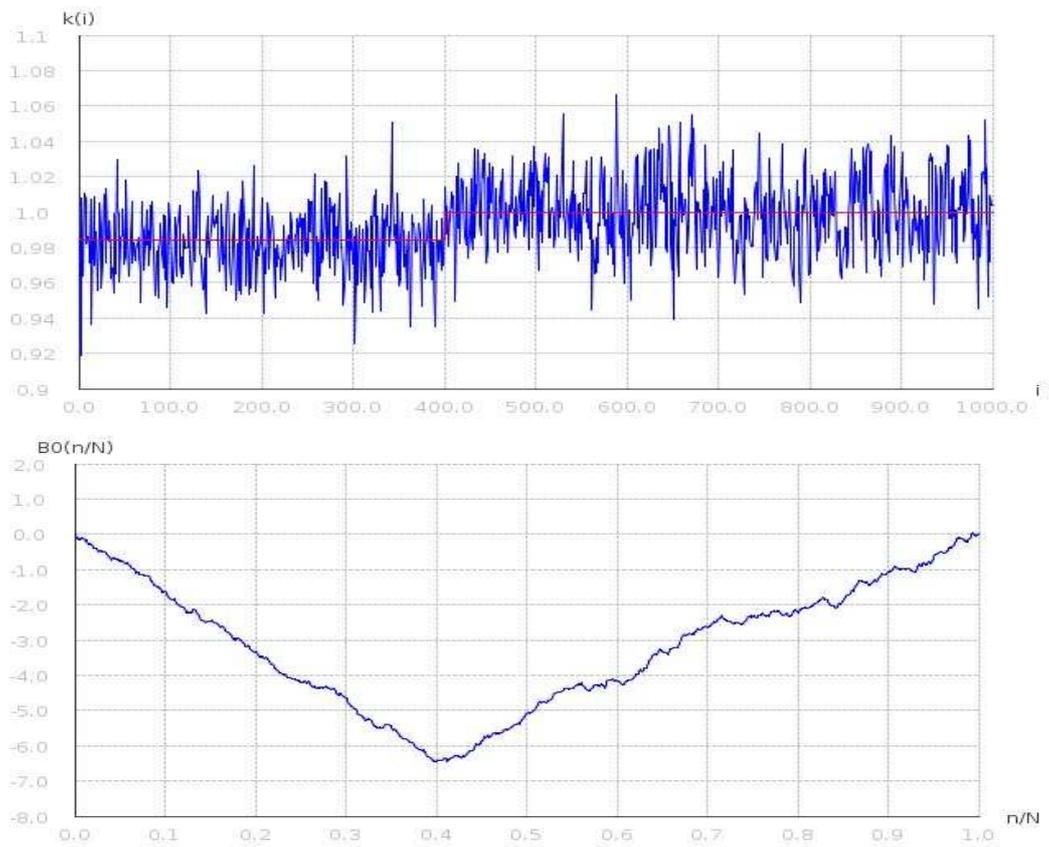


Illustration 17 : Séquence et pont brownien de k -effectifs d'étapes contaminés par un régime transitoire initial de 400 étapes.

Ces variables présentent des distributions asymptotiques connues mais pas nécessairement exploitables car les séquences de k-effectifs peuvent être de longueur variable (quelques dizaines à plusieurs milliers d'étapes) et les statistiques suggérées ne suivent alors pas la distribution asymptotique théorique donnée. Toutefois, ces variables de décision seraient quand même pertinentes pour effectuer le test de stationnarité à condition d'utiliser des distributions tabulées sur des séquences de k-effectifs d'étapes stationnaires.

Nous remarquons que le pont brownien caractérise différemment les transitoires croissants et les transitoires décroissants. N'ayant pas d'hypothèses a priori sur la monotonie du transitoire à détecter, nous nous intéresserons à des tests bilatéraux.

Par abus de langage, nous désignerons dans la suite par « pont brownien » le processus

$$B = \{b_n\}_{0 \leq n \leq N} \quad \text{où} \quad b_n = \frac{n(\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{1,N})}{\hat{\sigma} \sqrt{N}} \quad (\text{illustrations 18, 19 où } \hat{\sigma}^2 \text{ est l'estimateur usuel de la}$$

variance). Dans le cas du modèle AR1 présenté précédemment, ce processus est asymptotiquement

un pont brownien au facteur multiplicatif près $\sqrt{\frac{1+\rho}{1-\rho}}$.

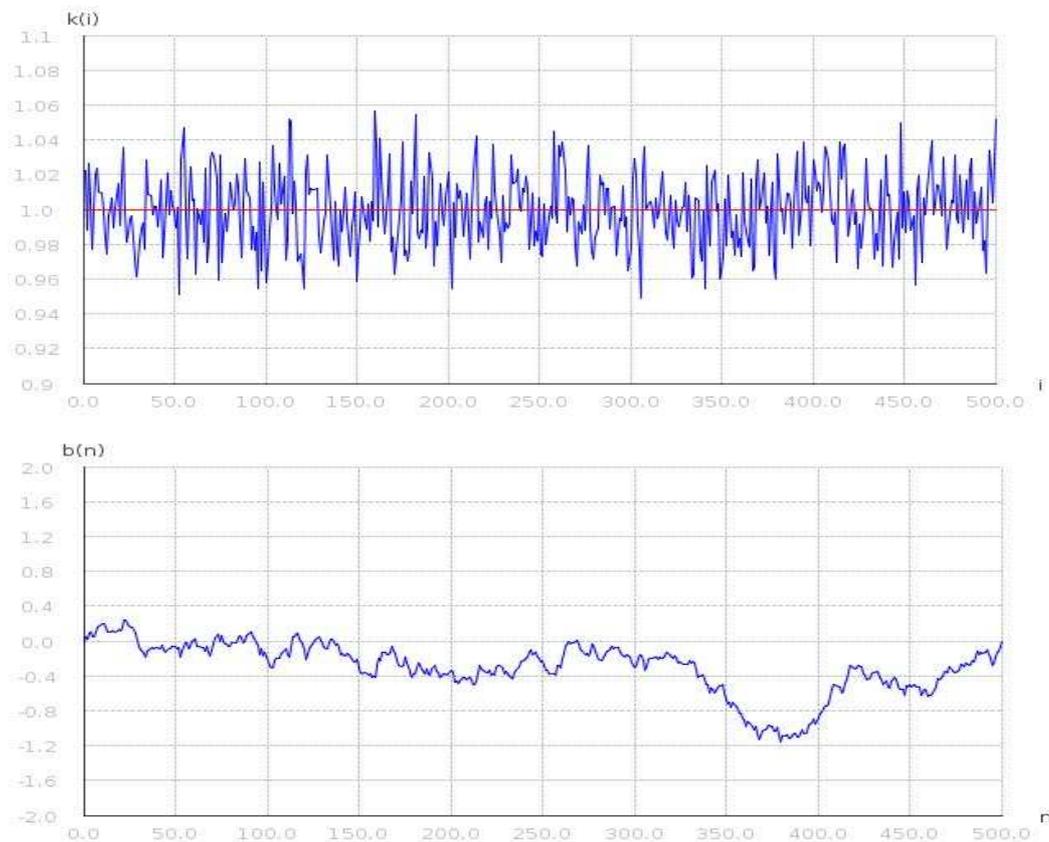


Illustration 18 : Séquence et pont brownien de k -effectifs d'étapes stationnaires.

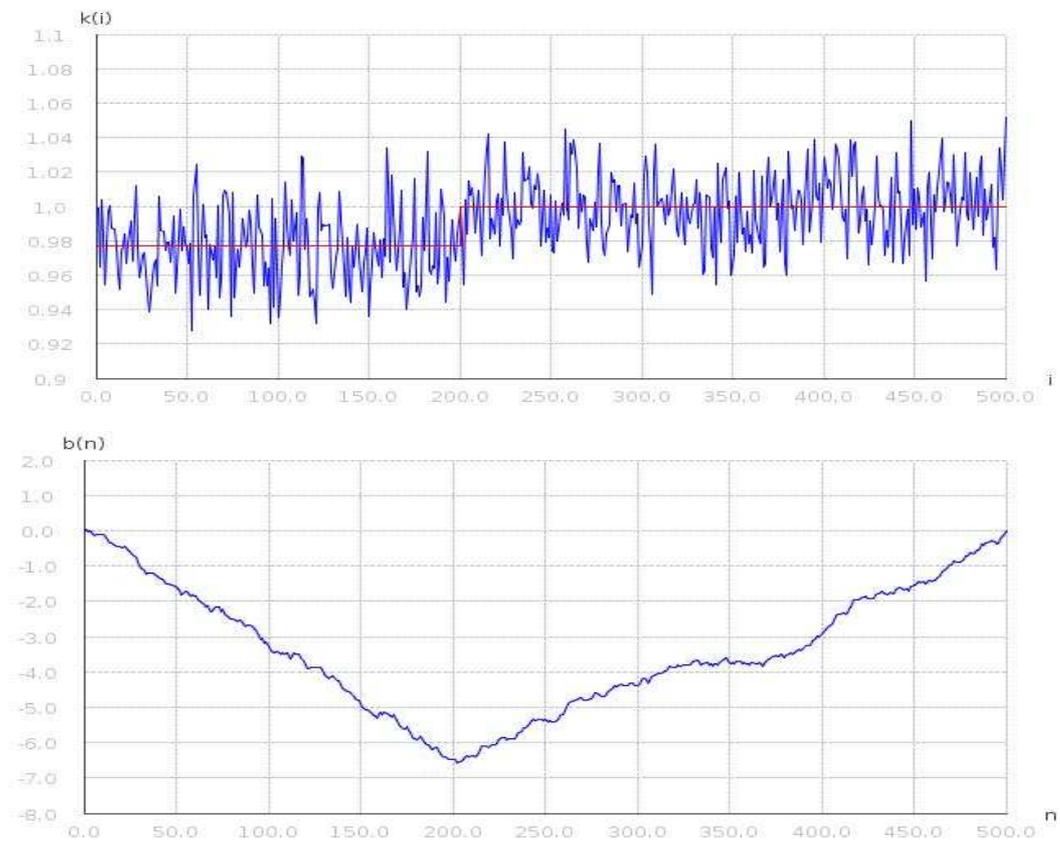


Illustration 19 : Séquence et pont brownien de k -effectifs d'étapes contaminés par un transitoire initial de 200 étapes.

Finalement, nous allons utiliser les variables de décision suivantes - dont certaines sont inspirées des précédentes statistiques du pont brownien « théorique » - afin d'être aussi exhaustif que possible dans notre comparaison de l'efficacité des tests de stationnarité [RICH2] :

- statistique de l'extremum : $M_B = \sup\{|b_n| : 0 \leq n \leq N\}$,
- statistique du log-vraisemblance de l'extremum : $LLM_B = \frac{b_{n^*}^2}{\frac{n^*}{N}(1-\frac{n^*}{N})}$ où
 $b_{n^*} = \sup\{|b_n| : 0 \leq n \leq N\}$,
- statistique de la moyenne : $E_B = |\bar{B}|$ avec $\bar{B} = \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N b_n$,
- statistique de la variance : $S_B^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N (b_n - \bar{B})^2$,
- statistique de l'autocovariance : $arS_B^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N (b_n - \bar{B})(b_{n+1} - \bar{B})$,
- statistique de la moyenne des log-vraisemblances : $LL_B = \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \frac{b_n^2}{\frac{n}{N}(1-\frac{n}{N})}$,
- statistique du ratio des extrema :

$$RM_B = \sup \left\{ \frac{\sup\{b_n : 0 \leq n \leq N\}}{-\inf\{b_n : 0 \leq n \leq N\}}, \frac{-\inf\{b_n : 0 \leq n \leq N\}}{\sup\{b_n : 0 \leq n \leq N\}} \right\} ,$$

- statistique du ratio des log-vraisemblance d'extrema :

$$RLLM_B = \sup \left(\frac{\frac{b_{n^+}^2}{\frac{n^+}{N}(1-\frac{n^+}{N})}}{\frac{b_{n^-}^2}{\frac{n^-}{N}(1-\frac{n^-}{N})}}, \frac{\frac{b_{n^-}^2}{\frac{n^-}{N}(1-\frac{n^-}{N})}}{\frac{b_{n^+}^2}{\frac{n^+}{N}(1-\frac{n^+}{N})}} \right) \quad \begin{array}{l} \text{où } b_{n^-} = \inf\{b_n : 0 \leq n \leq N\} \\ \text{et } b_{n^+} = \sup\{b_n : 0 \leq n \leq N\} . \end{array}$$

Toutes ces variables de décision seront tabulées sous l'hypothèse de stationnarité H_0 en fonction des propriétés de la séquence des k-effectifs d'étapes pour construire autant de tests de stationnarité.

V.1.3. Ponts d'homogénéité de sous-échantillons

Le processus empirique B peut être vu comme une suite de variables de décision $\frac{n(\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{1,N})}{\sigma \sqrt{N}}$.

Cette suite quantifie de manière dynamique un écart entre la moyenne du sous-échantillon initial $\hat{\mu}_{1,n}$ et la moyenne de l'échantillon $\hat{\mu}_{1,N}$. Dans le même esprit, nous essayons de construire des processus avec d'autres statistiques classiques de comparaison d'échantillons [UEKI1].

V.1.3.1. Statistiques d'homogénéité des sous-échantillons

On peut ainsi tenter de détecter la présence d'un transitoire par comparaison du sous-échantillon initial (supposé transitoire) $\{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ et du sous-échantillon final (supposé stationnaire) $\{k_i\}_{n < i \leq N}$.

Par exemple, pour une longueur de transitoire n donnée, la statistique de comparaison d'échantillons de Student [SAPO] peut devenir une variable pour décider si le sous-échantillon initial $\{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ est de même loi que le sous-échantillon final $\{k_i\}_{n < i \leq N}$ (illustration 20). On compare ces deux échantillons par une évaluation de leur "homogénéité".

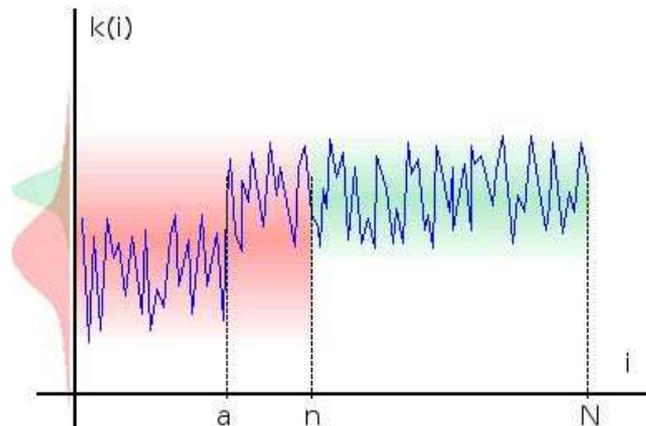


Illustration 20 : Comparaison des échantillons $\{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ et $\{k_i\}_{n < i \leq N}$.

On définit l'échantillon des k -effectifs d'étapes de l'étape $n1$ à l'étape $n2$: $K_{n1, n2} = \{k_i\}_{n1 \leq i \leq n2}$,

ainsi que les estimateurs de la moyenne $\hat{\mu}_{n1, n2} = \frac{1}{n2 - n1 + 1} \sum_{i=n1}^{n2} k_i$ et de la variance

$$\hat{\sigma}_{n1, n2}^2 = \frac{1}{n2 - n1} \sum_{i=n1}^{n2} (k_i - \hat{\mu}_{n1, n2})^2.$$

On considère alors :

- l'échantillon initial des n premiers k -effectifs d'étapes : $K_{1,n} = \{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ de moyenne empirique $\hat{\mu}_{1,n}$ et de variance empirique $\hat{\sigma}_{1,n}^2$,
- l'échantillon final des $N-n$ derniers k -effectifs d'étapes : $K_{n+1,N} = \{k_i\}_{n+1 \leq i \leq N}$ de moyenne empirique $\hat{\mu}_{n+1,N}$ et de variance empirique $\hat{\sigma}_{n+1,N}^2$,
- l'échantillon des N k -effectifs d'étapes : $K_{1,N} = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ de moyenne empirique $\hat{\mu}_{1,N}$ et de variance empirique $\hat{\sigma}_{1,N}^2$.

La statistique de Student

La variable de décision est la différence réduite des moyennes empiriques du sous-échantillon initial $K_{1,n}$ et du sous-échantillon final $K_{n+1,N}$, $\forall n \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$ (illustration 21) :

$$\sqrt{N-2} \frac{\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{n+1,N}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) \hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2 \right)}} .$$

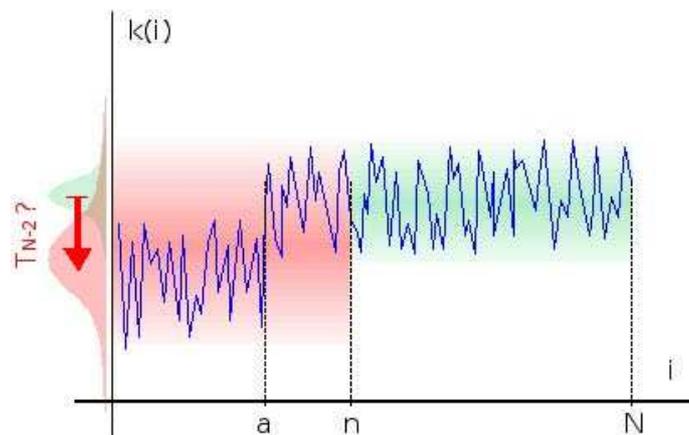


Illustration 21 : Différence réduite des moyennes empiriques du sous-échantillon initial $K_{1,n}$ et du sous-échantillon final $K_{n+1,N}$.

Pour deux sous-échantillons indépendants, cette statistique est asymptotiquement une variable de Student T_{N-2} .

Vraisemblance d'échantillons

En combinant les approches de contrôle de conformité et d'homogénéité, l'hypothèse de normalité des k-effectifs d'étapes permet aussi de comparer les vraisemblances de l'échantillon modélisé comme stationnaire $\{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ et de ce même échantillon supposé contaminé par un régime transitoire de longueur définie n . La vraisemblance de la partie transitoire de l'échantillon contaminé est calculée en supposant également la normalité de ce sous-échantillon (illustration 22).

En pratique, si l'échantillon total est stationnaire, le ratio des vraisemblances de l'échantillon modélisé d'une part comme stationnaire et d'autre part comme contaminé par un régime transitoire devrait être proche de 1. Inversement, si la longueur du transitoire supposé est correcte, la vraisemblance de l'échantillon modélisé comme stationnaire doit être plus faible que la vraisemblance de l'échantillon modélisé comme contaminé. Dans ce dernier cas, le ratio des vraisemblances devrait être très différent de 1.

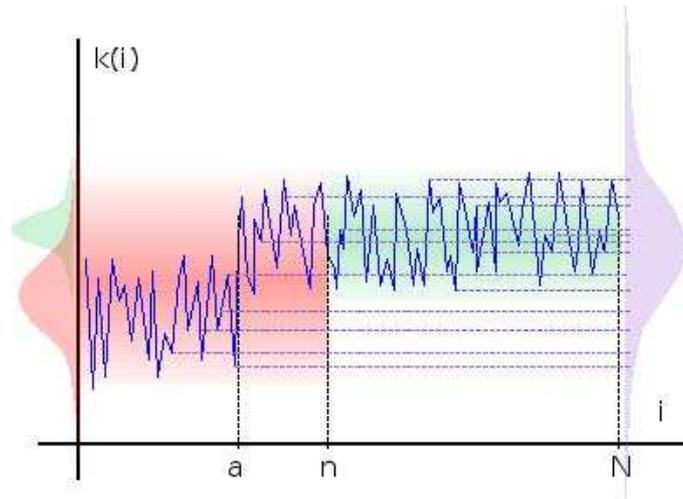


Illustration 22 : Vraisemblances du sous-échantillon initial $K_{1,n}$, du sous-échantillon final $K_{n+1,N}$ et de l'échantillon complet $K_{1,N}$.

On note $p_{n1,n2}$ la densité de probabilité (ou vraisemblance) de l'échantillon des k-effectifs d'étapes de $n1$ à $n2$: $K_{n1,n2} = \{k_i\}_{n1 \leq i \leq n2}$.

On considère alors :

- sous hypothèse d'absence de transitoire : $p_{1,N}$ la densité de probabilité de l'échantillon des N k-effectifs d'étapes $K_{1,N} = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ de moyenne $\mu_{1,N}$ et de variance $\sigma_{1,N}^2$,
- sous hypothèse d'un transitoire de longueur n :
 - $p_{1,n}$ la densité de probabilité de l'échantillon initial des n premiers k-effectifs d'étapes

$K_{1,n} = \{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ de moyenne $\mu_{1,n}$ et de variance $\sigma_{1,n}^2$,

- $p_{n+1,N}$ la densité de probabilité de l'échantillon final des $N-n$ derniers k-effectifs d'étapes $K_{n+1,N} = \{k_i\}_{n < i \leq N}$ de moyenne $\mu_{n+1,N}$ et de variance $\sigma_{n+1,N}^2$.

Le log-ratio des vraisemblances entre ces deux hypothèses est alors, $\forall n \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$:

$$\ln \frac{Ln}{LO} = \ln \frac{\prod_{i=1}^n p_{1,n}(k_i) \prod_{i=n+1}^N p_{n+1,N}(k_i)}{\prod_{i=1}^N p_{1,N}(k_i)} = \sum_{i=1}^n \ln p_{1,n}(k_i) + \sum_{i=n+1}^N \ln p_{n+1,N}(k_i) - \sum_{i=1}^N \ln p_{1,N}(k_i) .$$

Les paramètres des distributions $p_{1,n}$, $p_{n+1,N}$, $p_{1,N}$ étant inconnus, ils sont remplacés par

leur estimateur du maximum de vraisemblance : $p_{n1,n2}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(k-\hat{\mu}_{n1,n2})^2}{2\hat{\sigma}_{n1,n2}^2}}$.

Ainsi, le log-ratio des vraisemblances s'exprime, $\forall n \in \llbracket 2, N-2 \rrbracket$:

$$2 \ln \frac{Ln}{LO} = N \ln(\hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln(\hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln(\hat{\sigma}_{n+1,N}^2) .$$

Ces statistiques quantifient, pour une hypothèse de longueur de transitoire n , un « écart » entre le sous-échantillon initial et le sous-échantillon final. Sous hypothèse nulle, le modèle

de cet « écart » (noté par exemple D) est symétrique par rapport à $\frac{N}{2}$, c'est-à-dire que

$D(n) \equiv D(N-n)$. Cette dernière caractéristique justifie l'appellation de processus « pont ».

V.1.3.2. Généralisation du pont

L'approche basée sur le pont brownien nous a conduit à généraliser la notion de pont pour les statistiques d'homogénéité paramétrées par la longueur du transitoire n : statistique de Student et vraisemblance des k -effectifs d'étapes.

A chaque statistique, nous associons donc le processus "pont" des valeurs de cette statistique selon la longueur n du transitoire supposé. A l'instar du pont brownien, pour un transitoire de longueur réelle a , ce processus devrait présenter une "singularité" au voisinage de $n = a$, où l'écart entre le sous-échantillon transitoire $\{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ et le sous-échantillon stationnaire $\{k_i\}_{n+1 \leq i \leq N}$ est le plus évident, et une "régularité" globale si les k -effectifs d'étapes sont stationnaires (illustration 23).

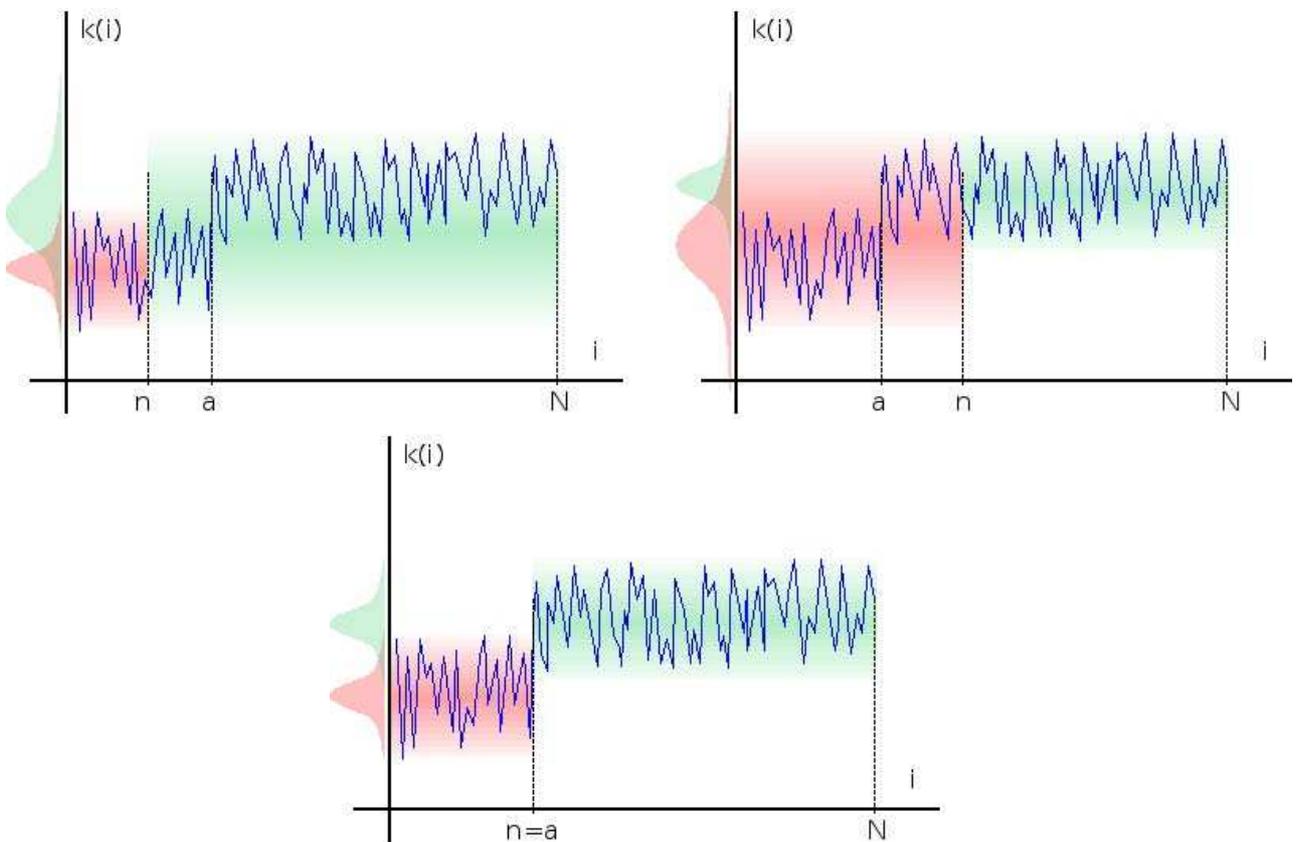


Illustration 23 : Discrimination du sous-échantillon initial $K_{1,n}$ et du sous-échantillon final $K_{n+1,N}$ en fonction de la longueur supposée du transitoire : n . Pour $n=a$, les distributions des sous-échantillons sont plus distinctes : l'écart des modèles est le plus grand.

De la même manière, nous allons donc définir des variables de décision du test de stationnarité à partir des ponts de Student et de vraisemblance. Ces variables de décision seront par la suite tabulées en fonction des caractéristiques de la séquence des k -effectifs d'étapes pour effectuer le test de stationnarité.

Pont de Student

Le pont de Student s'exprime : $S = \{s_n\}_{1 \leq n \leq N-1}$

$$\text{où } s_n = \sqrt{N-2} \frac{\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{n+1,N}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) \hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2 \right)}} .$$

Il présente des caractéristiques proches de celles du pont brownien (illustrations 24, 25), notamment une singularité à proximité de la fin du régime transitoire, négative si le transitoire est croissant, et positive s'il est décroissant.

Les variables de décision utilisées sont les suivantes :

- statistique de l'extremum : $M_S = \sup\{|s_n| : 1 \leq n \leq N-1\}$,
- statistique du log-vraisemblance de l'extremum : $LLM_S = -\ln pdfT_{N-2}(s_{n^*})$ où $s_{n^*} = \sup\{|s_n| : 1 \leq n \leq N-1\}$,

en effet, si les sous-échantillons comparés étaient indépendants, les valeurs du pont de Student devraient suivre une loi de Student de degré $N-2$. La vraisemblance de chaque étape du processus empirique S peut donc être approchée grossièrement par $pdfT_{N-2}(s_n)$ où $pdfT_{N-2}$ est la densité de probabilité de la loi de Student de degré $N-2$.

- statistique de la moyenne : $E_S = |\bar{S}|$ où $\bar{S} = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} s_n$,
- statistique de la variance : $S_S^2 = \frac{1}{N-2} \sum_{n=1}^{N-1} (s_n - \bar{S})^2$,
- statistique de l'autocovariance : $arS_S^2 = \frac{1}{N-2} \sum_{n=1}^{N-2} (s_n - \bar{S})(s_{n+1} - \bar{S})$,
- statistique de la moyenne du log-vraisemblance du processus : $LL_S = \frac{-1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \ln pdfT_{N-2}(s_n)$,
- statistique du ratio des extremums : $RM_S = \sup \left\{ \frac{\sup\{s_n : 1 \leq n \leq N-1\}}{-\inf\{s_n : 1 \leq n \leq N-1\}}, \frac{-\inf\{s_n : 1 \leq n \leq N-1\}}{\sup\{s_n : 1 \leq n \leq N-1\}} \right\}$,
- statistique du ratio des log-vraisemblance d'extremums : $RLLM_S = \sup \left\{ \frac{\ln pdfT_{N-2}(s_n^+)}{\ln pdfT_{N-2}(s_n^-)}, \frac{\ln pdfT_{N-2}(s_n^-)}{\ln pdfT_{N-2}(s_n^+)} \right\}$,
où $s_n^- = \inf\{s_n : 1 \leq n \leq N-1\}$ et $s_n^+ = \sup\{s_n : 1 \leq n \leq N-1\}$.

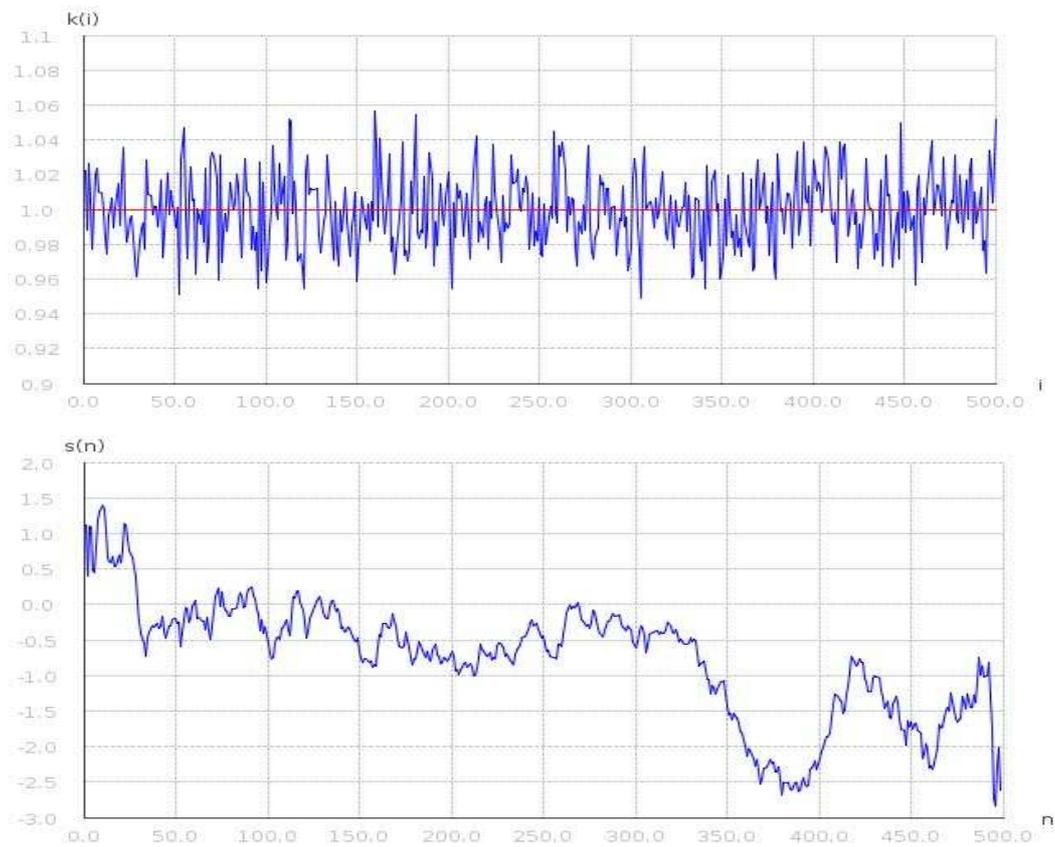


Illustration 24 : Séquence et pont de Student de k -effectifs d'étapes stationnaires.

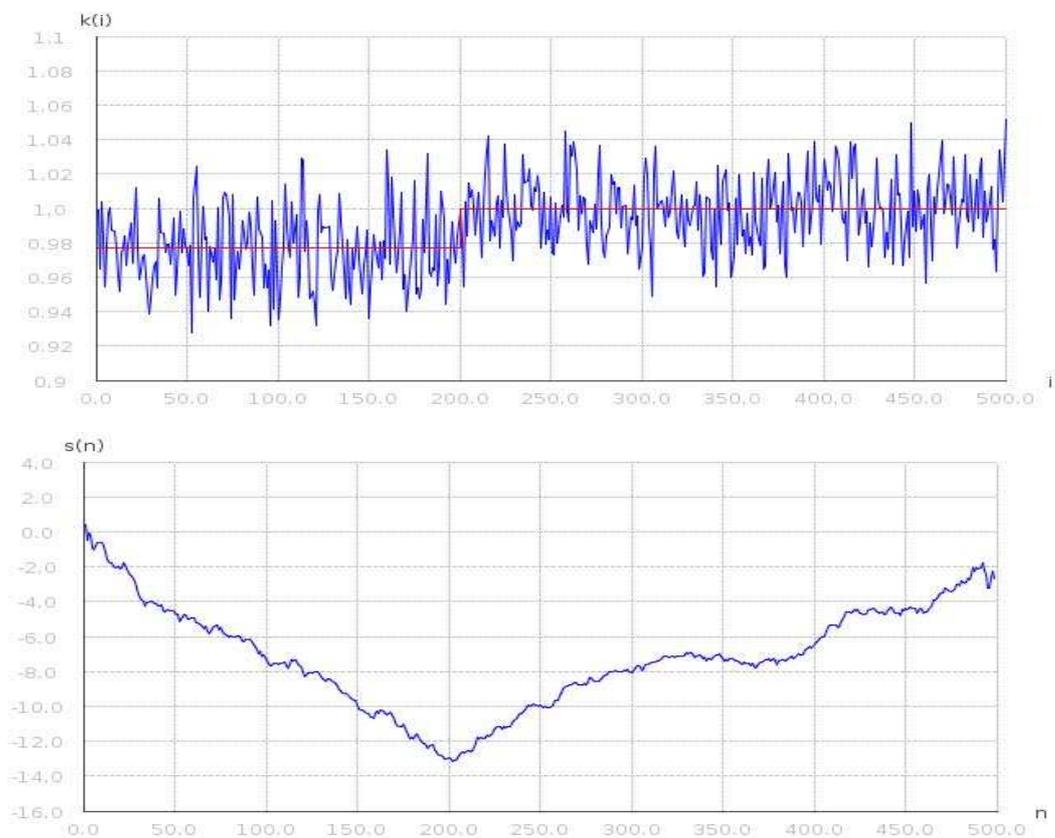


Illustration 25 : Séquence et pont de Student de k -effectifs d'étapes contaminés par un transitoire initial de 200 étapes.

Pont de vraisemblance

Le pont de vraisemblance (en fait de log-vraisemblance) s'exprime : $LL = \{l_n\}_{2 \leq n \leq N-2}$ où $l_n = N \ln(\hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln(\hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln(\hat{\sigma}_{n+1,N}^2)$. Quelle que soit la monotonie du transitoire, ce pont produira des valeurs positives autour de $n=a$. Néanmoins, en cas d'absence de transitoire, le pont prendra des valeurs proches de 0, positives ou négatives (illustrations 26, 27).

Les variables de décision utilisées sont les suivantes :

- statistique du maximum : $M_{LL} = \sup \{l_n : 2 \leq n \leq N-2\}$,
- statistique de la moyenne : $E_{LL} = \overline{LL}$ où $\overline{LL} = \frac{1}{N-3} \sum_{n=2}^{N-2} l_n$,
- statistique de la variance : $S_{LL}^2 = \frac{1}{N-4} \sum_{n=2}^{N-2} (l_n - \overline{LL})^2$,
- statistique de l'autocovariance : $arS_{LL}^2 = \frac{1}{N-4} \sum_{n=2}^{N-3} (l_n - \overline{LL})(l_{n+1} - \overline{LL})$,
- statistique du ratio des extremums : $RM_{LL} = \left| \frac{\sup \{l_n : 2 \leq n \leq N-2\}}{\inf \{l_n : 2 \leq n \leq N-2\}} \right|$.

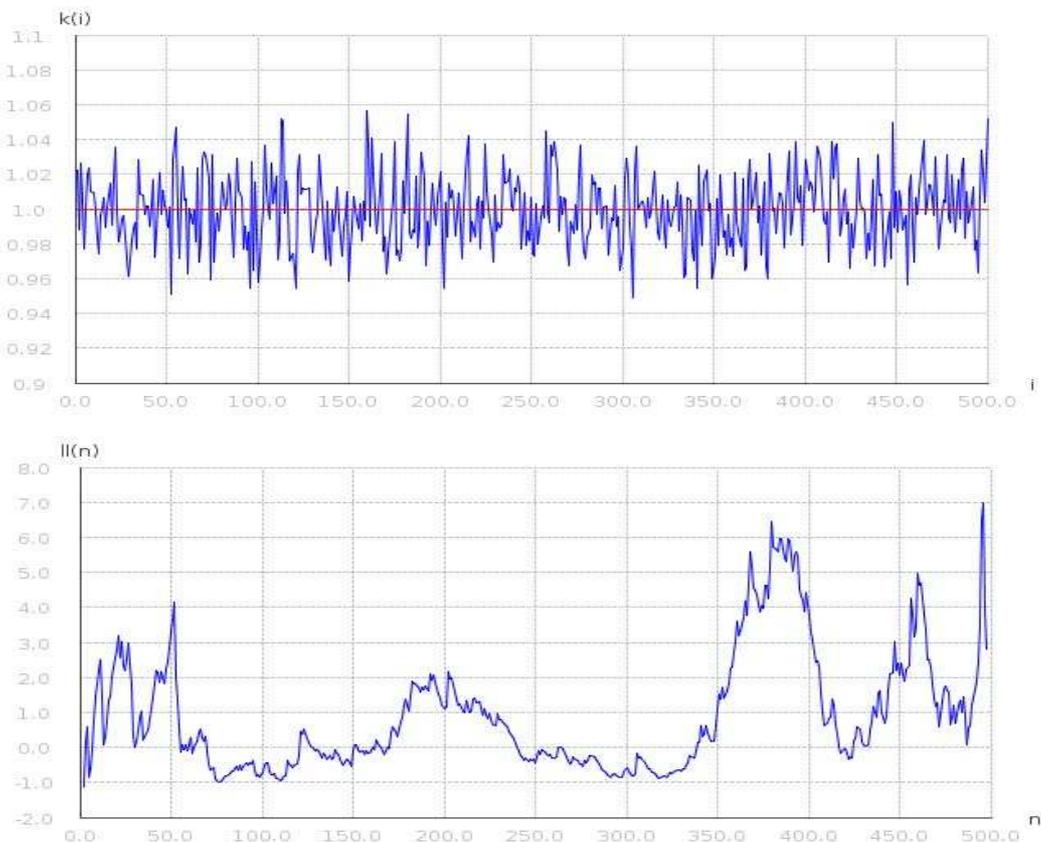


Illustration 26 : Séquence et pont de vraisemblance de k -effectifs d'étapes stationnaires.

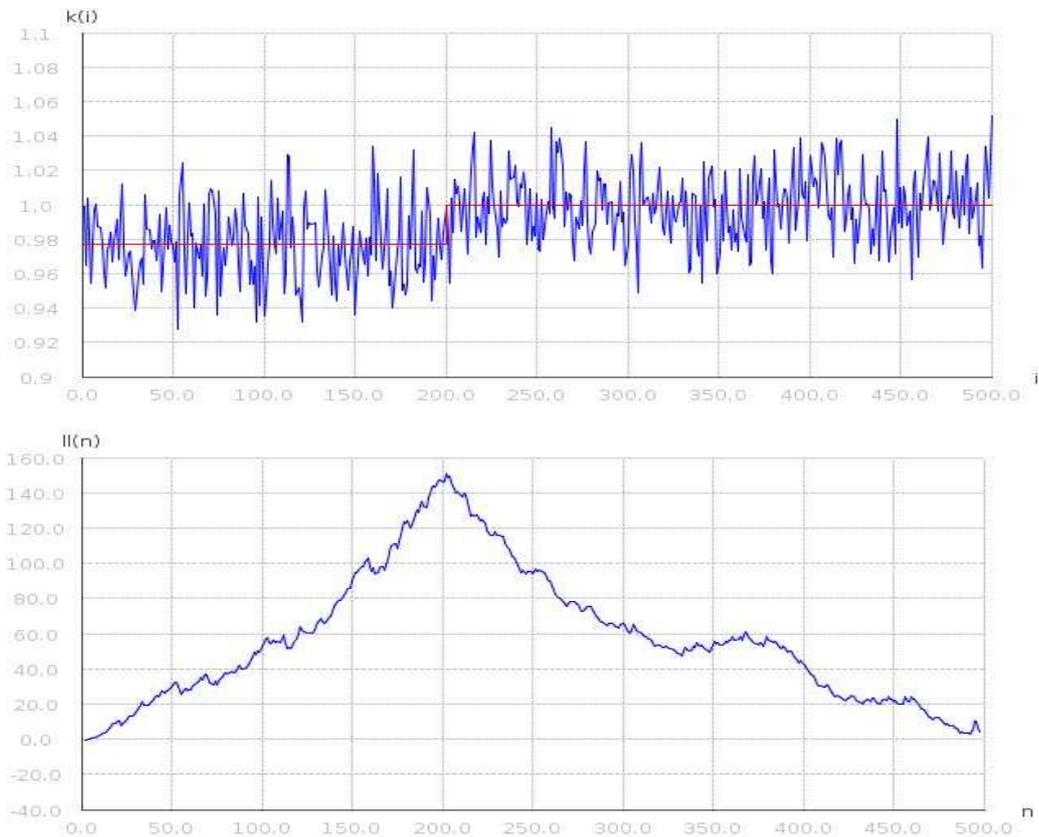


Illustration 27: Séquence et pont de vraisemblance de k -effectifs d'étapes contaminés par un transitoire initial de 200 étapes.

V.1.4. Conclusion

Les variables de décision présentées :

- statistiques du χ^2 , de Kolmogorov, de Cramer von Mises,
- statistiques du pont brownien, du pont de Student et du pont de vraisemblance,

seront considérées pour le test statistique de stationnarité des k -effectifs d'étapes.

Plus précisément, à partir des hypothèses de modélisation des k -effectifs d'étapes (page 32), on teste l'hypothèse nulle H_0 :

H_0 : "Les k -effectifs d'étapes $\{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ sont issus d'un processus autorégressif d'ordre 1 gaussien et stationnaire".

et l'hypothèse alternative H_1 :

H_1 : "Les k -effectifs d'étapes $\{k_i + t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ présentent un régime transitoire initial de longueur $a < N$: les $\{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ sont issus d'un processus autorégressif d'ordre 1 gaussien et stationnaire et $\{t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ est une rampe abrupte de longueur a : $\forall i \leq a, t_i = -A$, $\forall i > a, t_i = 0$ ".

Ce test de stationnarité va être associé à différentes procédures de troncature itératives pour permettre la suppression du régime transitoire initial.

V.2. Suppression du régime transitoire initial

Sur la base d'un test de stationnarité quelconque, on peut définir une méthode générique de suppression du transitoire en itérant la troncature des premières étapes de la séquence des k -effectifs, jusqu'à ce que le diagnostic de stationnarité soit positif sur les $N-n$ étapes restantes.

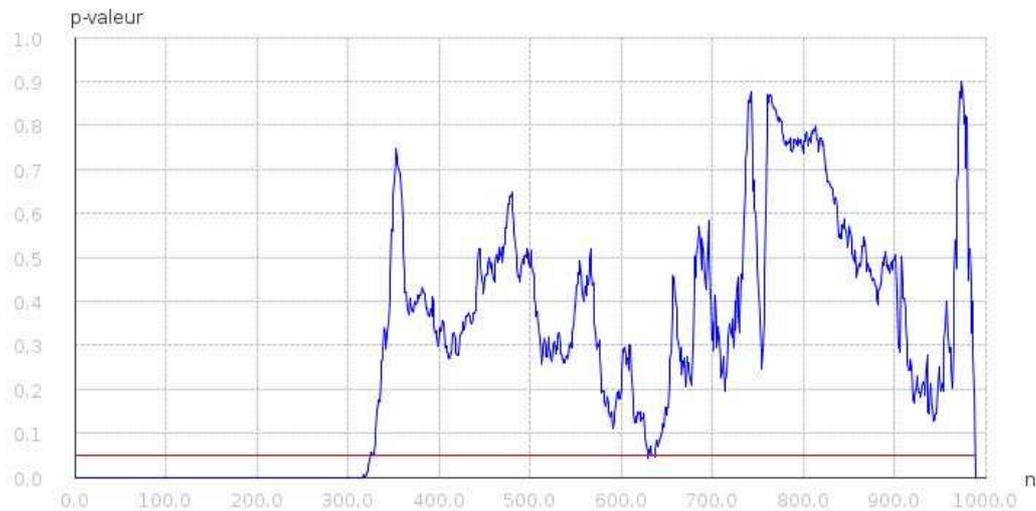


Illustration 28 : Benchmark OCDE 4 [EGSC] : processus des p -valeurs du test basé sur la statistique M_B en fonction du nombre d'étapes initiales supprimées n , seuil de rejet à 5%.

Autrement dit, cela revient à considérer le processus des p -valeurs du test choisi en fonction du nombre d'étapes initiales supprimées, et à chercher la première occurrence d'une p -valeur supérieure au seuil du rejet du test, par exemple 5% (illustration 28).

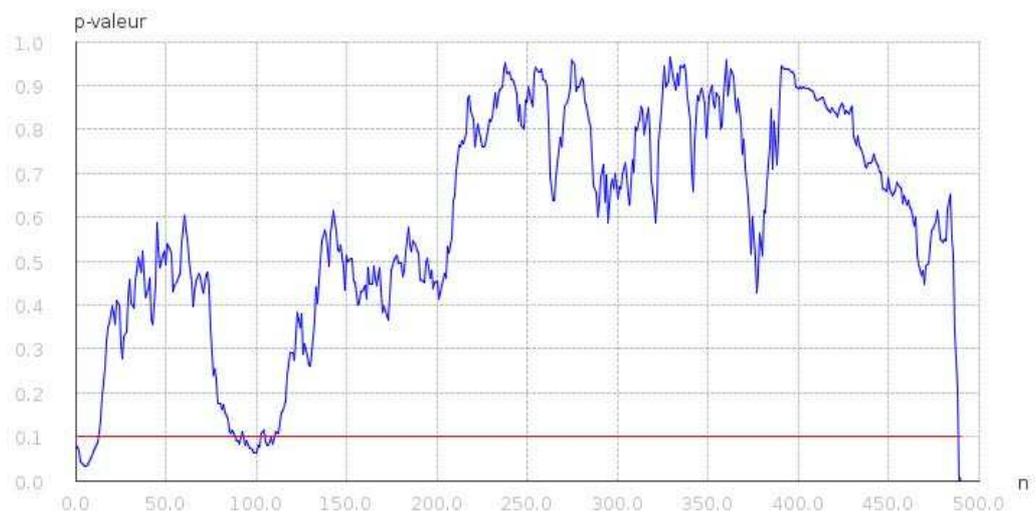


Illustration 29 : Processus des p -valeurs du test basé sur la statistique M_B en fonction du nombre d'étapes initiales supprimées n . Sur cette séquence de k -effectifs d'étapes contaminée par un transitoire initial de 150 étapes, le seuil de rejet à 10% conduit à accepter la stationnarité après la suppression de 15 étapes.

Cette procédure présentée par Heidelberger et Welch [HEID] présente toutefois une sensibilité forte à l'erreur de seconde espèce du test de stationnarité, car elle peut conduire à accepter la stationnarité trop tôt dans le cycle itératif de suppression des étapes initiales (illustration 29).

Cependant, on constate que si la première itération validant l'hypothèse de stationnarité apparaît trop tôt, souvent quelques itérations supplémentaires auraient invalidé l'hypothèse de stationnarité. Afin de limiter l'influence de l'erreur de seconde espèce conduisant à accepter la stationnarité trop tôt (i.e. à sous estimer α), nous proposons donc une heuristique de "consolidation" du diagnostic de stationnarité : on convient de valider la stationnarité seulement lorsque plusieurs itérations successives vérifieront l'hypothèse de stationnarité et on arrêtera alors la troncature à la première de ces itérations (illustration 30). On espère ainsi limiter le risque d'accepter une stationnarité qui aurait été infirmée après quelques itérations supplémentaires.

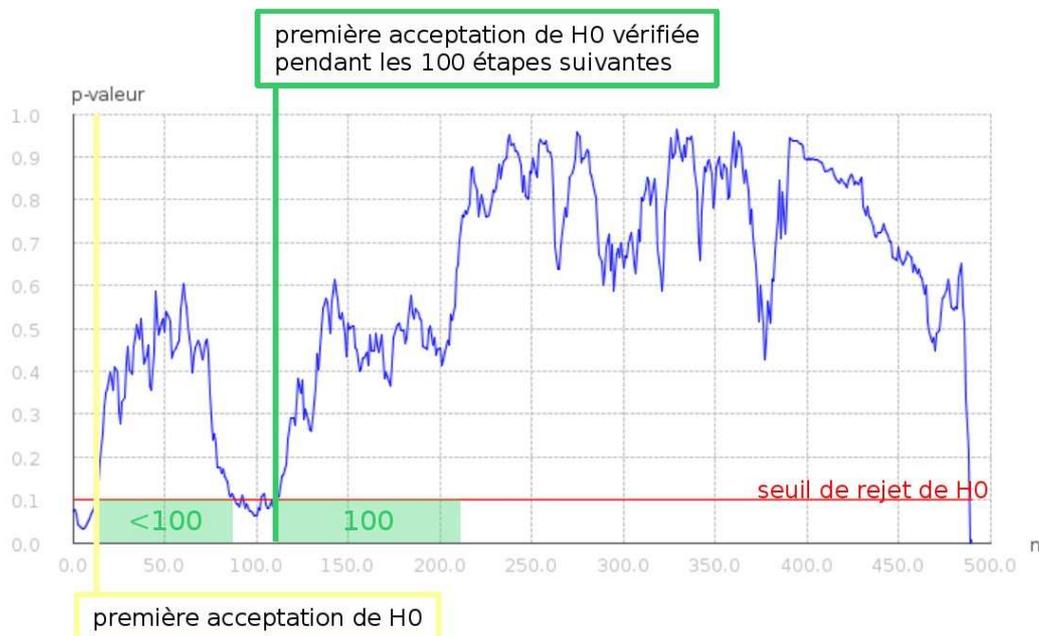


Illustration 30: Première occurrence positive du test de stationnarité après la suppression de 15 étapes (seuil de rejet à 10%). Si on "consolide" l'acceptation de la stationnarité par la validation de l'hypothèse de stationnarité sur les 100 étapes suivantes, alors on éliminera 125 étapes car c'est la première des 100 étapes successives validant la stationnarité. Dans ce cas, cela améliorera sensiblement la précision de la suppression de transitoire.

L'utilisation d'une telle heuristique pour définir la stationnarité est motivée par la complexité de la modélisation rigoureuse de la troncature itérative, du fait de la forte corrélation entre les p-valeurs obtenues entre itérations successives. L'optimisation du paramétrage de cette méthode pour chaque statistique de test nécessitera elle aussi une approche expérimentale.

VI Mise en œuvre et application aux calculs Monte-Carlo de criticité

Dans le précédent chapitre, une méthodologie de suppression du transitoire initial de la séquence des k-effectifs d'étapes à été proposée. Toutefois, dans l'objectif d'une exploitation industrielle, les différentes déclinaisons de cette méthodologie demandent à être comparées et leur faisabilité doit être validée.

La méthodologie de suppression du transitoire proposée peut se baser sur différentes statistiques de test de stationnarité, et sur différents paramétrages de l'arrêt des troncatures itératives. En outre, les lois sous l'hypothèse nulle des variables de décision étudiées ne sont généralement pas connues (même asymptotiquement) et nécessitent donc une tabulation préalable.

Une implémentation d'étude de toutes les méthodes de troncature itérative proposées va donc permettre d'expérimenter la mise en œuvre de la suppression de transitoire.

Cette implémentation sera ensuite utilisée sur des simulations de séquences de k-effectifs d'étapes contaminées afin d'évaluer l'efficacité de chaque méthode relativement aux caractéristiques des régimes transitoires. Enfin, plusieurs benchmarks de calculs Monte-Carlo de criticité réels seront utilisés pour une validation expérimentale.

VI.1. Paramétrage des méthodes de suppression du régime transitoire des k-effectifs d'étapes

L'observation de séquences de k-effectifs d'étapes issues de calculs Monte-Carlo de criticité effectués avec le code MORET en contexte de production industrielle nous permet de paramétrer la modélisation des séquences de k-effectifs proposée (voir "Environnement technique et modélisation des calculs Monte-Carlo de criticité").

Ainsi, la séquence de k-effectifs d'étapes "stationnaire" sera modélisée par un processus gaussien autorégressif d'ordre 1 :

$$K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \quad \text{où}$$

- $k_1 \equiv LG_{k_{\text{effectif}}, \frac{\sigma_\epsilon^2}{1-\rho^2}}$,
 - $\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, k_{i+1} = k_{\text{effectif}} + \rho(k_i - k_{\text{effectif}}) + \epsilon_i$,
- (ϵ_i) étant un bruit blanc gaussien d'espérance nulle et de variance σ_ϵ^2 ,

avec les paramètres suivants adaptés aux calculs de criticité :

- la longueur $N=500$,

- l'espérance du processus $k_{\text{effectif}}=1$,
- l'autocorrélation $\rho=0.2$
- l'écart-type du bruit $\sigma_{\epsilon}=0.02$,

La composante déterministe de biais $T=\{t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ avec :

- pour $i \leq a, t_i = -A$,
- pour $i > a, t_i = 0$,

sera définie par :

- le biais normalisé de l'espérance du k-effectif du système : $0 \leq \frac{aA}{\sigma\sqrt{N}} \leq 10$, c'est-à-dire le biais sur le k-effectif du système par rapport à son écart-type,
- la longueur relative de contamination : $0 \leq \frac{a}{N} < 1$.

La séquence de k-effectifs d'étapes contaminée sera alors définie par $KT=\{k_i+t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ (illustration 31).

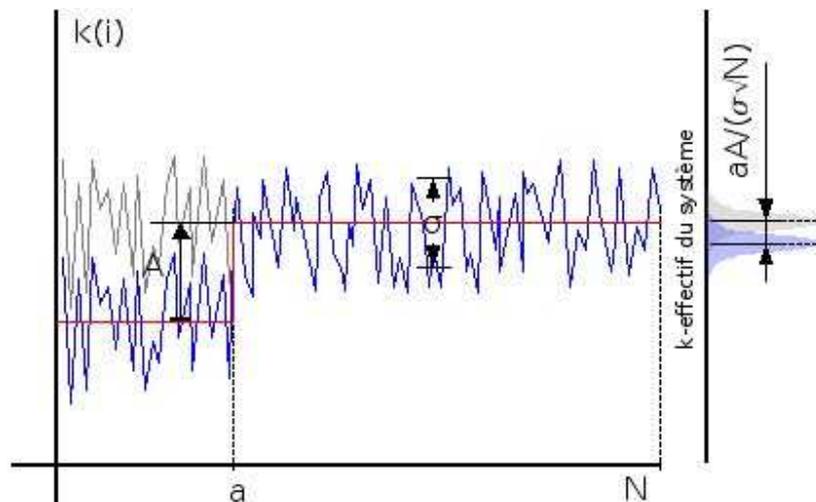


Illustration 31 : Modèle de séquence de k-effectifs d'étapes contaminée par un régime transitoire.

Cette modélisation théorique des séquences de k-effectifs d'étapes va permettre de mettre en œuvre les différentes méthodes de suppression du transitoire initial. Toutefois, les hypothèses sous-jacentes de ce modèle sont très simplificatrices, les résultats obtenus sur ce modèle simplifié devront donc finalement être validés empiriquement sur des processus de k-effectifs d'étapes réels.

VI.1.1. Statistiques libres pour le test de stationnarité

Pour construire un test de stationnarité, la loi de la statistique utilisée devrait être indépendante des paramètres du modèle des k-effectifs d'étapes sous hypothèse nulle (notion de statistique libre), c'est-à-dire lorsque la séquence des k-effectifs d'étapes est stationnaire. Précisément, les lois des statistiques de test envisagés ici ne dépendent pas de la moyenne μ (i.e. le k-effectif réel du système) et de la variance σ^2 . On peut alors choisir arbitrairement ces paramètres pour connaître (théoriquement ou empiriquement) les lois en question.

Les variables de conformité d'échantillon (χ^2 , Kolmogorov et Cramer von Mises) ne dépendent pas, sous hypothèse nulle, de la moyenne et la variance de l'échantillon (résultat classique [SAPO]).

En outre, on souhaite idéalement que les transformations proposées (sommes cumulées et leurs généralisations) soient elles aussi invariantes vis-à-vis :

- d'un changement de la moyenne des k-effectifs d'étapes
- d'un changement de la variance des k-effectifs d'étapes,

afin que toutes les variables de décision qui en découlent (a fortiori) ne dépendent pas non plus de ces paramètres.

On vérifie simplement que les « ponts » utilisés ne sont pas impactés par les transformations, ce qui se traduit par les deux vérifications suivantes pour les trois types de ponts étudiés :

- $K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \rightarrow K + a = \{k_i + a\}_{1 \leq i \leq N}$ caractérisant un accroissement de l'espérance de K par la valeur $a \geq 0$,
- $K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \rightarrow k_{\text{effectif}} + a(K - k_{\text{effectif}}) = \{k_{\text{effectif}} + a(k_i - k_{\text{effectif}})\}_{1 \leq i \leq N}$, caractérisant une multiplication de la variance de K par la valeur a^2 .

Note : pour simplifier la démonstration, on remarque qu'en admettant la première transformation, la deuxième est équivalente à $K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N} \rightarrow aK = \{a k_i\}_{1 \leq i \leq N}$.

Invariance du pont brownien :

- $$b_n(K) = \frac{n(\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{1,N})}{\hat{\sigma} \sqrt{N}} \rightarrow b_n(K+a) = \frac{n(\hat{\mu}_{1,n} + a - (\hat{\mu}_{1,N} + a))}{\hat{\sigma} \sqrt{N}} = b_n(K) \quad ,$$
- $$b_n(K) = \frac{n(\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{1,N})}{\hat{\sigma} \sqrt{N}} \rightarrow b_n(aK) = \frac{n(a\hat{\mu}_{1,n} - a\hat{\mu}_{1,N})}{a\hat{\sigma} \sqrt{N}} = b_n(K) \quad .$$

Invariance du pont de Student :

- $$s_n(K) = \sqrt{N-2} \frac{\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{n+1,N}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) \hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2 \right)}}$$

$$\rightarrow s_n(K+a) = \sqrt{N-2} \frac{\hat{\mu}_{1,n} + a - (\hat{\mu}_{n+1,N} + a)}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) \hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2 \right)}} = s_n(K) \quad ,$$
- $$s_n(K) = \sqrt{N-2} \frac{\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{n+1,N}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) \hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2 \right)}}$$

$$\rightarrow s_n(aK) = \sqrt{N-2} \frac{a\hat{\mu}_{1,n} - a\hat{\mu}_{n+1,N}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) a^2 \hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1) a^2 \hat{\sigma}_{n+1,N}^2 \right)}} = s_n(K) \quad .$$

Invariance du pont de vraisemblance :

- $$ll_n(K) = N \ln(\hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln(\hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln(\hat{\sigma}_{n+1,N}^2)$$

$$\rightarrow ll_n(K+a) = N \ln(\hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln(\hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln(\hat{\sigma}_{n+1,N}^2) = ll_n(K) \quad ,$$
- $$ll_n(K) = N \ln(\hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln(\hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln(\hat{\sigma}_{n+1,N}^2)$$

$$\rightarrow ll_n(aK) = N \ln(a^2 \hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln(a^2 \hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln(a^2 \hat{\sigma}_{n+1,N}^2)$$

$$= N \ln(a^2) - n \ln(a^2) - (N-n) \ln(a^2) + ll_n(K) = ll_n(K) \quad .$$

Les processus ponts sont donc bien indépendants de l'espérance et de la variance de la séquence de k-effectifs d'étapes. Notons que le raisonnement établi ne dépendant pas du modèle de séquences des k-effectifs d'étapes, il est applicable non seulement au modèle théorique précédent, mais aussi aux séquences de k-effectifs d'étapes réels.

VI.1.2. Tabulation des distributions sous hypothèse nulle

Comme mentionné dans le chapitre "Détection de stationnarité : test de stationnarité", les distributions des variables de décision du test de stationnarité sous hypothèse nulle ne sont pas connues. Afin de pouvoir implémenter ces tests, il convient donc d'effectuer une tabulation empirique des variables basée sur la modélisation simplifiée des k -effectifs d'étapes.

Une première approche classique consiste à utiliser un paramétrage constant de la séquence des k -effectifs d'étapes (i.e. le paramétrage : $N=500$ et $\rho=0.2$). Toutefois, la méthode de troncature itérative proposée conduit à devoir appliquer les tests de stationnarité sur des séquences de k -effectifs d'étapes plus courtes après quelques itérations. Certaines variables de décision présentant une distribution théorique sensible à la longueur de la séquence des k -effectifs d'étapes peuvent donc fortement biaiser le test de stationnarité (illustration 32).

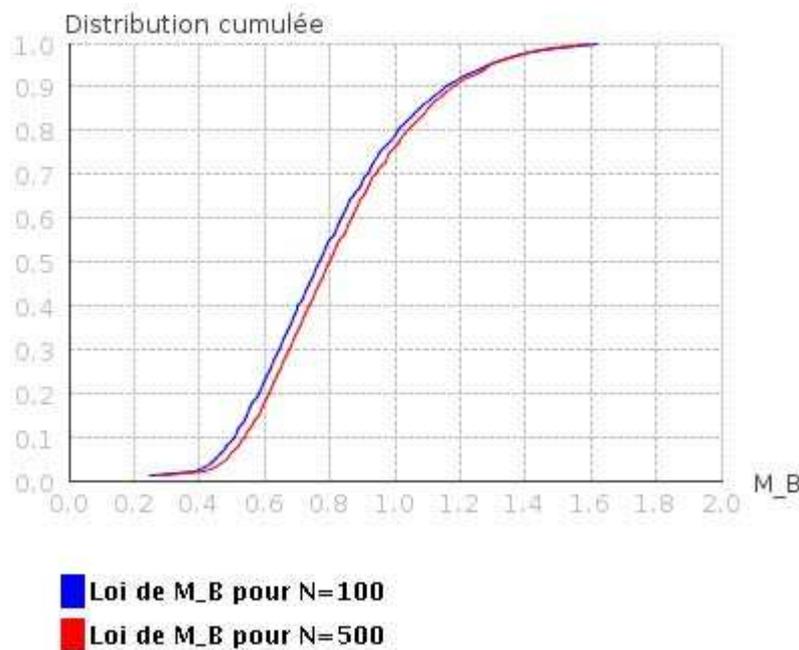


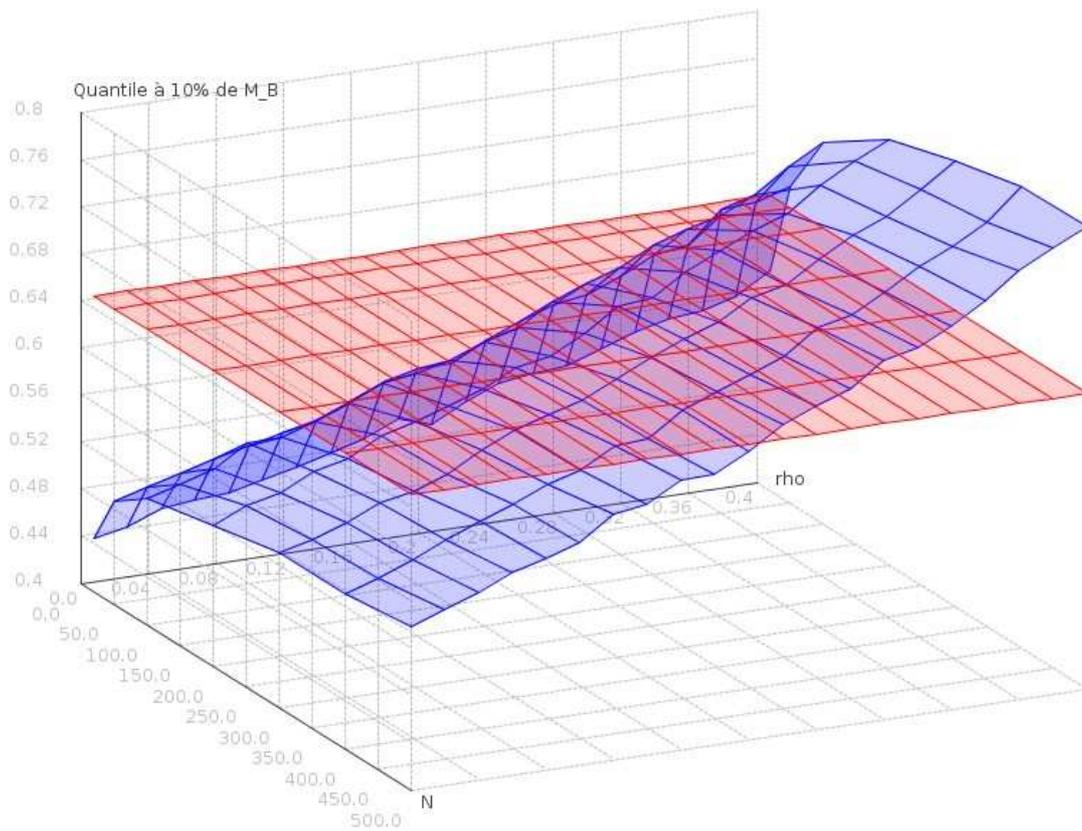
Illustration 32 : Distributions de la statistique M_B obtenues pour des séquences de k -effectifs d'étapes de longueur 100 et 500.

Il est donc souhaitable de pouvoir définir la distribution statistique sous hypothèse nulle en fonction de la longueur de la séquence. De la même manière, le coefficient d'autocorrélation des k -effectifs d'étapes peut aussi influencer significativement sur certaines variables de décision.

Nous avons précédemment montré que sous hypothèse nulle, les processus ponts sont intrinsèquement invariants vis-à-vis de l'espérance et de l'écart-type de la séquence des k -effectifs d'étapes. Les variables de décision, basées sur ces processus ponts, sont donc elles aussi libres vis-à-vis de ces deux paramètres, et sont donc seulement dépendantes de la longueur N et de l'autocorrélation ρ de K .

En définitive, deux approches de tabulation seront testées (illustration 33):

- l'approche dite "limite" ou "asymptotique" où la distribution de la statistique considérée est tabulée en utilisant la génération aléatoire de la séquence de k-effectifs d'étapes gaussienne autorégressive d'ordre 1 (longueur $N=500$, et autocorrélation $\rho=0.2$),
- l'approche dite "paramétrée" où la distribution en fonction de la longueur N et de l'autocorrélation ρ est tabulée en utilisant la génération aléatoire des séquences de k-effectifs d'étapes gaussienne autorégressive d'ordre 1 pour chaque combinaison des paramètres (longueur $1 \leq N \leq 500$, et autocorrélation $0 \leq \rho \leq 0.4$).
En pratique, les distributions sont évaluées par interpolation linéaire des quelques combinaisons tabulées : $N \in \{20, 50, 100, 200, 300, 400, 500\}$, et $\rho \in \{0, 0.02, 0.04, 0.06, \dots, 0.4\}$.



■ Distribution d'hypothèse nulle "paramétrée"

■ Distribution d'hypothèse nulle "asymptotique"

Illustration 33 : Distributions sous hypothèse nulle pour l'approche "asymptotique" et pour l'approche "paramétrée".

Ainsi, ces deux déclinaisons de tabulations des distributions nulles conduisent à deux types de tests tabulés pour chaque variable de décision :

- le test asymptotique qui utilise la distribution limite ($N=500, \rho=0.2$) comme hypothèse nulle,
- le test paramétré par la longueur N et l'autocorrélation estimée $\hat{\rho}$ de la séquence des k -effectifs d'étapes.

Nous étudierons les avantages et inconvénients respectifs de ces deux approches d'un point de vue théorique, puis empirique.

VI.1.3. Paramètres de nuisance

Si les variables de décision proposées semblent a priori toutes pertinentes pour discriminer la stationnarité, les tests construits sur ces variables peuvent néanmoins présenter une forte sensibilité à la variance d'estimation des paramètres de la séquence des k -effectifs d'étapes. Par exemple, si l'expression d'une variable de décision dépend de l'estimation d'un paramètre (paramètre de nuisance, tel la variance $\hat{\sigma}$, ou l'autocorrélation $\hat{\rho}$), alors la variance de cette estimation peut pénaliser la puissance des tests l'utilisant (exemple pour une hypothèse alternative H_1 paramétrée : illustrations 34, 35).

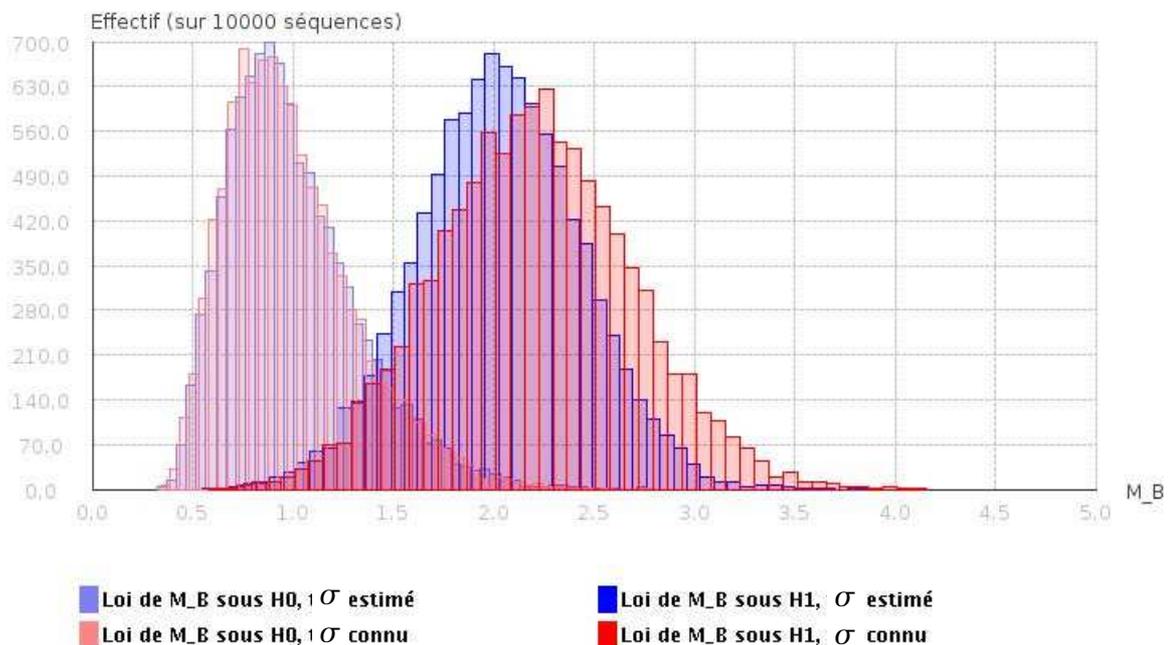


Illustration 34 : Densités de probabilités de la variable M_B sous H_0 (séquence de k -effectifs d'étapes sans transitoire) et $H_1(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=10, \frac{a}{N}=0.8)$, pour σ estimé ou connu.



■ Estimation de σ ■ σ connu

Illustration 35 : Puissance du test H_0 contre $H_1(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=10, \frac{a}{N}=0.8)$ pour α (erreur de première espèce) variant. On constate que le test utilisant la connaissance de σ est plus puissant, quel que soit α .

Certaines statistiques des ponts sont ainsi conçues pour annuler la nuisance de ces paramètres. Par exemple, les statistiques de type "ratio" du pont brownien :

- statistique du ratio des extremums :

$$RM_B = \sup \left\{ \frac{\sup\{b_n: 0 \leq n \leq N\}}{-\inf\{b_n: 0 \leq n \leq N\}}, \frac{-\inf\{b_n: 0 \leq n \leq N\}}{\sup\{b_n: 0 \leq n \leq N\}} \right\},$$

- statistique du ratio des log-vraisemblance d'extremums :

$$RLLM_B = \sup \left\{ \frac{\frac{b_{n^+}^2}{n^+(N-n^+)}}{\frac{b_{n^-}^2}{n^-(N-n^-)}}, \frac{\frac{b_{n^-}^2}{n^-(N-n^-)}}{\frac{b_{n^+}^2}{n^+(N-n^+)}} \right\} \text{ où } b_{n^-} = \inf\{b_n: 0 \leq n \leq N\} \text{ et}$$

$$b_{n^+} = \sup\{b_n: 0 \leq n \leq N\},$$

permettent d'éviter l'estimation du terme de normalisation $\hat{\sigma}\sqrt{N}$, et ne sont donc pas impactées par la variance d'estimation de $\hat{\sigma}$.

Outre l'influence sur l'estimation des variables de décision, le paramètre de nuisance ρ est également utilisé dans l'approche "paramétrée" des distributions sous hypothèses nulle. Si l'approche paramétrée peut donc conduire théoriquement à une amélioration de l'estimation de la p-valeur des tests en prenant en compte les paramètres des séquences (N, ρ) , la variance et le biais d'estimation de ρ risquent de pénaliser cette estimation.

En fait, l'utilisation des distributions asymptotiques sous hypothèse nulle conduit à un biais de sous-estimation des p-valeurs, et l'utilisation des distributions paramétrées réduit ce biais mais augmente la variance d'estimation des p-valeurs (illustration 36).

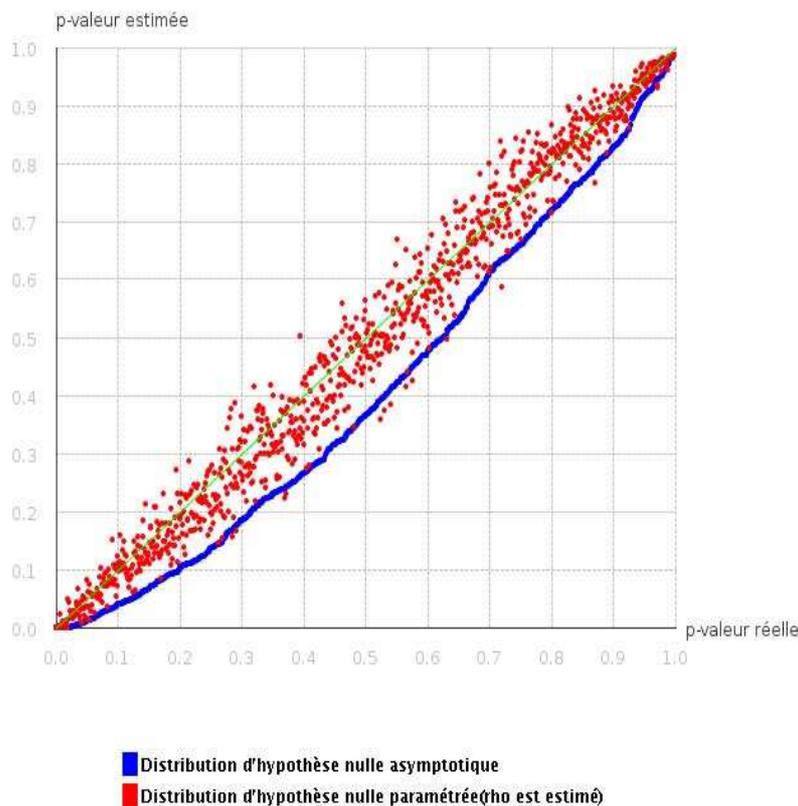


Illustration 36 : Nuisance de l'estimation du paramètre ρ pour l'estimation des p-valeurs de la statistique M_B sur 1000 séquences de k -effectifs d'étapes $(N=500, \rho=0.3)$.

Finalement, on constate que toutes les utilisations des variables de nuisance conduisent à une dégradation de l'efficacité des tests statistiques de stationnarité. Néanmoins, on peut parfois contourner cette dépendance, avec par exemple les statistiques de type "ratio" du pont brownien. Sinon, la variance d'estimation des paramètres de nuisance n'est pas nécessairement moins efficace que l'utilisation d'une valeur arbitraire pour ces paramètres (approche "asymptotique" des distributions sous hypothèse nulle). En définitive, c'est une comparaison globale de toutes les méthodes de suppression du transitoire qui nous permettra de conclure sur la pertinence relative des différentes approches utilisant (ou pas) des paramètres de nuisance.

VI.1.4. Paramétrage des heuristiques de suppression du transitoire

La définition de l'heuristique d'arrêt de la troncature itérative doit permettre de consolider le diagnostic de stationnarité en le validant seulement lorsque plusieurs itérations successives vérifient l'hypothèse de stationnarité.

Toutefois, l'effet de limitation du risque de sous-troncature implique naturellement une augmentation du risque de sur-troncature. En particulier lorsque le nombre d'étapes tronquées est déjà élevé, on souhaite être plus "tolérant" sur la condition d'arrêt des troncatures itératives. Ainsi, on peut définir le nombre d'étapes successives devant vérifier le test de stationnarité en fonction du nombre d'étapes restantes : 20, 40 ou 60 %.

Pour vérifier l'efficacité de cette heuristique, nous testerons également la méthode plus simple décrite par Heidelberger & Welch [HEID] consistant à arrêter les troncatures itératives au premier diagnostic de stationnarité positif.

VI.1.5. Inventaire des méthodes de suppression du régime transitoire

En somme, une méthodologie de suppression de transitoire est constituée par :

- un test statistique de stationnarité caractérisé par :
 - une statistique de test " S ",
 - une distribution de cette variable de décision sous hypothèse nulle :
 - " lim ": « limite » ou « asymptotique » si la tabulation est faite sur le modèle constant de séquence de k -effectifs d'étapes de longueur $N=500$, et d'autocorrélation $\rho=0.2$,
 - " $param$ " : « paramétrée » si la tabulation est paramétrée par les caractéristiques de la séquence des k -effectifs d'étapes,
 - une erreur de première espèce " α " ,
- une heuristique d'arrêt de la troncature itérative dont la condition d'acceptation de la stationnarité est :
 - soit un nombre entier : " h " (≥ 1) d'itérations successives pour lesquelles le diagnostic de stationnarité est positif,
 - soit un pourcentage des itérations restantes successives : " h " (< 1) pour lesquelles le diagnostic de stationnarité est positif.

Par la suite, on désignera cette méthode par l'expression :

- " $lim-S\% \alpha : h$ " pour l'utilisation de la tabulation limite,
- " $param-S\% \alpha : h$ " pour l'utilisation de la tabulation paramétrée.

Par exemple, nous définissons ainsi la méthode de référence " $lim-D^2\% 0.1 : 1$ " qui pourrait être actuellement utilisée dans le code Monte-Carlo de criticité MORET définie par :

- un test statistique de stationnarité utilisant :
 - une variable de décision du χ^2 telle qu'implémentée dans le code MORET [JACQ2],
 - une distribution « limite » de cette variable de décision tabulée sous hypothèse nulle avec des séquences de k-effectifs d'étapes de longueur $N=500$, et d'autocorrélation $\rho=0.2$,
 - une erreur de première espèce de 10 %,
 - une heuristique d'arrêt de la troncature itérative dès la première itération diagnostiquée comme stationnaire par le test précédent.

La déclinaison de toutes les valeurs de ces paramètres pour décrire une méthode de suppression du transitoire permet de construire 576 méthodes différentes :

- 144 tests statistiques de stationnarité caractérisés par :
 - une variable de décision parmi les 24 possibles :
 - 3 statistiques d'échantillon :
 - statistique du χ^2 : D^2 ,
 - statistique de Kolmogorov : $\sqrt{N} D_N$,
 - statistique de Cramer von Mises : $N \omega_N^2$,
 - 8 statistiques du pont brownien :
 - statistique de l'extremum : M_B ,
 - statistique du log-vraisemblance de l'extremum : LLM_B ,
 - statistique de la moyenne : E_B ,
 - statistique de la variance : S_B^2 ,
 - statistique de l'autocovariance : arS_B^2 ,
 - statistique de la moyenne des log-vraisemblance du processus : LL_B ,
 - statistique du ratio des extremums : RM_B ,
 - statistique du ratio des log-vraisemblance d'extremums : $RLLM_B$,

- 8 statistiques du pont de Student :
 - statistique de l'extremum : M_S ,
 - statistique du log-vraisemblance de l'extremum : LLM_S ,
 - statistique de la moyenne : E_S ,
 - statistique de la variance : S_S^2 ,
 - statistique de l'autocovariance : arS_S^2 ,
 - statistique de la moyenne du log-vraisemblance du processus : LL_S ,
 - statistique du ratio des extremums : RM_S ,
 - statistique du ratio des log-vraisemblance d'extremums : $RLLM_S$,
- 5 statistiques du pont de vraisemblance :
 - statistique du maximum : M_{LL} ,
 - statistique de la moyenne : E_{LL} ,
 - statistique de la variance : S_{LL}^2 ,
 - statistique de l'autocovariance : arS_{LL}^2 ,
 - statistique du ratio des extremums : RM_{LL} ,
- une distribution de cette variable de décision sous hypothèse nulle : "*lim*" (i.e. « asymptotique ») ou "*param*" (i.e. « paramétrée »),
- une erreur de première espèce " α " parmi $\{0.1, 0.2, 0.3\}$,
- une heuristique d'arrêt de la troncature itérative :
 - soit à la première itération pour laquelle le diagnostic de stationnarité est positif,
 - soit quand un certain nombre " h " d'itérations successives sont diagnostiquées comme stationnaires (ce nombre pouvant être 20, 40 ou 60% des étapes restantes) : on arrête alors la troncature à la première des h itérations vérifiant l'hypothèse de stationnarité.

Ces méthodes de suppression du transitoire initial des calculs Monte-Carlo de criticité ont été définies sur la base de considérations théoriques (convergence des sommes normalisées vers le pont brownien par exemple), mais aussi à partir d'heuristiques. Il faut maintenant comparer ces méthodes aux exigences des calculs Monte-Carlo de criticité.

Ainsi, différentes évaluations de cette performance sont envisagées, tout d'abord en fonction des caractéristiques des régimes transitoires, puis à partir de configurations géométrico-chimiques représentatives de calculs Monte-Carlo de criticité.

VI.2. Plan d'expériences de transitoires théoriques

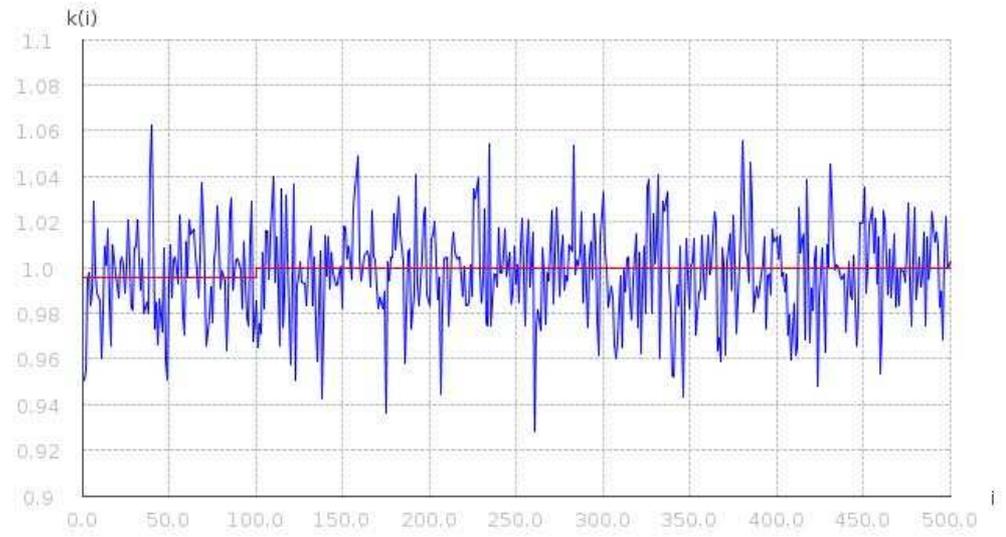
En se basant sur le paramétrage d'étude du modèle des k-effectifs d'étapes stationnaires et transitoires, nous allons définir un échantillon d'expériences pour lesquelles la performance de chaque méthode de suppression du transitoire va être évaluée. On considère donc les séquences suivantes de k-effectifs d'étapes :

- la longueur de la séquence des k-effectifs d'étapes $N=500$,
- l'espérance des k-effectifs d'étapes non contaminés $k_{\text{effectif}}=1$,
- l'autocorrélation des k-effectifs d'étapes $\rho=0.2$,
- l'écart-type du bruit des k-effectifs d'étapes $\sigma_{\epsilon}=0.02$,

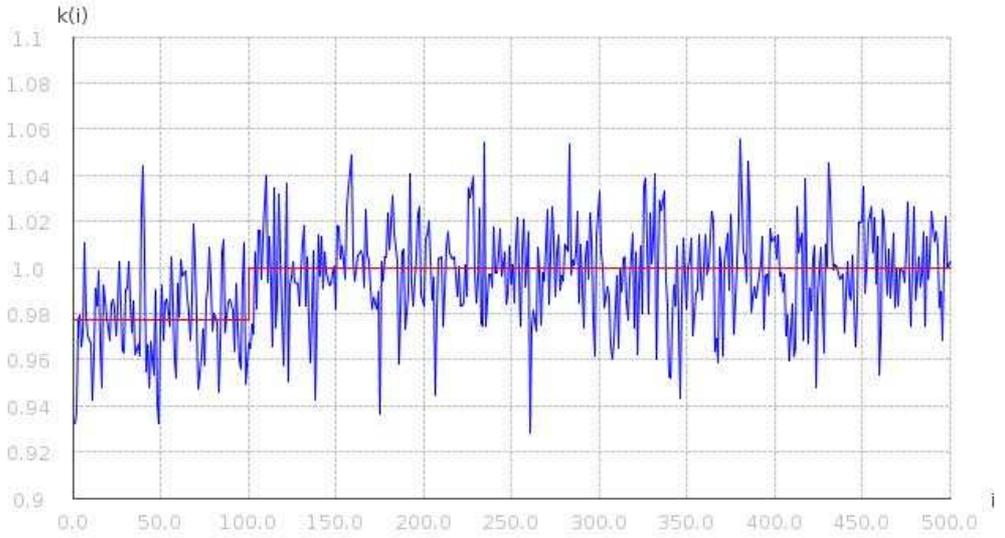
contaminés par un régime transitoire déterministe de paramètres variables (exemple tableaux 1, 2) et caractérisé par:

- un biais normalisé de l'espérance du k-effectif du système $\frac{a A}{\sigma \sqrt{N}} \in \{1, 2, \dots, 10\}$,
- une longueur relative de contamination des k-effectifs d'étapes $\frac{a}{N} \in \{0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8\}$.

$$\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=1$$



$$\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=5$$



$$\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=10$$

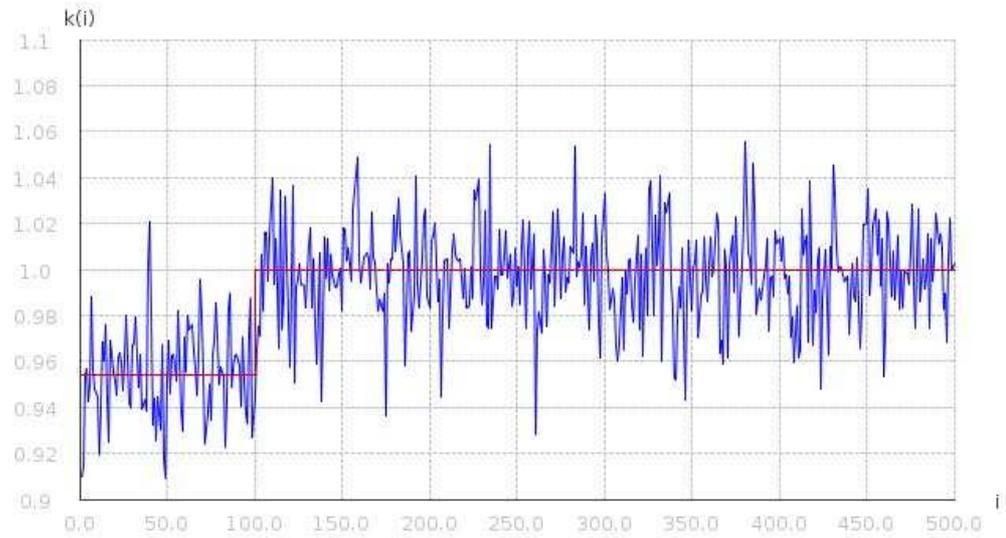
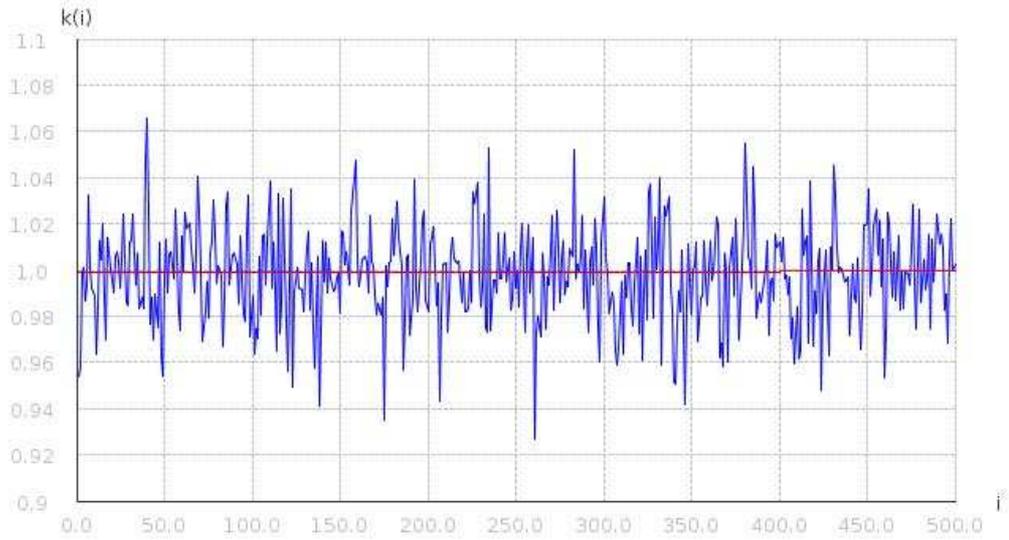
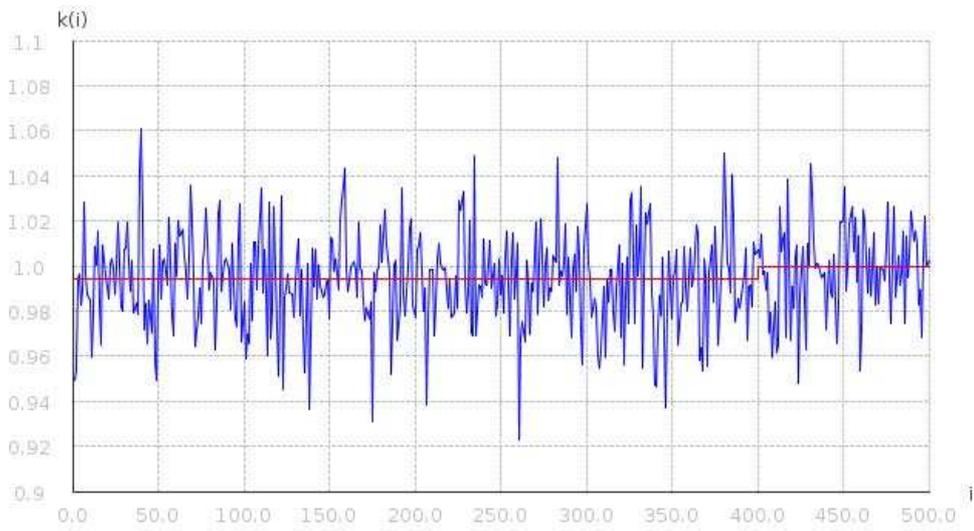


Tableau 1 : Régimes transitoires en fonction de $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$, pour $\frac{a}{N}=0.2$, $N=500$, $\rho=0.2$.

$$\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=1$$



$$\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=5$$



$$\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=10$$

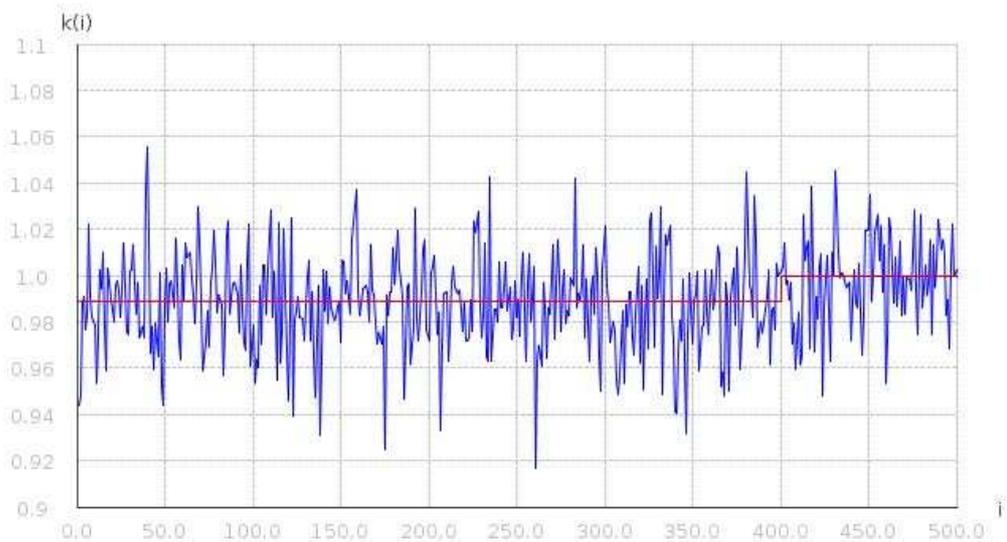


Tableau 2 : Régimes transitoires en fonction de $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$, pour $\frac{a}{N}=0.8$, $N=500$, $\rho=0.2$.

VI.2.1. Critères de performance

Le compromis entre le conservatisme de sûreté-criticité et la maximisation de la précision du modèle de k-effectif dépend du contexte d'utilisation des calculs Monte-Carlo de criticité. Par exemple, une approche privilégiant la sûreté conduirait à sur-estimer la longueur du transitoire pour minimiser le risque de conserver des étapes de k-effectifs contaminées. Le modèle de k-effectif du système ainsi obtenu sera exact, mais sur-estimera probablement l'écart-type du k-effectif en ayant supprimé à tort des étapes stationnaires.

Ainsi, ce compromis appartenant au contexte de mise en production, nous choisissons un critère de performance neutre pour l'estimation de la longueur du transitoire, c'est-à-dire ne privilégiant ni la sous-estimation, ni la sur-estimation.

En considérant une méthode de suppression de transitoire comme un estimateur de la longueur du transitoire, il est alors naturel de s'intéresser à son erreur quadratique moyenne relative (ou *RMSE* :

Relative Mean Square Error) d'estimation $E \left[\left(\frac{n-a}{a} \right)^2 \right]$.

Pour chaque expérience (i.e. paramétrage de la séquence des k-effectifs d'étapes : $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N}$), les performances des méthodes de suppression du transitoire sont donc quantifiées par l'erreur

quadratique moyenne de l'estimation de la longueur du transitoire : $E \left[\left(\frac{n-a}{a} \right)^2 \right]$ obtenue sur 100 séquences de k-effectifs d'étapes contaminées par le même régime transitoire.

Remarque : pour comparer de manière pertinente les différentes méthodes entre elles, il aurait été intéressant que leur sur-troncature sous hypothèse nulle soit équivalente (Cf. "Perspectives"). Cette option n'ayant pas été retenue, nous avons considéré différents niveaux de test pour chaque méthode : 10%, 20% et 30%. Ces méthodes seront donc comparées pour $a > 0$, en gardant en mémoire que leur performance pour $a = 0$ n'est pas équivalente.

Pour déterminer les méthodes ayant le plus d'intérêt pour une utilisation industrielle, nous cherchons celles présentant l'erreur quadratique moyenne relative intégrée (*RMISE*) d'estimation de la longueur du transitoire la plus faible sur tout le plan d'expériences. Ce choix revient à donner arbitrairement la même importance probabiliste à chaque point du plan d'expériences, et à évaluer l'erreur globale de chaque méthode sur cet espace d'aire normalisée à 1.

Les critères $RMSE$ et $RMISE$ sont sans dimension, et donnent un ordre de grandeur de la précision relative de chaque méthode.

Par exemple, une méthode de suppression du transitoire systématique de 0 étape (ou "suppression nulle"), donnerait $RMISE=1$, car $\forall \left(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N}\right), RMSE\left(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N}\right)=1$; tandis qu'une méthode

de suppression du transitoire systématiquement exacte, donnerait $RMISE=0$, car

$$\forall \left(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N}\right), RMSE\left(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N}\right)=0 .$$

On compare ainsi la performance de suppression du régime transitoire avec la méthode de référence

$lim-D^2\%0.1:1$, et une méthode proche de celle proposée par Heidelberger et Welch [HEID] :

$lim-M_B\%0.1:1$ (illustration 37).

La méthode $lim-D^2\%0.1:1$ semble peu performante, car l'erreur quadratique moyenne est proche de 1 quelles que soient les caractéristiques du transitoire. On observe cependant que la

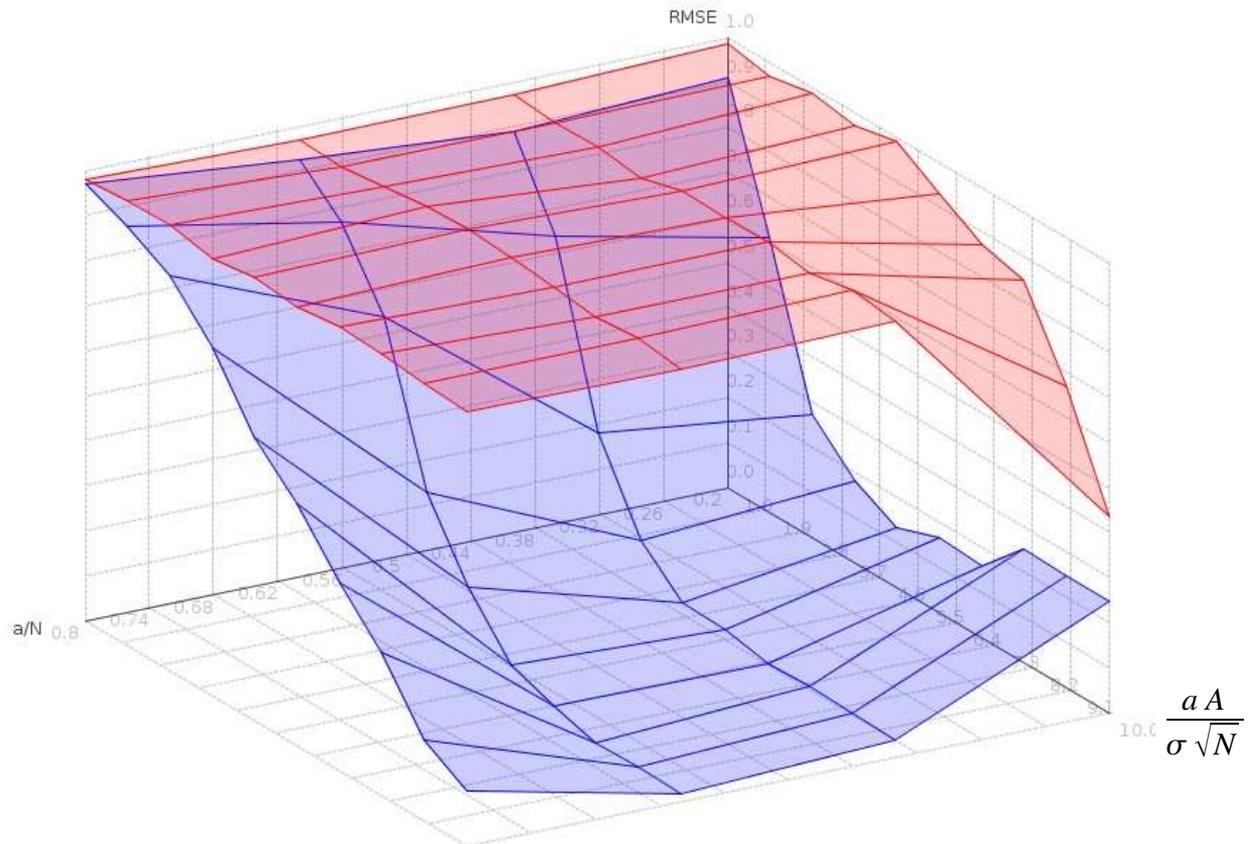
méthode $lim-M_B\%0.1:1$ est plus efficace, en particulier lorsque $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$ est grand (i.e.

l'impact du transitoire sur le k-effectif du système est fort) et lorsque $\frac{a}{N}$ est proche de 0.5.

Toutefois, si le biais relatif du transitoire est faible (i.e. $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}} \leq 3$) alors la performance est notablement dégradée.

En intégrant ces $RMSE$ sur tout l'espace de variation, on obtient :

$$RMISE(lim-D^2\%0.1:1)=0.95 \text{ et } RMISE(lim-M_B\%0.1:1)=0.36 .$$



■ Lim-M_B%0.1:1 ■ Lim-D²%0.1:1

Illustration 37 : Performance locale (erreur quadratique moyenne relative) de l'estimation de la longueur du transitoire avec les méthodes :

- $lim - M_B \% 0.1 : 1$:
 - statistique de détection du transitoire par l'extremum du pont "brownien" : M_B ,
 - erreur de première espèce : 10%,
 - distribution nulle : asymptotique,
 - (i.e. tabulée sur une séquence de k -effectifs d'étapes de longueur 500 et d'autocorrélation 0.2)
 - arrêt des itérations de troncature à la première étape diagnostiquée stationnaire,
- $lim - D^2 \% 0.1 : 1$:
 - statistique de détection du transitoire du χ^2 : D^2 ,
 - erreur de première espèce : 10%,
 - distribution nulle : asymptotique,
 - arrêt des itérations de troncature à la première étape diagnostiquée stationnaire.

VI.2.2. Analyse des résultats

En premier lieu, on observe la distribution des *RMISE* de toutes les méthodes de suppression de transitoire (illustration 38) :

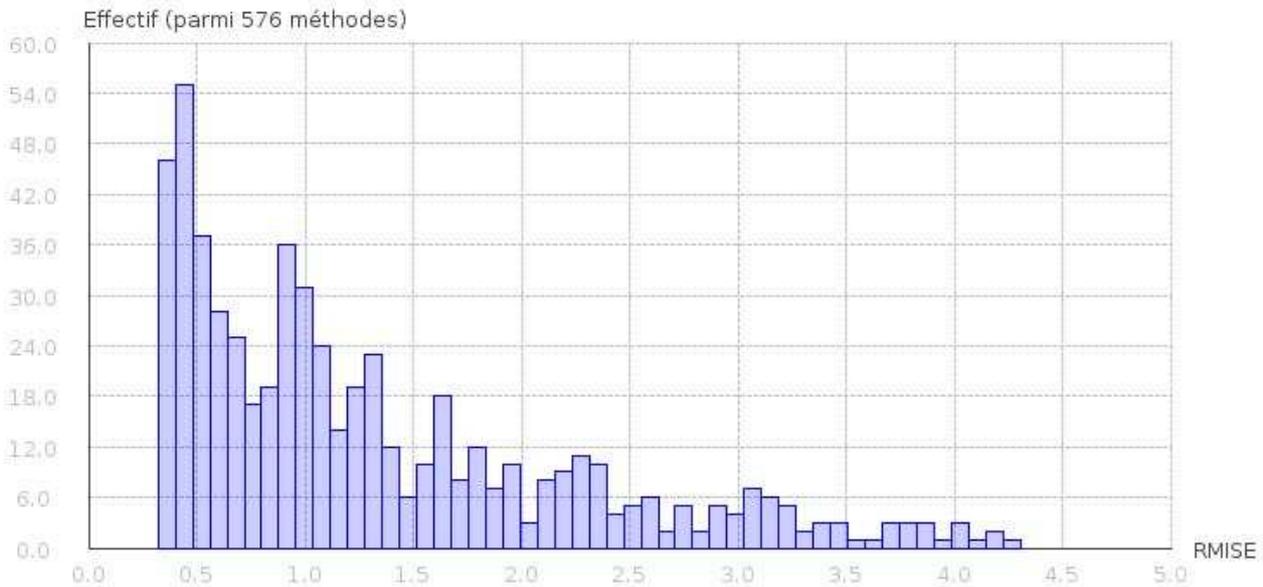


Illustration 38 : Distribution des erreurs quadratiques moyennes relatives intégrée des 576 méthodes de suppression de transitoire testées.

Cette distribution montre que certaines méthodes présentent une erreur nettement inférieure à celle de la suppression nulle ($RMISE=1$), et qu'un nombre élevé de méthodes sont notoirement inefficaces ($RMISE>1$).

Nous analysons maintenant ces résultats plus précisément pour tenter de caractériser l'efficacité des paramètres des différentes méthodes.

Les tendances empiriques présentées par la suite donnent non seulement des informations sur la performance des méthodes, mais aussi sur la précision des indicateurs de performance (*RMISE* et

$RMSE\left(\frac{a A}{\sigma \sqrt{N}}, \frac{a}{n}\right)$). Cependant, cette approche n'est pas suffisante pour interpréter complètement

certains phénomènes que nous allons observer. Il aurait en effet été souhaitable de disposer d'un échantillon plus conséquent (1000 ou 10000 réalisations du même modèle de séquence de *k*-effectifs d'étapes contaminés au lieu de 100), pour l'instant hors de portée calculatoire. Nous sommes donc réduit à n'exploiter ces résultats qu'en gardant à l'esprit cette imprécision, et donc à ne s'intéresser qu'à des phénomènes observés de manière significative.

VI.2.2.1. Distributions nulles asymptotiques et paramétrées

En s'interrogeant sur la pertinence du choix entre les distributions nulles asymptotiques ou paramétrées dans le test de stationnarité, on peut comparer globalement l'efficacité de ces deux approches sur l'ensemble des méthodes testées (illustration 39).

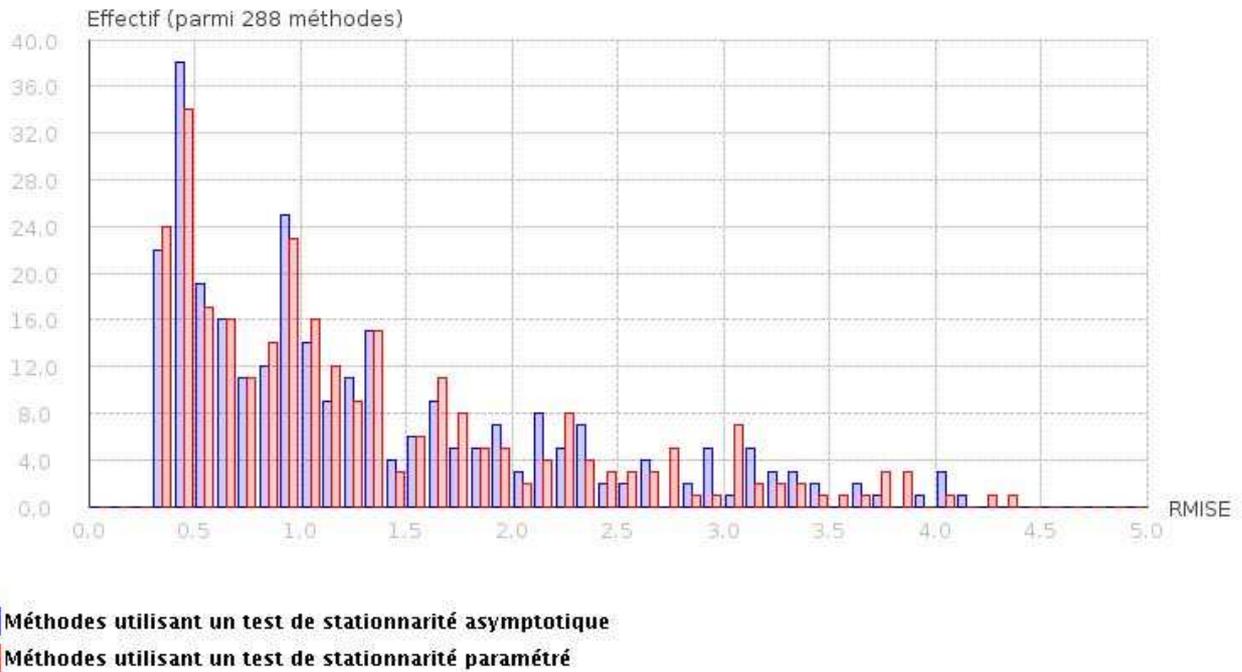


Illustration 39: Distribution des erreurs quadratiques moyennes relatives intégrées des méthodes de suppression de transitoire utilisant des distributions nulles asymptotiques (288 méthodes) ou paramétrées (288 méthodes)

On constate que l'approche paramétrée n'est pas globalement plus performante, et en outre une analyse plus fine montrera que le choix de l'une ou l'autre approche n'a que peu d'impact sur la *RMISE* de chaque méthode. Cette déconvenue quant à l'usage d'une approche paramétrée de la distribution nulle peut s'expliquer par la sensibilité de l'ajustement de la distribution nulle à la variance du paramètre de nuisance $\hat{\rho}$ et aussi, dans une moindre mesure, par l'interpolation linéaire en (N, ρ) (voir Illustration 40 un exemple sur 3 méthodes).

Méthode	$E[n-a]$	StDev(n)	RMSE
$lim - M_B \% 0.1 : 1$	-43.41	39.63	0.2939
$param_{\hat{\rho}} - M_B \% 0.1 : 1$	-44.57	40.72	0.3018
$param_{\rho} - M_B \% 0.1 : 1$	-42.76	39.96	0.2926

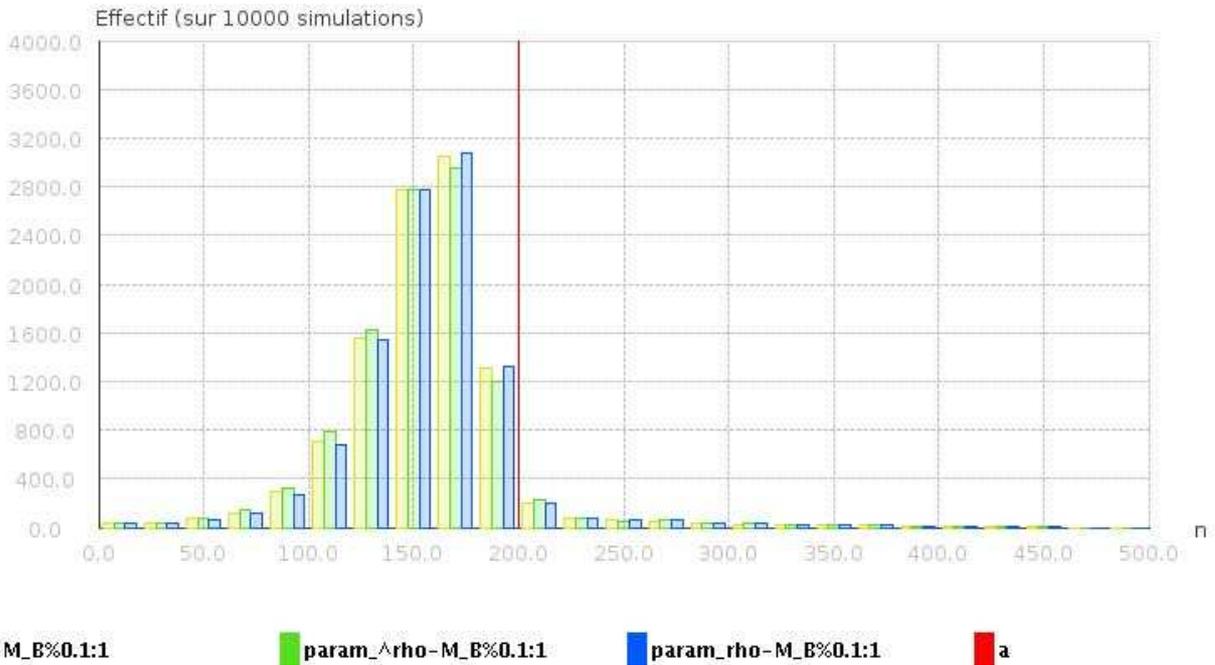


Illustration 40: Distributions de l'estimation de la longueur du transitoire sur 10000 séquences de k -effectifs d'étapes ($N=500$, $\rho=0.2$, $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=5$, $\frac{a}{N}=0.4$) :

- distribution nulle asymptotique :

$$\lim - M_B \% 0.1 : 1 ,$$

- distribution nulle paramétrée :

- avec estimation de ρ (cas réel, présentant donc une nuisance) : $param_{\hat{\rho}} - M_B \% 0.1 : 1 ,$

- sans estimation de ρ (cas théorique) :

$$param_{\rho} - M_B \% 0.1 : 1 .$$

L'analyse de ces résultats montre :

- qu'à condition que ρ soit parfaitement connu (et non pas estimé), l'utilisation d'une distribution de référence paramétrée conduit à une faible réduction du biais d'estimation,
- sinon (i.e. en condition réelle) l'utilisation d'une distribution de référence asymptotique est légèrement plus efficace.

Notons que l'approche asymptotique bénéficie artificiellement d'un paramétrage idéal car la tabulation des distributions asymptotiques est effectuée avec la même autocorrélation que celle utilisée dans le plan d'expériences ($\rho=0.2$). Ce coefficient d'autocorrélation par défaut ayant été défini pour correspondre au retour d'expérience obtenu sur des calculs de criticité réels.

Finalement, l'utilisation de distributions nulles paramétrées ne produisant aucune amélioration sensible, pour simplifier l'analyse des résultats suivants, on choisira arbitrairement de ne s'intéresser qu'aux méthodes utilisant les distributions asymptotiques.

VI.2.2.2. Méthodes de meilleures performances

Pour caractériser les paramètres conduisant aux meilleures performances, on s'intéresse aux méthodes utilisant une distribution nulle asymptotique et présentant une *RMISE* inférieure à 0.4 (critère arbitraire).

Méthode	<i>RMISE</i>
$lim - LL_B \% 0.1 : 0.2$	0.396
$lim - LLM_B \% 0.3 : 1$	0.395
$lim - E_S \% 0.1 : 1$	0.387
$lim - E_{LL} \% 0.1 : 1$	0.387
$lim - E_{LL} \% 0.2 : 1$	0.385
$lim - E_B \% 0.1 : 0.2$	0.381
$lim - LL_S \% 0.3 : 1$	0.379
$lim - E_B \% 0.1 : 1$	0.378
$lim - LL_S \% 0.1 : 0.2$	0.377
$lim - LLM_B \% 0.2 : 1$	0.376
$lim - LLM_B \% 0.1 : 1$	0.373

Méthode	<i>RMISE</i>
$lim - LL_B \% 0.1 : 1$	0.371
$lim - LL_B \% 0.2 : 1$	0.370
$lim - RM_B \% 0.3 : 1$	0.364
$lim - M_B \% 0.1 : 1$	0.362
$lim - M_B \% 0.2 : 1$	0.357
$lim - LL_S \% 0.2 : 1$	0.351
$lim - E_S \% 0.2 : 1$	0.341
$lim - E_B \% 0.2 : 1$	0.335
$lim - E_S \% 0.3 : 1$	0.334
$lim - E_B \% 0.3 : 1$	0.334
$lim - LL_S \% 0.1 : 1$	0.331

En somme, apparaissent :

- des méthodes basées sur le pont brownien : $lim - E_B \% 0.3 : 1$, $lim - M_B \% 0.2 : 1$, $lim - RM_B \% 0.3 : 1$, $lim - LL_B \% 0.2 : 1$, $lim - LLM_B \% 0.1 : 1$, ...,
- des méthodes basées sur le pont de Student : $lim - LL_S \% 0.1 : 1$, $lim - E_S \% 0.3 : 1$, ...,
- des méthodes basées sur le pont de vraisemblance : $lim - E_{LL} \% 0.2 : 1$, ...,
- aucune méthode basée sur les statistiques de conformité d'échantillon (statistique du χ^2 , de Kolmogorov ou de Cramer von Mises).

En observant ces résultats, on perçoit également que certains paramètres des méthodes sont plus ou moins représentés.

Processus ponts

On constate la fréquence des variables LL_S , E_S et E_B parmi ces méthodes les plus performantes. En outre, on remarque la faible présence du pont de vraisemblance. Si l'on compare les performances locales de la méthode $lim-E_{LL}\%0.2:1$ avec la meilleure méthode $lim-LL_S\%0.1:1$, on voit effectivement que des longueurs de transitoires faibles semblent plus pénalisantes pour $lim-E_{LL}\%0.2:1$ (illustration 41).

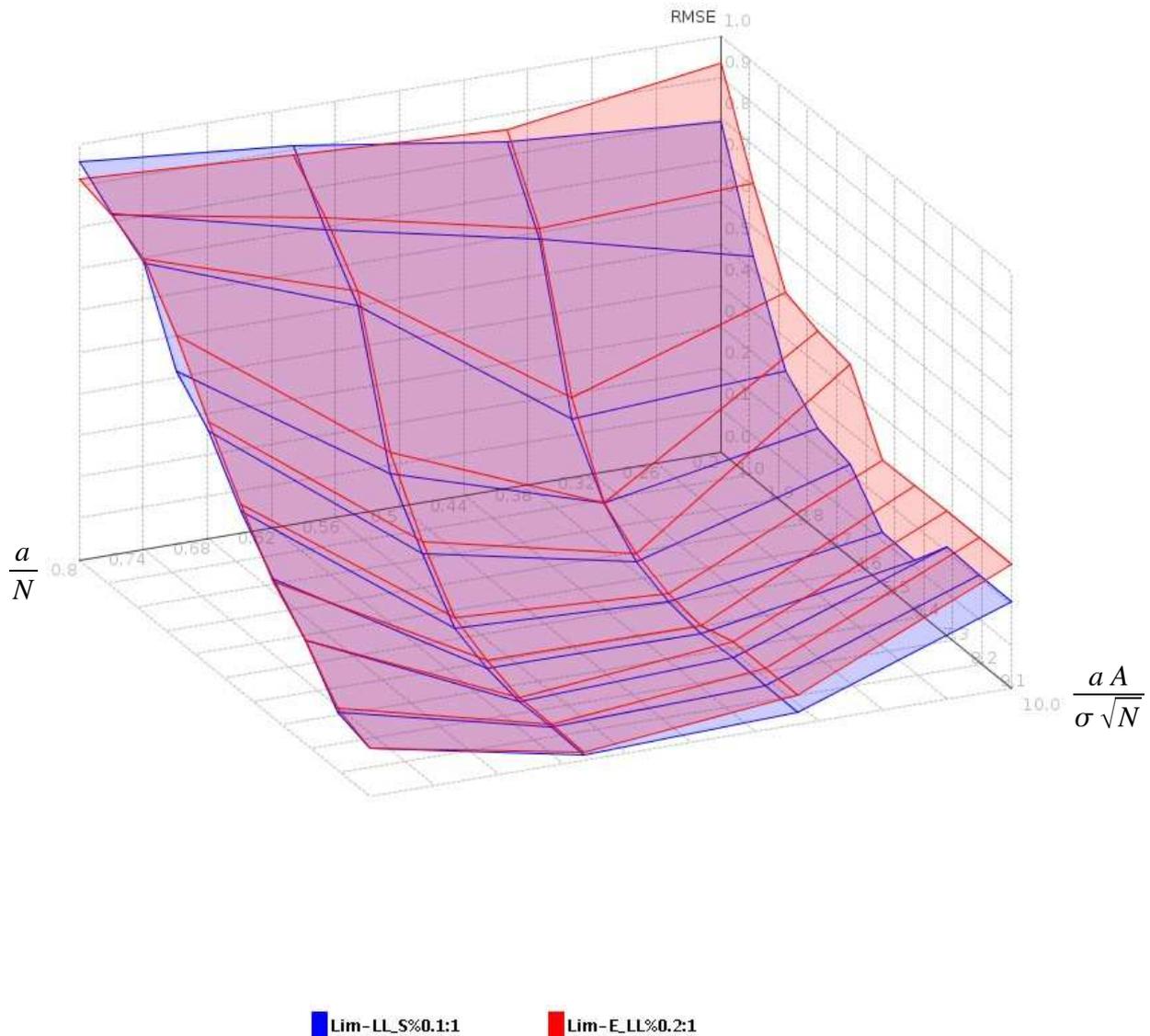


Illustration 41 : Performance locale de l'estimation de la longueur du transitoire par les méthodes $lim-LL_S\%0.1:1$ et $lim-E_{LL}\%0.2:1$.

Heuristiques d'arrêt de troncature et niveau de test

On note également l'absence des heuristiques d'arrêt de troncature "0.4" et "0.6" (i.e. fin des itérations de troncature pour 40 % ou 60 % des itérations suivantes diagnostiquant la stationnarité), trop contraignantes pour la validation de la stationnarité et conduisant à de fréquentes sur-estimations de la longueur du transitoire (exemple pour le cas "0.6", illustration 42)

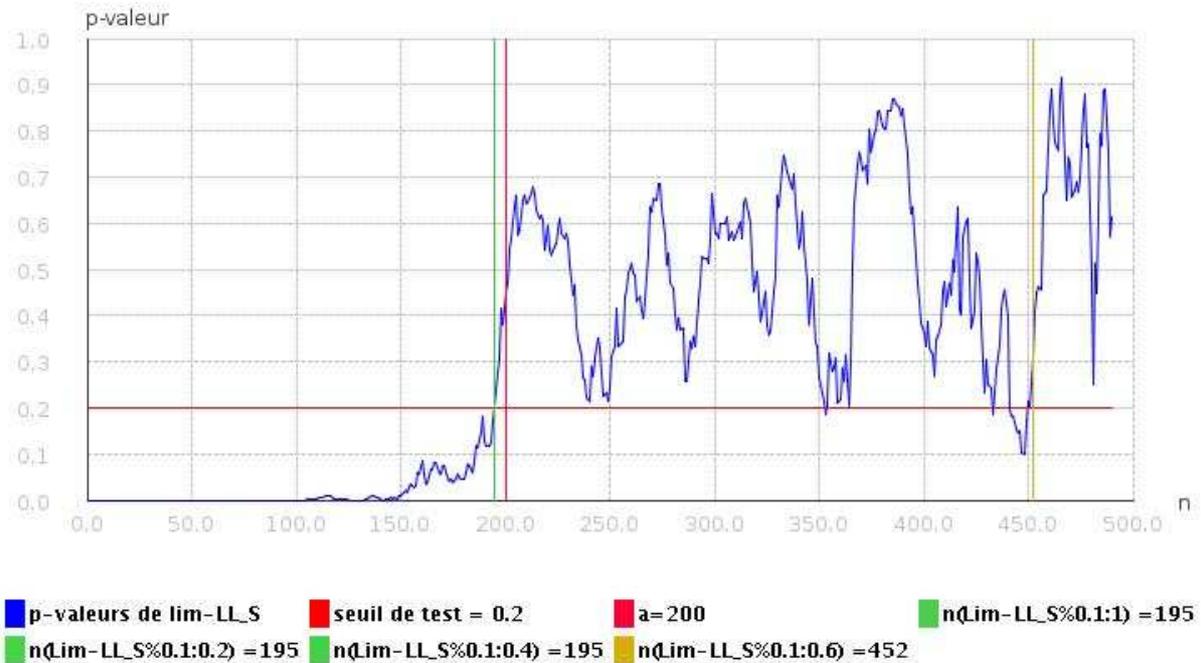


Illustration 42 : Exemple de séquence des p-valeurs du test $\lim-LL_S$ et estimations de n pour les méthodes $\lim-LL_S\%0.1:1$, $\lim-LL_S\%0.1:0.2$, $\lim-LL_S\%0.1:0.4$,

$$\lim-LL_S\%0.1:0.6 \text{ avec } \frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}=5, a=200, N=500, \rho=0.2 .$$

Tout en gardant à l'esprit la relative imprécision des résultats obtenus qui peut mettre en cause l'analyse suivante*, nous nous intéressons maintenant à la meilleure méthode identifiée

$\lim-LL_S\%0.1:1$:

- statistique de détection du transitoire par la vraisemblance du pont de Student : LL_S ,
- erreur de première espèce : 10%,
- distribution nulle asymptotique,
- arrêt des itérations de troncature pour la première étape diagnostiquée,

présentant une efficacité globale de $RMISE(\lim-LL_S\%0.1:1)=0.331$ et la performance locale $RMSE$ présentée sur l'illustration 43.

* notons que les méthodes de performance proche présentent cependant des résultats très similaires

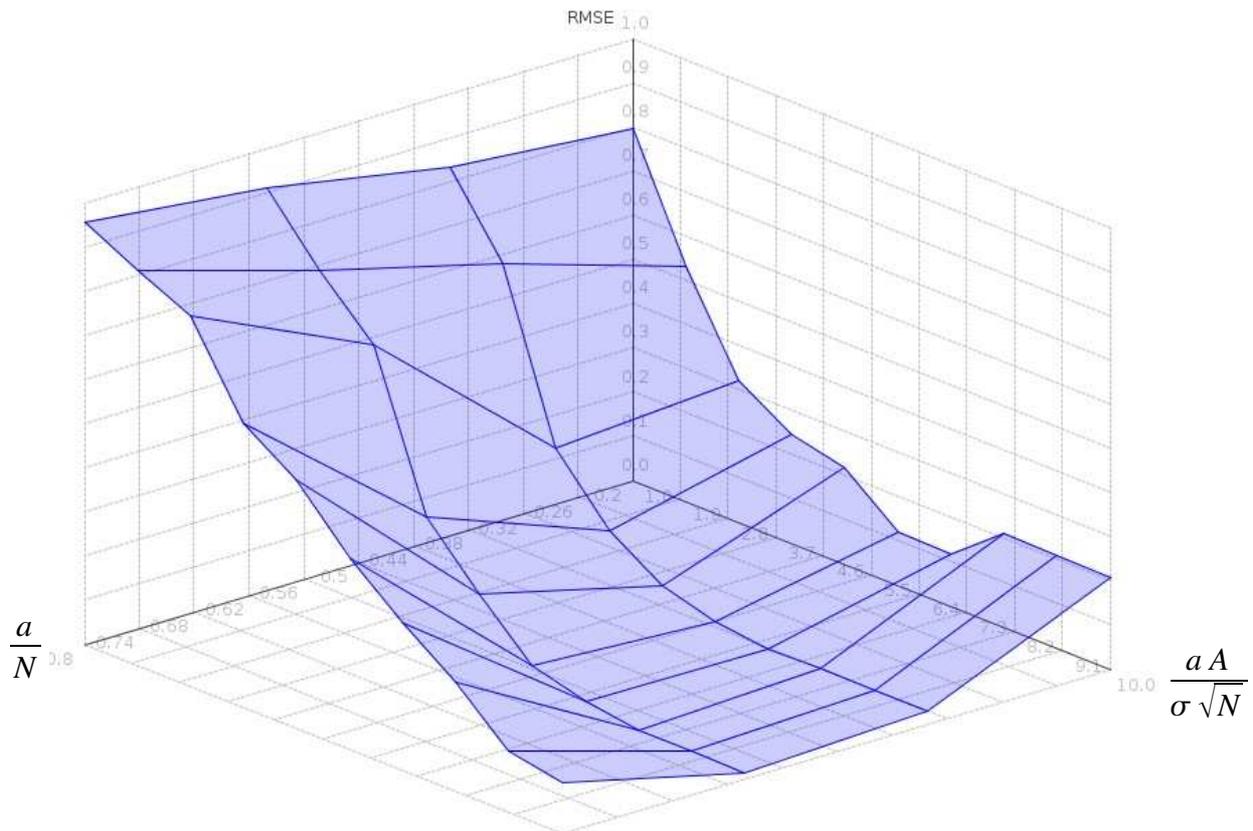


Illustration 43 : Erreur quadratique moyenne relative d'estimation de la longueur du transitoire pour la méthode $lim-LL_s\%0.1:1$.

On observe sans surprise que la précision de la suppression de transitoire décroît notablement lorsque :

- $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$ devient faible, ce qui caractérise un régime transitoire de faible impact sur le k-effectif du système,
- et $\frac{a}{N}$ est grand, ce qui caractérise un régime transitoire long, donc de moindre

amplitude pour $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$ constant (tableaux 1, 2).

Plus précisément, l'efficacité de cette méthode est maximale lorsque $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}} \geq 6$ et $\frac{a}{N} \leq 0.6$ (illustration 44).

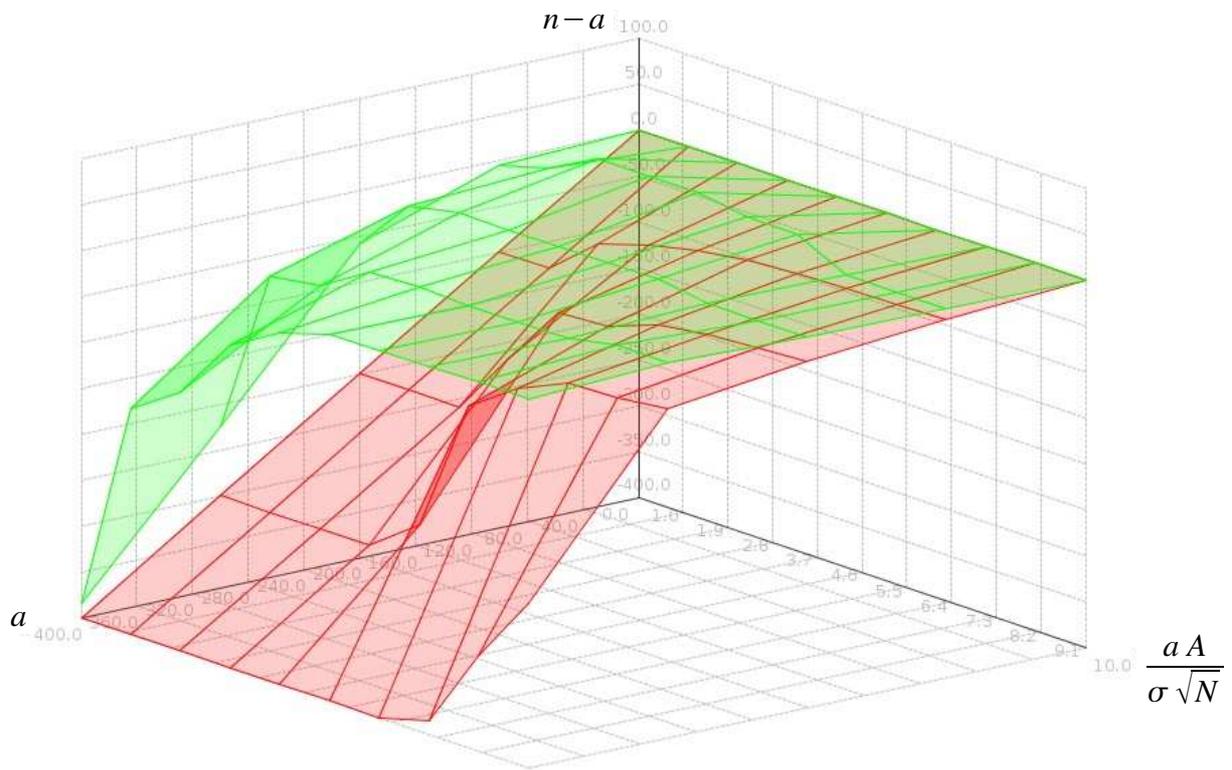


Illustration 44 : Distributions de l'erreur absolue d'estimation de la longueur du transitoire $n-a$ pour la méthode $lim-LL_s\%0.1:1$: quantiles à 10% et 90%.

VI.2.3. Conclusions

Ce plan d'expériences de régimes transitoires a permis de dégager quelques conclusions sur chaque élément constituant les méthodes de suppression de transitoire :

- l'approche "limite" ou "asymptotique" de la distribution de cette variable de décision sous hypothèse nulle semble équivalente,
- les variables de décision basées sur le pont de Student et le pont brownien semblent plus pertinentes, en particulier $E_S, LL_S, E_B, M_B, LL_B$,
- pas d'influence évidente de l'erreur de première espèce pour $a > 0$,
- meilleure performance des heuristiques d'arrêt de la troncature itérative "1" et "0.2" par rapport aux heuristiques "0.4" et "0.6".

En outre, le domaine de validité de la meilleure méthode a été circonscrit relativement à la

longueur du transitoire $\frac{a}{N}$ et au biais normalisé sur le k-effectif du système $\frac{aA}{\sigma \sqrt{N}}$.

Nous avons maintenant une première évaluation de la pertinence des méthodes de suppression de transitoire sur ce plan de régimes transitoires théoriques qu'il convient de confronter à une application réelle, c'est à dire sur des séquences de k-effectifs d'étapes réels obtenues par le code Monte-Carlo de criticité MORET.

Si une caractérisation des méthodes de suppression de transitoires (i.e. leur domaine de validité, leur performance) a été faite sur un plan d'expériences, les hypothèses simplificatrices de modélisation des k-effectifs d'étapes (en régimes stationnaires et transitoires) interdisent a priori de généraliser ces résultats aux calculs Monte-Carlo de criticité réels.

En outre, pour une configuration géométrico-chimique donnée, le régime transitoire est dépendant de l'initialisation du générateur pseudo-aléatoire utilisé par la simulation. Une configuration géométrico-chimique ne génère donc pas un seul régime transitoire de caractéristiques fixées, mais une population de transitoires aléatoires lorsque on considère le générateur pseudo-aléatoire de la simulation comme la variable stochastique. Mais les caractéristiques de cette population de transitoires générée étant inconnues, la modélisation de cette performance sur la configuration géométrico-chimique n'est donc pas déductible des performances des transitoires paramétrés du plan d'expériences.

Finalement, la définition de plusieurs expériences de calculs de criticité doit permettre de vérifier l'efficacité des méthodes de suppression de transitoire dans un cadre plus proche d'une exploitation industrielle réelle.

VI.3. Configurations géométrico-chimiques de criticité

Deux expériences ou « benchmarks » de calculs de criticité inspirés de ceux proposés par le groupe de travail de l'OCDE sur la convergence des calculs de criticité [EGSC] sont modélisés avec le code MORET permettant d'obtenir toutes les informations nécessaires : k-effectifs (estimateur source-corde [JACQ1]) et positions des neutrons à chaque étape [RICH3]. De récents développements ont permis d'accéder à des informations très complètes sur le déroulement de la simulation telles la valeur à chaque étape de tous les estimateurs du k-effectif, ainsi que la position absolue et la pondération des neutrons. Si certaines de ces informations étaient déjà partiellement accessibles dans les versions précédentes de MORET, l'équipe de développement a su formaliser les besoins de la problématique de suppression du transitoire initial, puis implémenter rapidement ces spécifications dans la version du code actuellement en production.

L'objectif des benchmarks étant l'estimation de la performance des méthodes de suppression du transitoire, il est nécessaire de pouvoir évaluer le biais d'estimation de la longueur du transitoire, à l'instar des simulations du plan d'expériences. La démarche retenue consiste à définir cette longueur de transitoire des k-effectifs d'étapes comme identique à la longueur du transitoire de migration des neutrons. Si cette hypothèse n'est pas rigoureusement exacte (ces deux transitoires pouvant être de longueurs légèrement différentes), elle permet cependant de définir une heuristique stable et assez précise d'estimation de la longueur réelle du transitoire des k-effectifs d'étapes.

Ainsi, pour une configuration géométrico-chimique fixée, la performance est modélisée par l'erreur quadratique moyenne d'estimation de la longueur du transitoire $E\left[\left(\frac{n-a}{a}\right)^2\right]$ sur la population des transitoires de la configuration, où n est la longueur estimée du transitoire, et a est la longueur du transitoire de convergence des neutrons.

VI.3.1. Réseaux de sphères d'uranium métallique

Le benchmark n°4 du groupe de travail sur la convergence des calculs de criticité de l'OCDE propose d'étudier un réseau de 5x5x1 sphères d'uranium métallique. La sphère positionnée au centre du réseau est légèrement plus grosse que les autres, et intègre donc l'essentiel de la réactivité du système neutronique. A l'initialisation du calcul, l'essentiel des neutrons sont positionnés dans une autre sphère, et une migration des neutrons vers la sphère centrale génère donc un transitoire de la séquence des k-effectifs d'étapes [BLOM, EGSC2]. Nous redéfinissons quelques paramètres de ce benchmark pour mieux l'adapter à notre étude, et en particulier à la longueur des simulations étudiées (500 étapes au lieu des 1000 étapes définies dans les spécifications originales de l'OCDE).

On considère un réseau carré de 5x5x1 sphères d'uranium métallique fortement enrichi en U235 séparées par de l'air (illustration 45). La distance entre les centres des sphères est de 50 cm. Toutes les sphères ont la même composition chimique. Le rayon de la sphère centrale est de 10 cm, tandis que le rayon des autres sphères est de 9 cm.

Les compositions du milieu combustible et de l'air sont les suivantes (en atomes/barn.cm):

- Uranium métallique fortement enrichi en U235 : U_{235} 4.549E-02, U_{238} 2.560E-03,
- Air : N 4.3250E-5, O 1.0810E-5

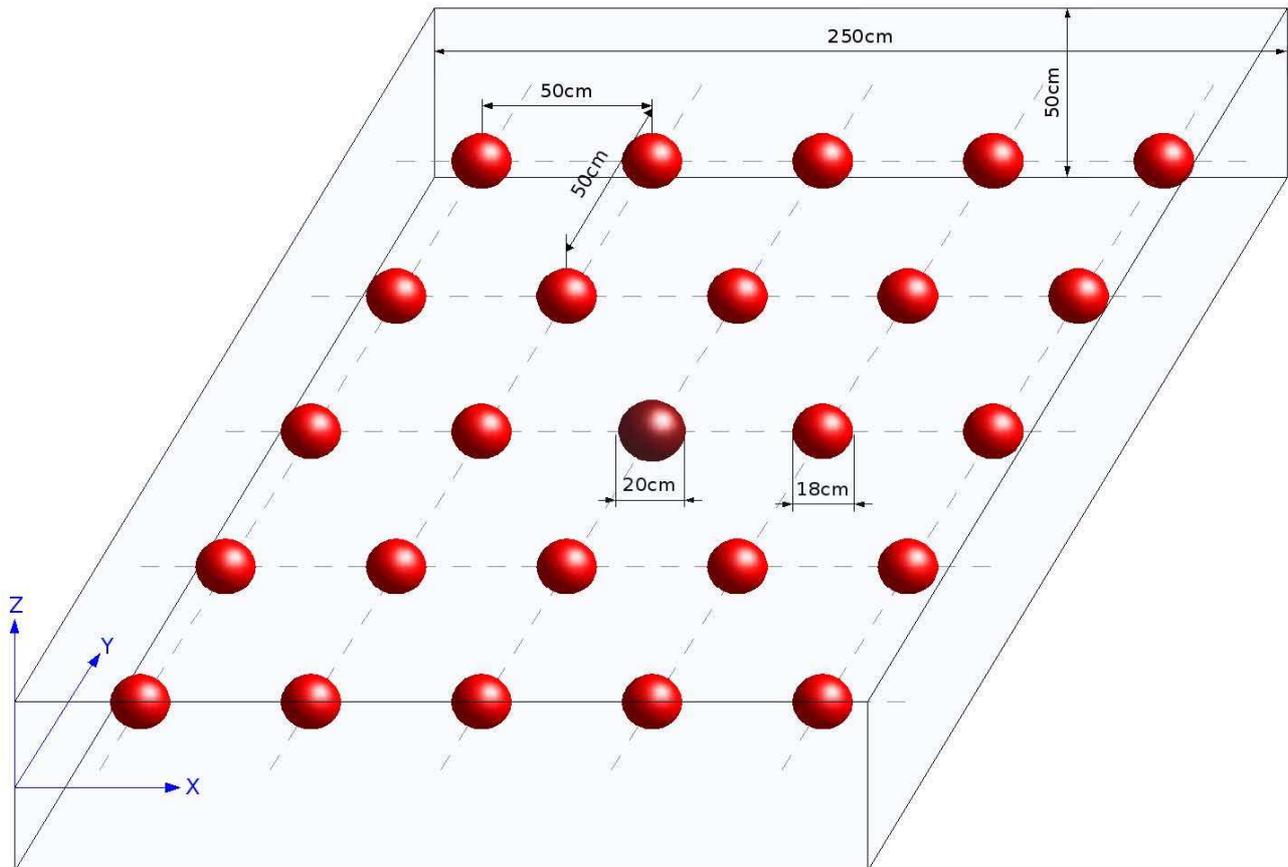


Illustration 45 : Réseau de 5x5x1 sphères d'uranium métallique dans l'air.

Les simulations sont faites avec 100 neutrons par étape, sur 500 étapes. Les neutrons sont initialisés dans la sphère centrée en (25,25,0). Pour caractériser l'efficacité des méthodes de suppression du transitoire sur cette configuration géométrico-chimique, 1000 répliques de la simulation sont réalisées en utilisant différentes initialisations du générateur pseudo-aléatoire.

En outre, un calcul de référence est défini avec 100 neutrons par étape répartis uniformément dans les 25 sphères, sur 6000 étapes avec 1000 étapes inactives (i.e. l'estimation du k-effectif commence seulement après 1000 étapes). Ce calcul de référence permet d'estimer la proportion des neutrons attendus dans la sphère centrale.

Les figures (illustrations 46 à 49) ci-dessous donnent les positions des neutrons (projection sur le plan Z=0) à l'issue d'une simulation.

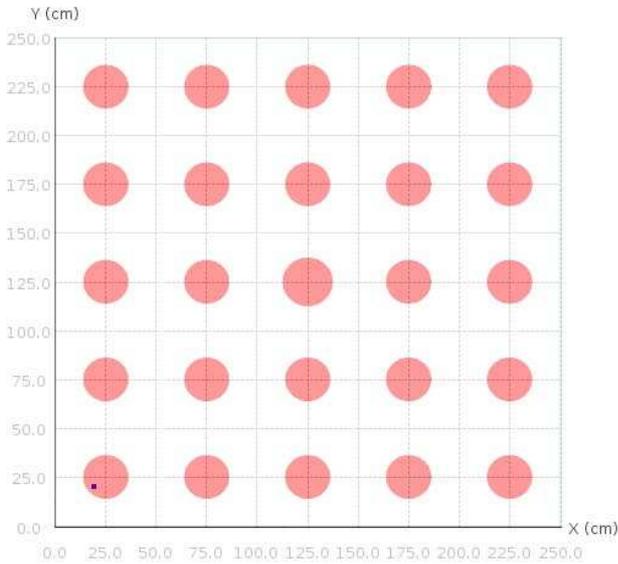


Illustration 46 : Étape initiale
(les neutrons de la sphère (1,1) sont superposés).

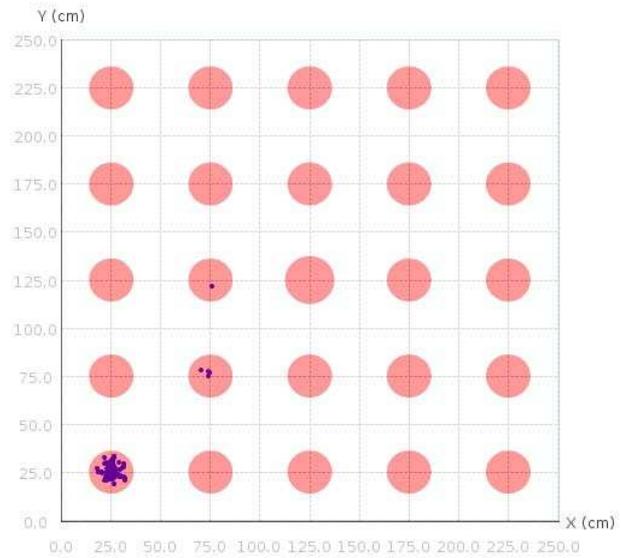


Illustration 47 : Étape 10.

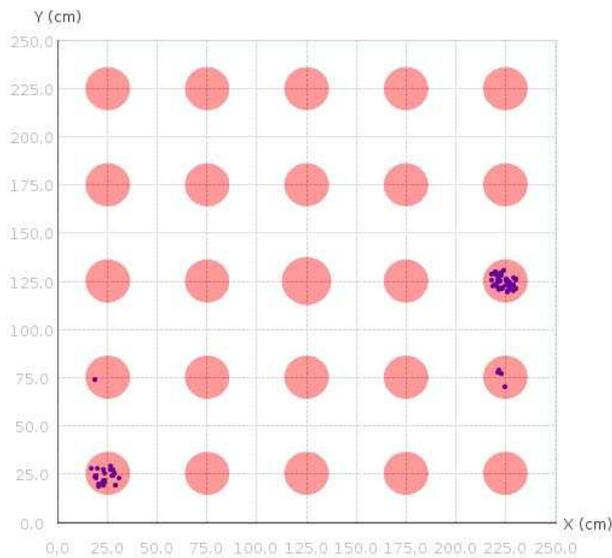


Illustration 48 : Étape 100 :
les neutrons ont rejoint une autre sphère.

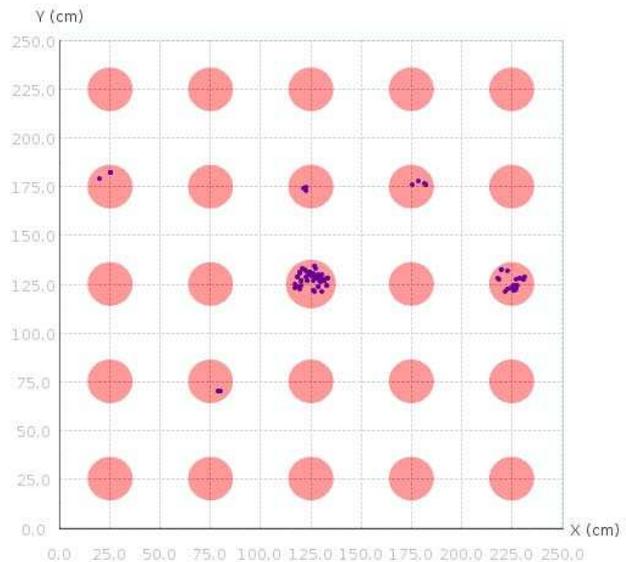


Illustration 49 : Étape 250 : les neutrons ont enfin
convergé dans la sphère centrale.

A l'instar du plan d'expériences, la performance sur une simulation est évaluée par la racine de

l'erreur quadratique moyenne de l'estimation de la longueur du transitoire : $E \left[\left(\frac{n-a}{a} \right)^2 \right]$ sur

l'échantillon des 1000 calculs obtenus avec différentes initialisations du générateur aléatoire. a est défini comme la longueur du transitoire de migration des neutrons, c'est-à-dire le nombre d'étapes nécessaire pour atteindre une distribution des neutrons similaire au calcul de référence (en l'occurrence 50% des neutrons présents dans la sphère centrale).

En premier lieu, si on observe la répartition des deux paramètres de définition du régime transitoire utilisés dans le plan d'expériences précédent, on constate que cette modélisation géométrico-chimique de criticité tend à produire des transitoires majoritairement courts

($\frac{a}{N} < 0.6$) et d'impact assez faible sur le k-effectif ($\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}} < 6$) (illustration 50).

Notons que A et σ sont estimés empiriquement en fonction de a (lui-même estimé par la fin du transitoire des sources) :

- $A = \mu_{a+1,N}^{\hat{}} - \mu_{1,a}^{\hat{}}$,
- $\sigma^2 = \frac{1}{N-a-1} \sum_{i=a+1}^N (k_i - \mu_{a+1,N}^{\hat{}})^2$.

Si le modèle des k-effectifs d'étapes contaminés utilisé dans le plan d'expériences est pertinent, les méthodes de suppression du régime transitoire ne devraient pas être pénalisées par une longueur

excessive du transitoire ($\frac{a}{N} > 0.6$) qui les rend moins performantes. Inversement, le biais sur

l'espérance du k-effectif du système (normalisé par son écart-type) $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$ est assez faible et pourrait donc pénaliser la performance de ces méthodes.

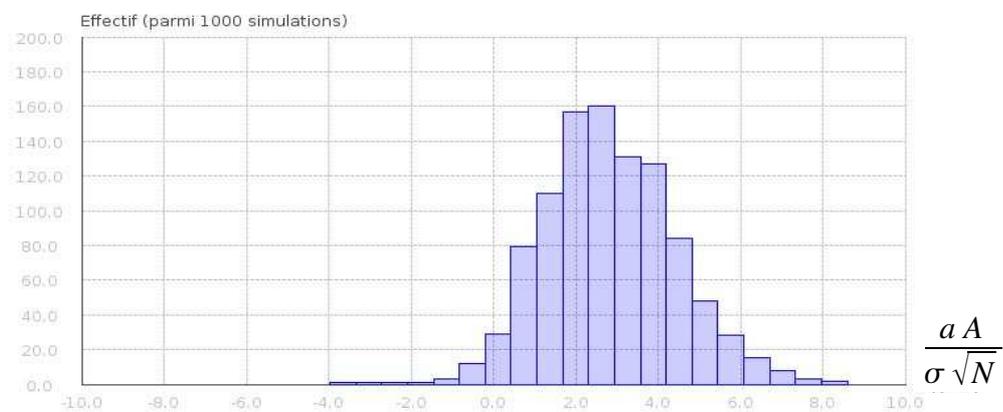
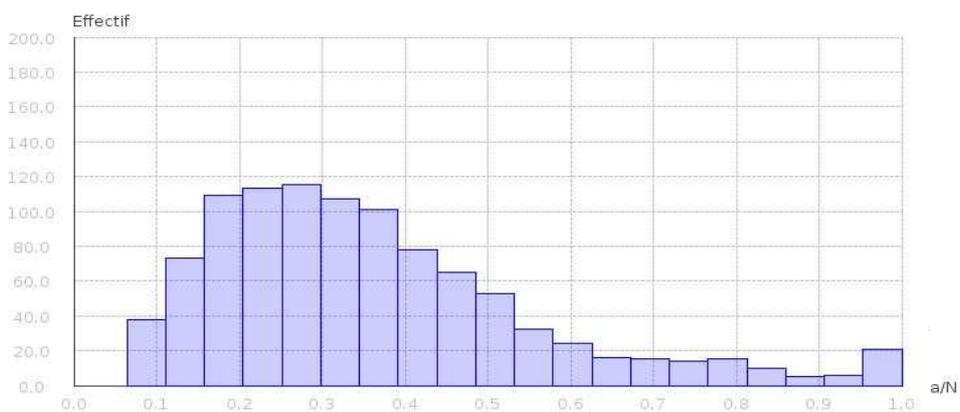
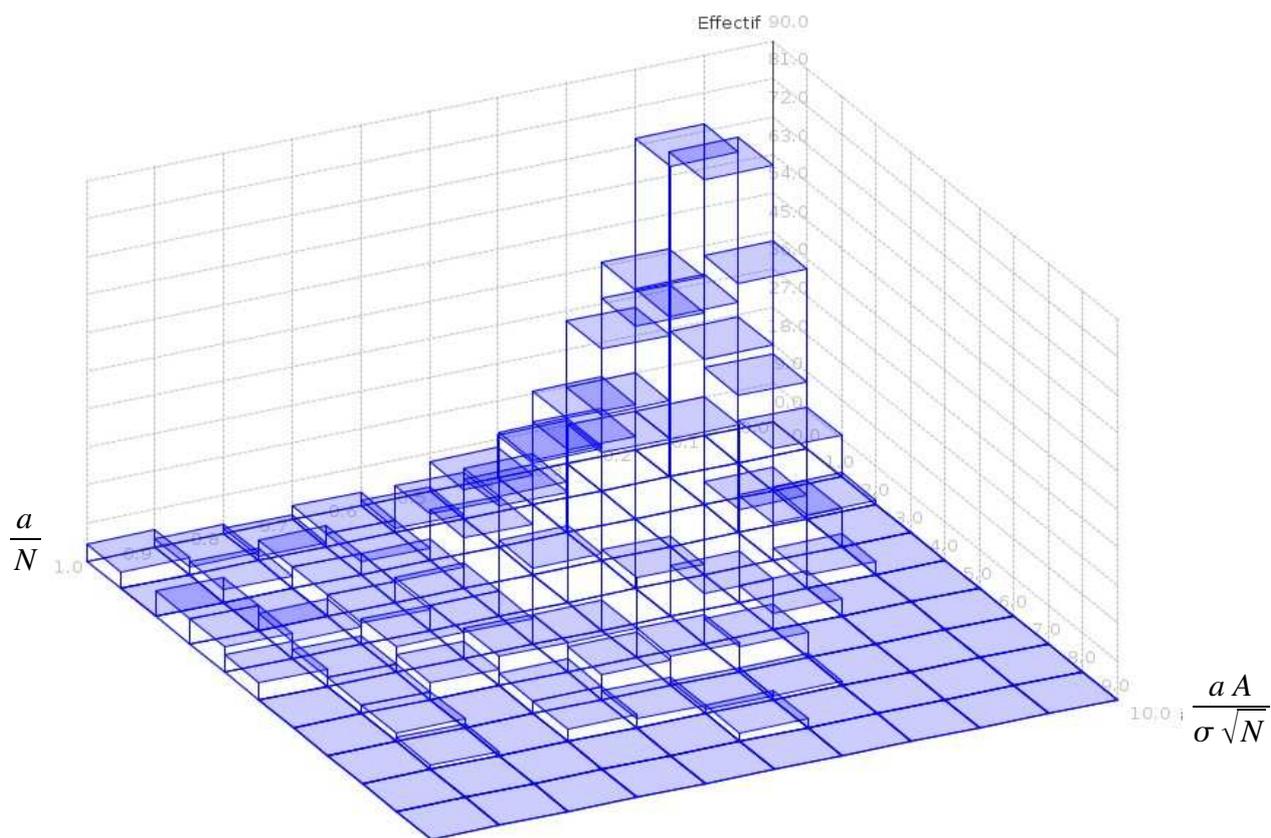


Illustration 50: Distributions des valeurs de $\frac{a}{N}$ et de $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$.

On observe la distribution des performances de toutes les méthodes de suppression de transitoire (illustration 51).

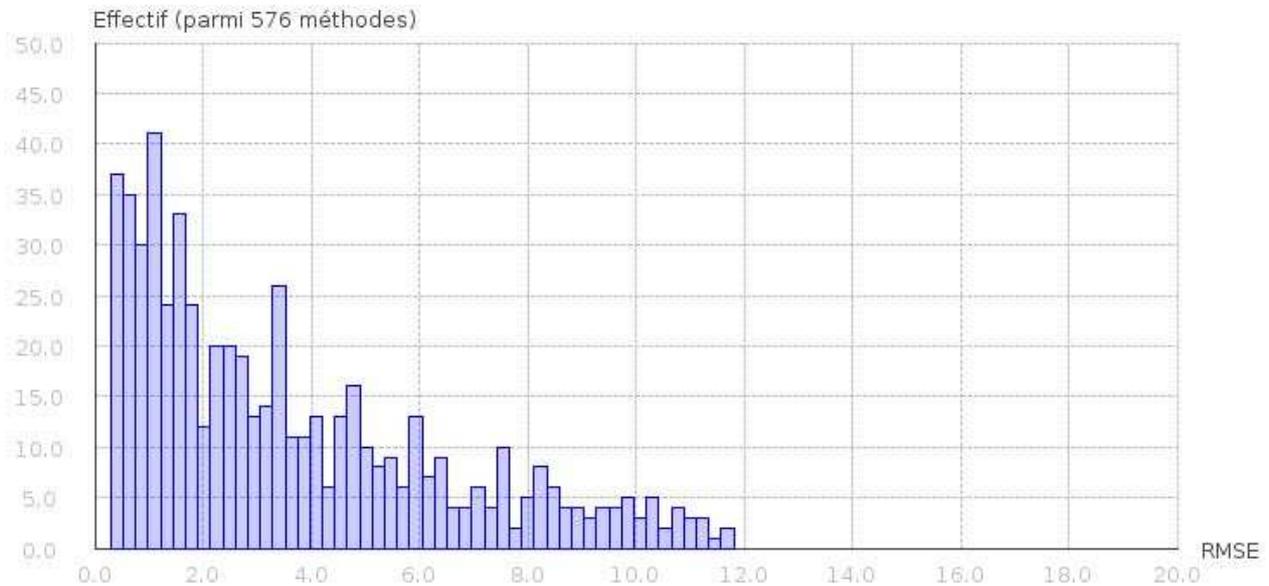


Illustration 51 : Distribution des erreurs quadratiques moyennes relatives des 576 méthodes de suppression de transitoire.

Les meilleures méthodes présentant une RMSE inférieure à 0.4 (critère arbitraire) sont les suivantes :

Méthode	RMSE
$lim - E_B \% 0.1 : 1$	0.396
$lim - E_S \% 0.1 : 1$	0.390
$param - RM_B \% 0.3 : 1$	0.381
$lim - RM_B \% 0.3 : 1$	0.381
$param - E_B \% 0.1 : 1$	0.374
$lim - LL_S \% 0.2 : 1$	0.366
$param - E_S \% 0.1 : 1$	0.365
$lim - E_B \% 0.2 : 1$	0.341
$lim - E_S \% 0.2 : 1$	0.3344

Méthode	RMSE
$param - E_B \% 0.3 : 1$	0.3230
$lim - E_B \% 0.3 : 1$	0.328
$param - LL_S \% 0.1 : 1$	0.327
$param - E_B \% 0.2 : 1$	0.325
$param - E_S \% 0.2 : 1$	0.317
$param - E_S \% 0.3 : 1$	0.305
$lim - E_S \% 0.3 : 1$	0.300
$lim - LL_S \% 0.1 : 1$	0.295

On observe les caractéristiques suivantes, cohérentes avec les observations faites sur le plan d'expériences :

- les variables de détection représentées sont celles du pont de Student et du pont brownien : LL_S, E_S, E_B, M_B ,
- la présence de la variable LL_S dans les meilleurs performances,

- l'équivalence entre les performances d'une même méthode déclinée en version asymptotique et paramétrée : $RMSE(\lim-LL_S\%0.1:1) \approx RMSE(\text{param}-LL_S\%0.1:1)$,
 $RMSE(\lim-E_S\%0.3:1) \approx RMSE(\text{param}-E_S\%0.3:1)$.

Néanmoins, contrairement au plan d'expériences, on constate l'absence de l'heuristique d'arrêt de troncature "0.2".

En visualisant la distribution du biais relatif d'estimation de la longueur du transitoire $\frac{n-a}{a}$ pour un échantillon de ces meilleures méthodes, il apparaît que la longueur du transitoire tend manifestement à être sous-estimée (illustration 52) :

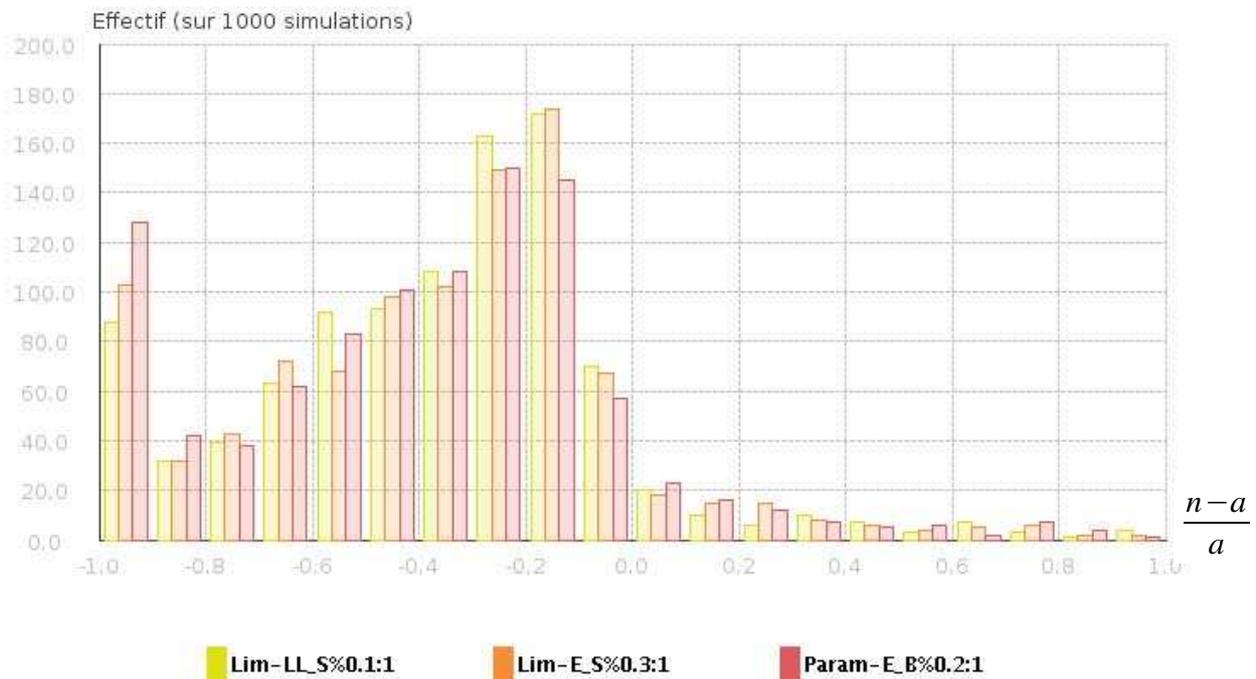


Illustration 52 : Distributions de $\frac{n-a}{a}$ pour les méthodes

$$\lim-LL_S\%0.1:1 \quad , \quad \lim-E_S\%0.3:1 \quad , \quad \text{param}-E_B\%0.2:1 \quad .$$

Finalement, indépendamment du critère d'optimisation des méthodes de suppression de transitoire $RMSE$, on souhaite quantifier l'amélioration apportée au modèle de k-effectif par la suppression du régime transitoire. Nous comparons donc la "meilleure" méthode $\lim-LL_S\%0.1:1$ avec :

- la suppression « nulle » de transitoire (suppression de 0 étape : $n=0$),
- la suppression « exacte » de transitoire (suppression de a étapes : $n=a$),
- la méthode de référence $\lim-D^2\%0.1:1$.

Le bon comportement de la méthode $lim-LL_S\%0.1:1$ se manifeste par une tendance à s'approcher de la suppression « exacte » de transitoire, tant pour le biais que pour l'écart-type de l'estimation du k-effectif du système. Inversement, la méthode $lim-D^2\%0.1:1$ n'améliore pas l'estimation du k-effectif du système par rapport à l'absence de suppression de transitoire (illustration 53).

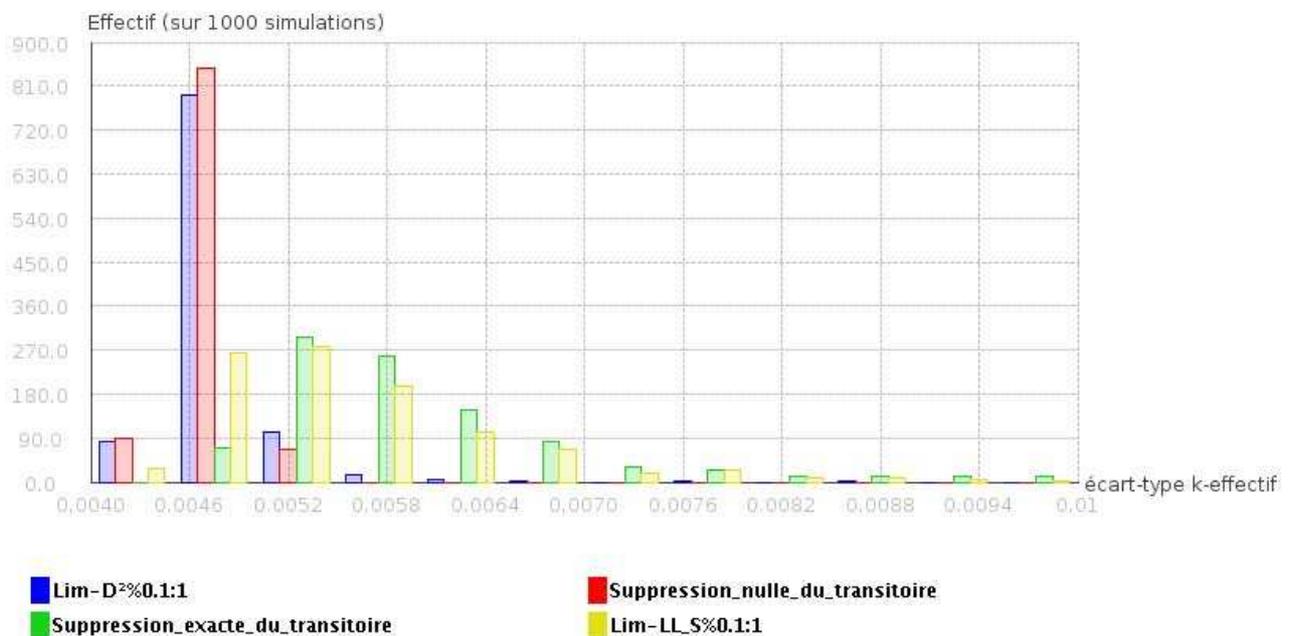
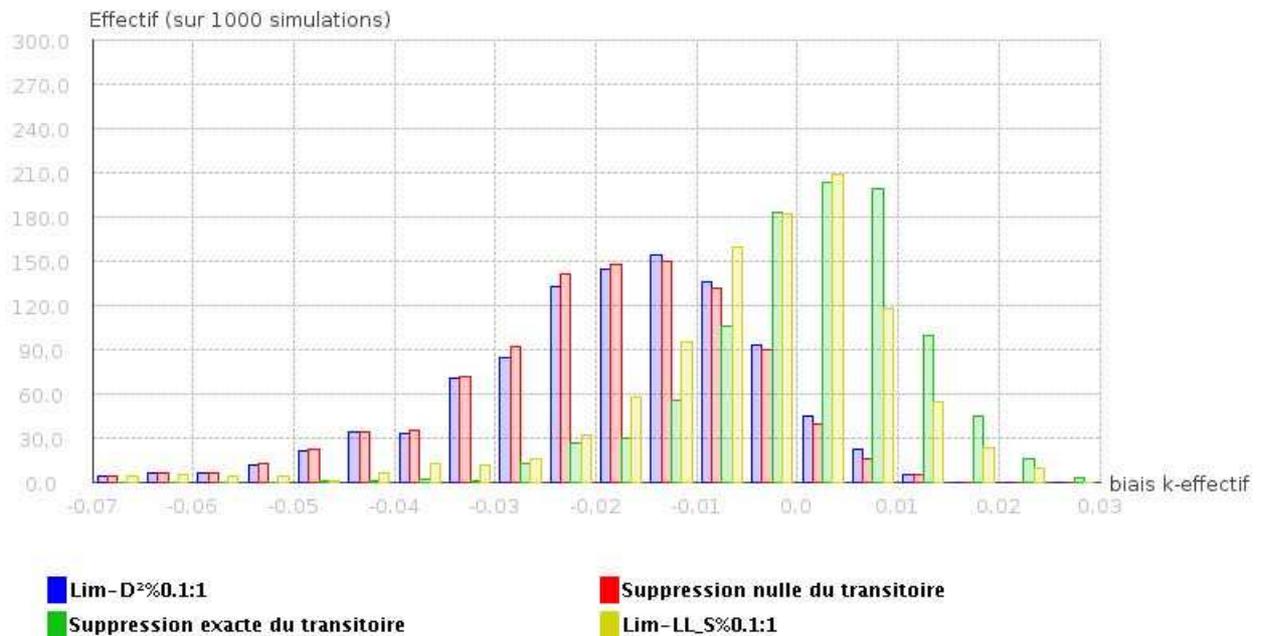


Illustration 53 : Distributions du biais de l'estimation du k-effectif :

$$\mu_{n+1,N}^{\hat{}} - k_{\text{effectif}} \quad \text{et de l'écart-type de l'estimation du k-effectif : } \sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}} .$$

En pratique, dans les expertises de sûreté-criticité, c'est le quantile à 99.865 % du modèle de k-

effectif (soit $\mu_{1,N}^{\hat{}} + 3\sqrt{\frac{\sigma_{1,N}^{\hat{2}}}{N-1}}$) qui doit respecter la valeur limite réglementaire du k-effectif (cette limite tenant compte des marges de sécurité, par exemple 0.95). On souhaite donc que le quantile à 99.865 % du modèle de k-effectif ne sous-estime pas le k-effectif réel après suppression du régime

transitoire : $\mu_{n+1,N}^{\hat{}} + 3\sqrt{\frac{\sigma_{n+1,N}^{\hat{2}}}{N-n-1}} > k_{effectif}$, soit $\frac{\mu_{n+1,N}^{\hat{}} - k_{effectif}}{\sqrt{\frac{\sigma_{n+1,N}^{\hat{2}}}{N-n-1}}} > -3$

(illustration 53, tableau 3).

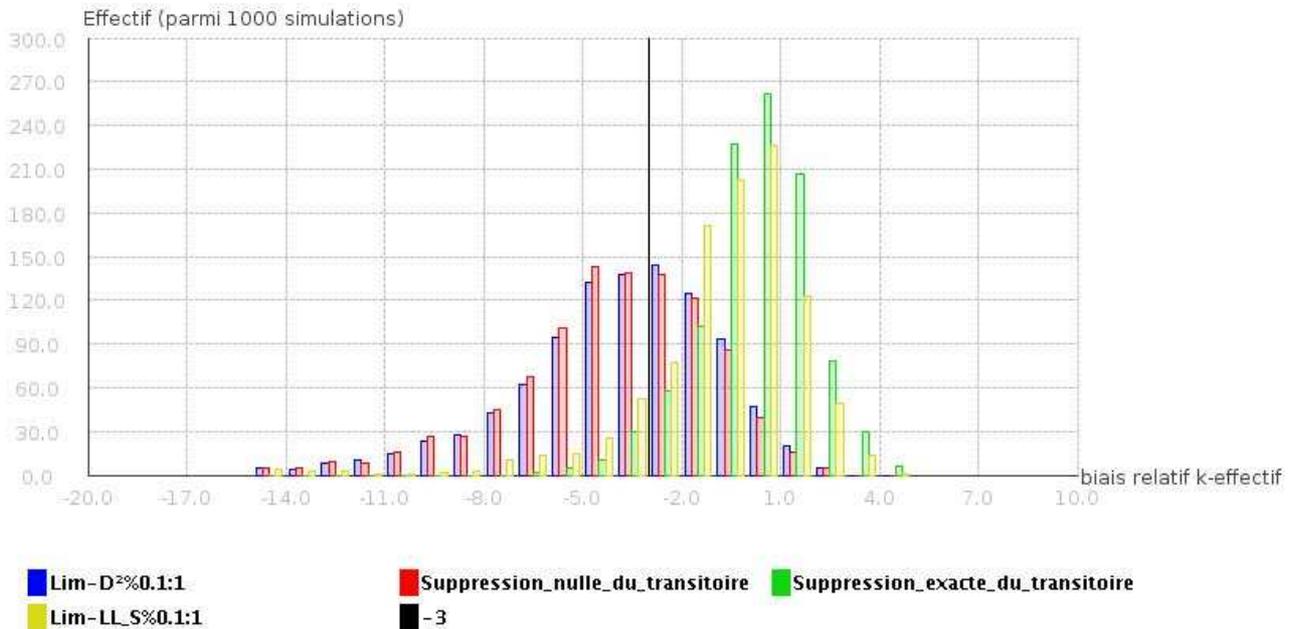
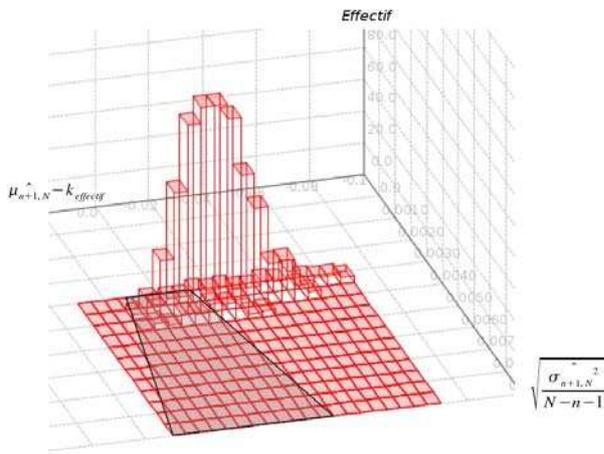
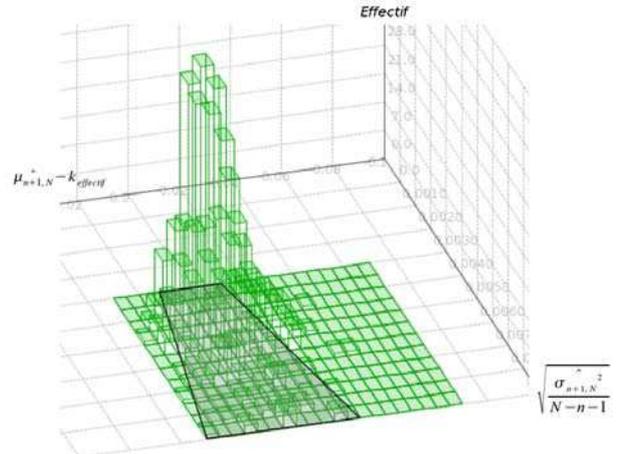


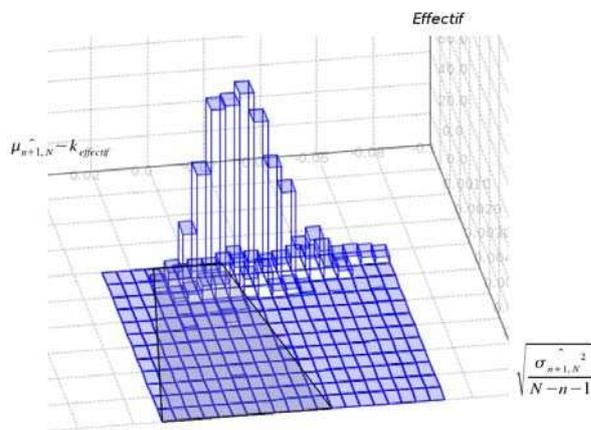
Illustration 54 : Distributions du biais relatif d'estimation du k-effectif : $\frac{\mu_{n+1,N}^{\hat{}} - k_{effectif}}{\sqrt{\frac{\sigma_{n+1,N}^{\hat{2}}}{N-n-1}}}$.



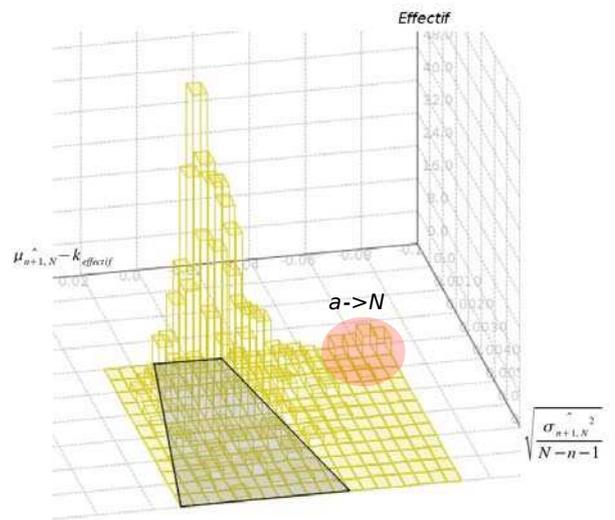
$n=0$



$n=a$



$n = \text{lim} - D^2\%0.1:1$



$n = \text{lim} - LL_s\%0.1:1$

Tableau 3 : Distributions du modèle de biais d'estimation du k-effectif d'espérance $\mu_{n+1,N} - k_{\text{effectif}}$ et d'écart-type $\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}$. La zone grisée délimite $|\mu_{n+1,N} - k_{\text{effectif}}| < 3\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}$.

La suppression nulle et la méthode $\text{lim} - D^2\%0.1:1$ laissent une proportion importante de modèles du k-effectif biaisés parmi les 1000 simulations. Inversement, la méthode $\text{lim} - LL_s\%0.1:1$ corrige presque autant le modèle que la suppression exacte.

Toutefois, pour $\text{lim} - LL_s\%0.1:1$, une proportion résiduelle de simulations restent contaminées dans les cas où a est proche de N , car alors le transitoire est difficile à détecter et contamine néanmoins fortement le modèle de k-effectif du système (tableau 3).

VI.3.2. Réseaux de crayons d'UO₂ irradiés

Une problématique industrielle actuelle de criticité est la prise en compte de l'usure du combustible après utilisation dans les centrales pour la production d'électricité. Toute l'activité industrielle de retraitement de ce combustible est effectivement dépendante des hypothèses utilisées dans la modélisation physico-chimique de ce combustible usé. Une approche conservative pour la sûreté consiste à considérer le combustible comme neuf, ce qui revient à maximiser la réactivité. L'impact économique de cette sur-estimation de la réactivité est suffisamment important pour tenter d'affiner la modélisation en prenant en compte la perte de réactivité du combustible.

Le combustible issu des centrales REP (réacteur à eau sous pression) de production d'électricité se présente sous la forme de réseaux de crayons d'oxyde d'uranium. Nous utiliserons pour cette modélisation des caractéristiques proches de celles d'un crayon réel : une longueur de 3.6 m, un diamètre de 0.8 cm. Le pas du réseau carré est de 2.6 cm⁽¹⁾. Les flux neutroniques dans un REP étant les plus forts au centre du cœur, la combustion des crayons n'est pas homogène sur toute leur hauteur, et en particulier les extrémités sont beaucoup moins "brûlées" que la partie centrale.

Une telle amélioration de la précision du modèle physico-chimique doit être faite en considérant le risque de sous-estimer le k-effectif à cause d'un régime transitoire dans les simulations Monte-Carlo de criticité. En effet, comme dans tout système physico-chimique présentant plusieurs zones de réactivité importantes, l'évolution de la distribution des neutrons simulés peut biaiser sensiblement l'estimation du k-effectif du système. En particulier, une initialisation peu judicieuse des neutrons de la première étape peut conduire à un phénomène de migration des neutrons similaire au benchmark précédent.

Nous définissons donc un modèle physico-chimique simplifié d'un crayon de REP dans de l'eau (illustration 55). L'enrichissement (proportion massique d'isotope ²³⁵ de l'uranium) des extrémités faiblement irradiées du crayon est fixé à 4% et la partie centrale fortement irradiée est d'enrichissement résiduel moindre, fixé à 2%. Les compositions atomiques utilisées sont les suivantes :

- UO₂(4%) : U_{235} 9.2E-4, U_{238} 2.208E-2, O 4.6E-2 (en atomes/barn.cm),
- UO₂(2%) : U_{235} 4.6E-4, U_{238} 2.254E-2, O 4.6E-2 (en atomes/barn.cm),
- Eau : O16 3.34279E-02, H 6.68558E-02 (en atomes/barn.cm).

Dans une telle modélisation physico-chimique, si l'utilisateur ne tient pas compte de la combustion de la partie centrale, et initialise ainsi les neutrons au centre du crayon, un régime transitoire contamine les k-effectifs d'étapes de la simulation.

(!) Une erreur initiale de modélisation de ce réseau de crayons REP a conduit à doubler la valeur du pas. Par souci de cohérence entre les nombreux calculs impliqués, ce défaut a été conservé car il ne remet pas en question les conclusions présentées.

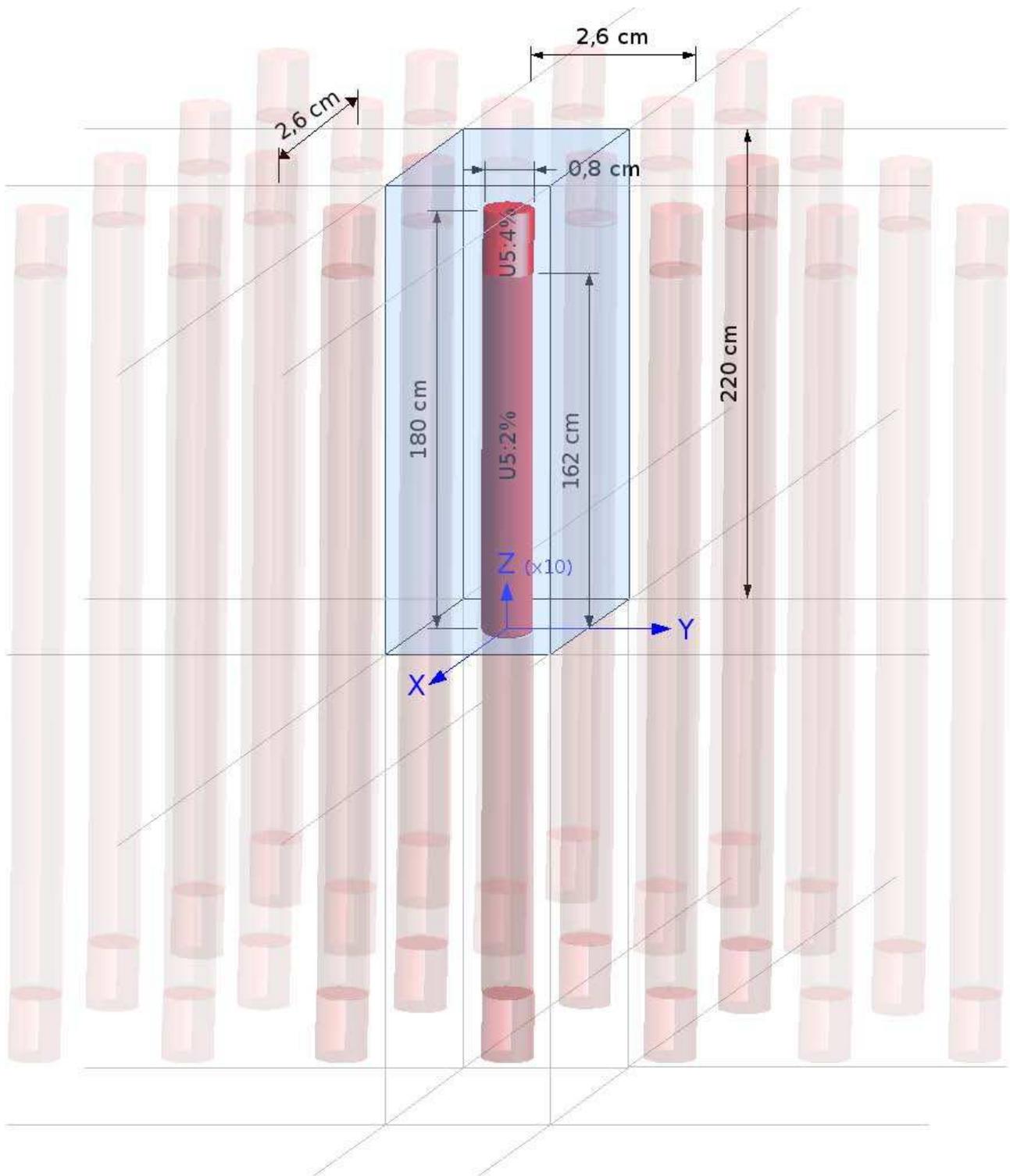
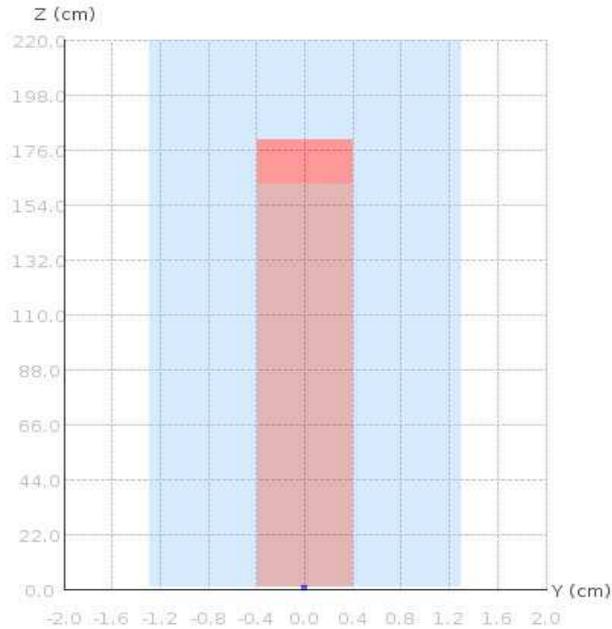


Illustration 55 : Modèle de réseau infini de crayons de REP irradiés : une réflexion des neutrons est appliquée sur les faces (à l'exception de la face supérieure) de la cellule élémentaire constituée d'une demi-hauteur de crayon REP.

Les simulations sont faites avec 100 neutrons par étape, sur 500 étapes. Les neutrons sont initialisés au centre du crayon, dans la partie fortement irradiée. Pour caractériser l'efficacité des méthodes de suppression du transitoire sur cette configuration géométrico-chimique, 1000 répliques de la simulation sont réalisées en utilisant différentes initialisations du générateur pseudo-aléatoire.

En outre, un calcul de référence est défini avec 1000 neutrons par étape (initialement répartis uniformément dans le crayon) sur 6000 étapes (1000 étapes inactives puis 5000 étapes actives). Ce calcul de référence permet d'estimer la proportion des neutrons attendus dans l'extrémité supérieure peu irradiée du crayon. Par exemple, une simulation donne les positions des neutrons suivants (projection sur le plan $X=0$, illustrations 56 à 59):



*Illustration 56 : Étape initiale
(les neutrons sont superposés).*

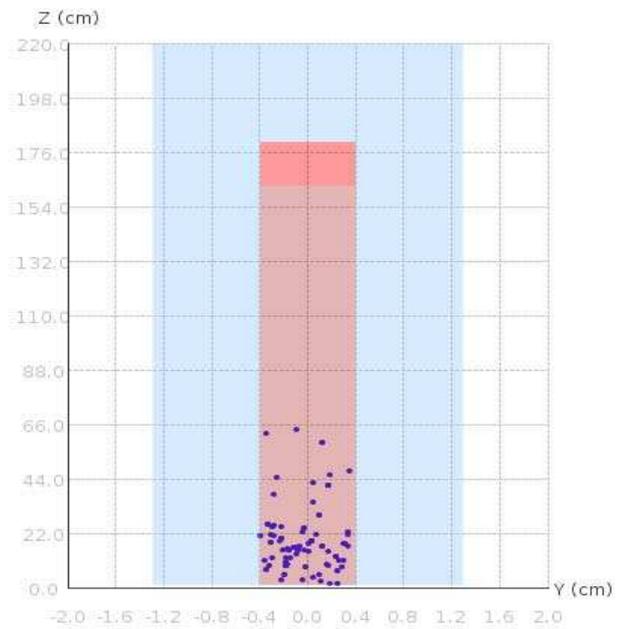
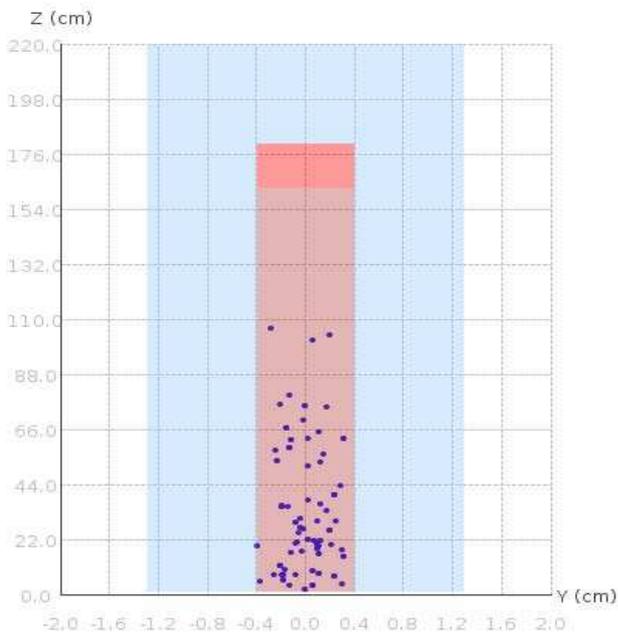
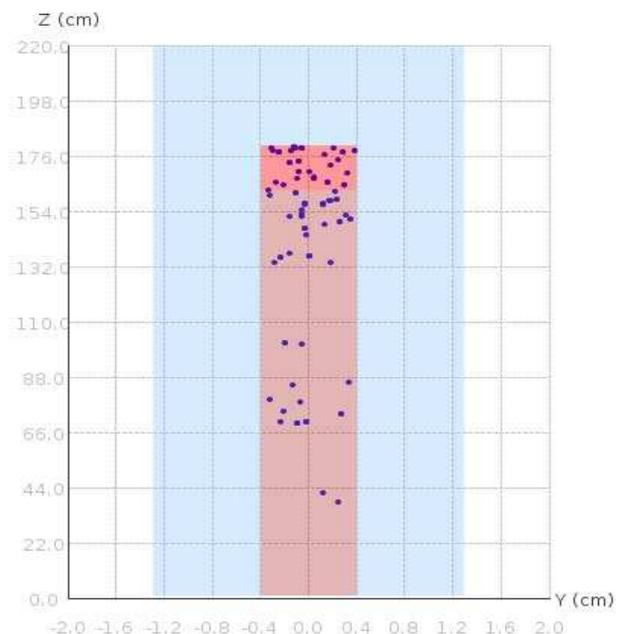


Illustration 57 : Étape 10.



*Illustration 58 : Étape 100 :
les neutrons se dispersent dans le milieu fissile.*



*Illustration 59 : Étape 240 :
les neutrons ont convergé dans la partie la plus réactive et sont maintenant un échantillon de la densité neutronique réelle du système.*

En premier lieu, si on observe la répartition des deux paramètres de définition du régime transitoire utilisés dans le plan d'expériences précédent, on constate que cette modélisation géométrico-chimique de criticité tend à produire des transitoires plus longs que le benchmark précédent

($0.1 < \frac{a}{N} < 0.7$) et de biais relatif plus important sur le k-effectif ($2 < \frac{aA}{\sigma\sqrt{N}} < 7$) (illustration

60). Notons que A et σ sont estimés empiriquement en fonction de a (lui-même estimé par la fin du transitoire des sources) :

- $A = \mu_{a+1,N} - \mu_{1,a}$,
- $\sigma^2 = \frac{1}{N-a-1} \sum_{i=a+1}^N (k_i - \mu_{a+1,N})^2$.

Si le modèle des k-effectifs d'étapes contaminés utilisé dans le plan d'expériences est pertinent, les méthodes de suppression du régime transitoire ne devraient donc pas être pénalisées par une

longueur excessive du transitoire ($\frac{a}{N} > 0.6$) qui les rendait peu performantes. En outre, le biais

sur l'espérance du k-effectif du système (normalisé par son écart-type) $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$ est plus grand que dans le benchmark précédent, et ne devrait donc pas pénaliser la performance de ces méthodes.

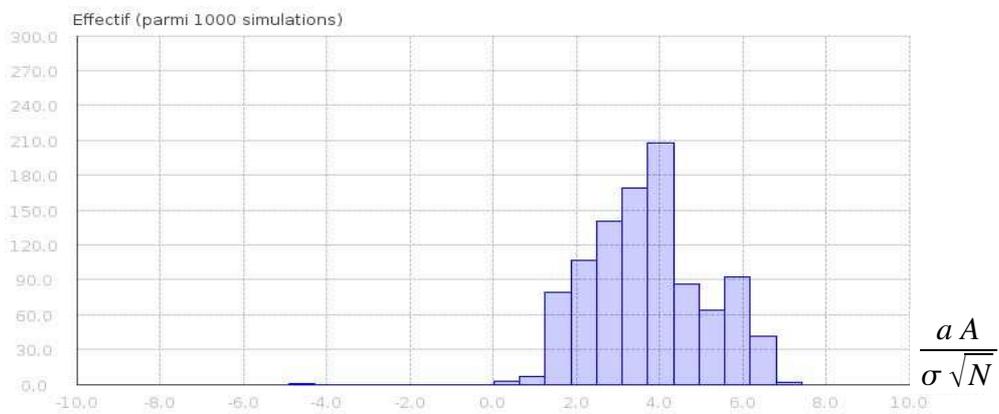
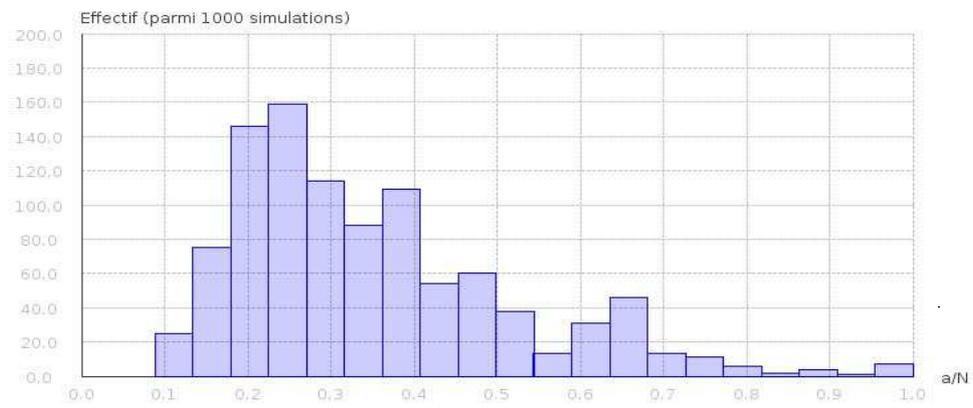
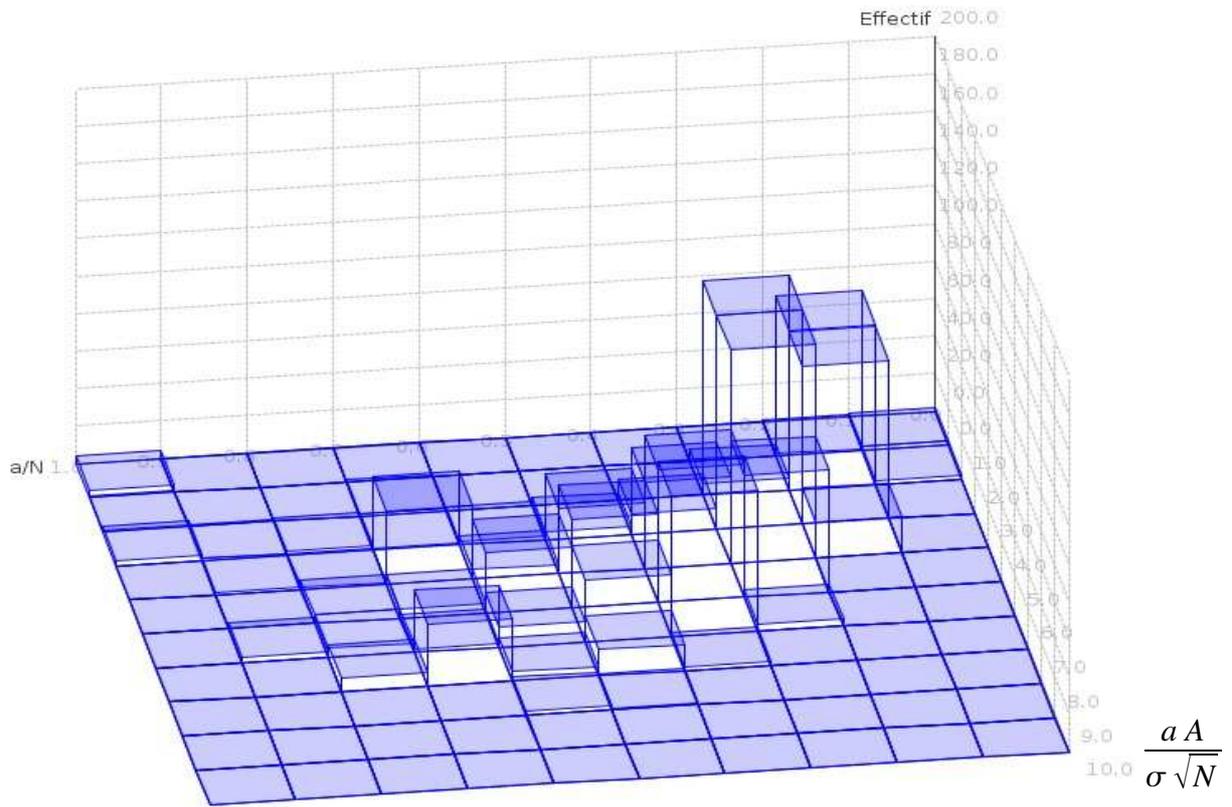


Illustration 60 : Distributions des valeurs de $\frac{a}{N}$ et de $\frac{a A}{\sigma \sqrt{N}}$.

On observe la distribution des performances de toutes les méthodes de suppression de transitoire (illustration 61).

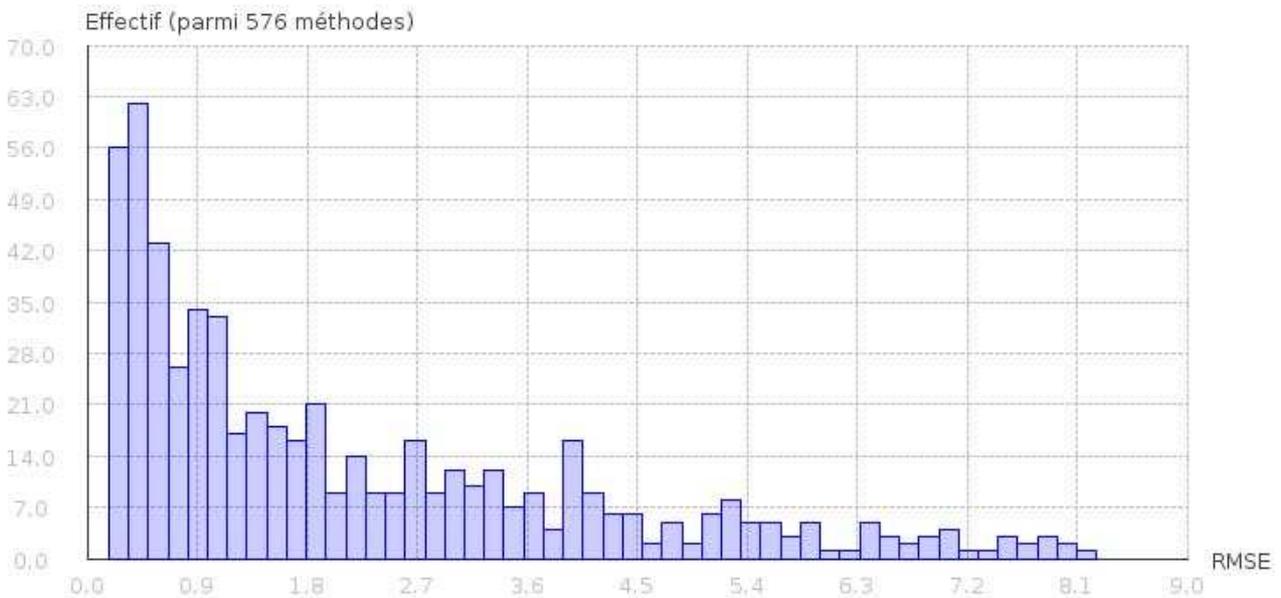


Illustration 61 : Distribution des racines d'erreurs quadratiques moyennes relatives des 576 méthodes de suppression de transitoire.

Les meilleures méthodes présentant une *RMSE* inférieure à 0.25 (critère arbitraire) sont les suivantes (par ordre de performance croissant) :

Méthode	<i>RMSE</i>
<i>lim</i> – $arS^2_{LL} \% 0.1 : 1$	0.250
<i>lim</i> – $S^2_{LL} \% 0.1 : 1$	0.249
<i>param</i> – $E_B \% 0.3 : 1$	0.248
<i>lim</i> – $LL_S \% 0.2 : 1$	0.247
<i>lim</i> – $E_{LL} \% 0.2 : 1$	0.244
<i>lim</i> – $LL_B \% 0.2 : 1$	0.240
<i>param</i> – $E_{LL} \% 0.1 : 1$	0.234
<i>lim</i> – $LL_B \% 0.1 : 1$	0.238
<i>lim</i> – $LLM_B \% 0.2 : 1$	0.236
<i>lim</i> – $E_S \% 0.1 : 1$	0.228
<i>lim</i> – $RM_B \% 0.2 : 1$	0.226
<i>param</i> – $RM_B \% 0.2 : 1$	0.221
<i>param</i> – $E_B \% 0.1 : 1$	0.220

Méthode	<i>RMSE</i>
<i>param</i> – $LL_B \% 0.1 : 1$	0.218
<i>param</i> – $E_S \% 0.1 : 1$	0.208
<i>lim</i> – $E_B \% 0.2 : 1$	0.203
<i>param</i> – $E_S \% 0.3 : 1$	0.200
<i>param</i> – $E_B \% 0.2 : 1$	0.200
<i>lim</i> – $E_S \% 0.2 : 1$	0.199
<i>param</i> – $LL_S \% 0.1 : 1$	0.199
<i>lim</i> – $RM_B \% 0.3 : 1$	0.196
<i>lim</i> – $E_B \% 0.3 : 1$	0.195
<i>param</i> – $RM_B \% 0.3 : 1$	0.193
<i>lim</i> – $LL_S \% 0.1 : 1$	0.193
<i>param</i> – $E_S \% 0.2 : 1$	0.180
<i>lim</i> – $E_S \% 0.3 : 1$	0.178

On observe les caractéristiques suivantes, cohérentes avec les observations faites sur le plan d'expériences :

- les variables de détection les plus représentées sont celles du pont de Student et du pont brownien : $LL_S, E_S, E_B, RM_B, LL_B$,
- la présence de la variable LL_S dans les meilleurs performances,
- l'équivalence entre les performances d'une même méthode déclinée en version asymptotique et paramétrée : $RMSE(Param-LL_S\%0.1:1) \approx RMSE(lim-LL_S\%0.1:1)$.

Néanmoins, contrairement au plan d'expériences, on constate :

- l'absence des heuristiques d'arrêt de troncature autre qu'à la première étape stationnaire,
- la présence d'autres statistiques du pont brownien : RM_B, LL_B, LLM_B ,
- la présence de statistiques du pont de vraisemblance : $E_{LL}, S^2_{LL}, arS^2_{LL}$,
- si la méthode $lim-LL_S\%0.1:1$ est très performante, ici ce sont des méthodes basées sur la statistique E_S qui sont les plus efficaces.

En visualisant la distribution du biais relatif d'estimation de la longueur du transitoire $\frac{n-a}{a}$ pour un échantillon de ces meilleures méthodes, il apparaît que la longueur du transitoire tend à être sous-estimée (illustration 62) :

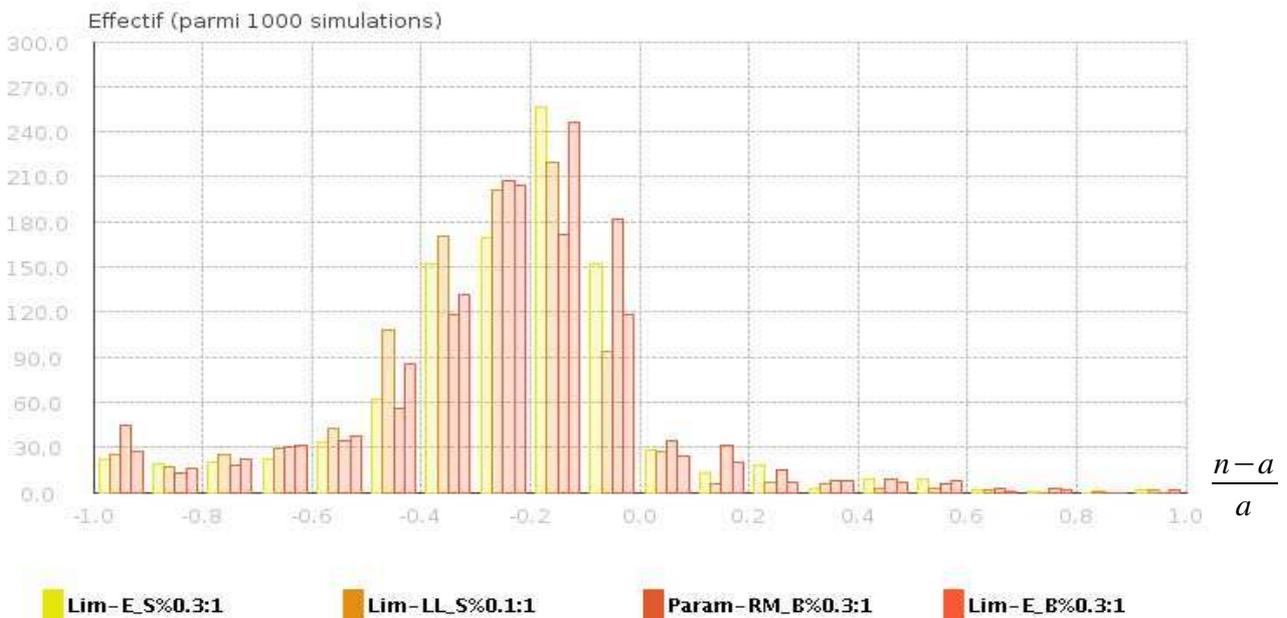


Illustration 62 : Distributions de $\frac{n-a}{a}$ pour les méthodes $lim-E_S\%0.3:1$,
 $lim-LL_S\%0.1:1$, $param-RM_B\%0.3:1$, $lim-E_B\%0.3:1$.

Finalement, indépendamment du critère d'optimisation des méthodes de suppression de transitoire $RMSE$, on souhaite quantifier l'amélioration apportée au modèle de k -effectif par la suppression du régime transitoire. Nous comparons donc la "meilleure" méthode $lim-E_s\%0.3:1$ avec :

- la suppression « nulle » de transitoire (suppression de 0 étapes : $n=0$),
- la suppression « exacte » de transitoire (suppression de a étapes : $n=a$),
- la méthode de référence $lim-D^2\%0.1:1$.

Le bon comportement de la méthode $lim-E_s\%0.3:1$ se manifeste par une tendance à s'approcher de la suppression « exacte » de transitoire, tant pour le biais que pour l'écart-type de l'estimation du k -effectif du système (illustration 63).

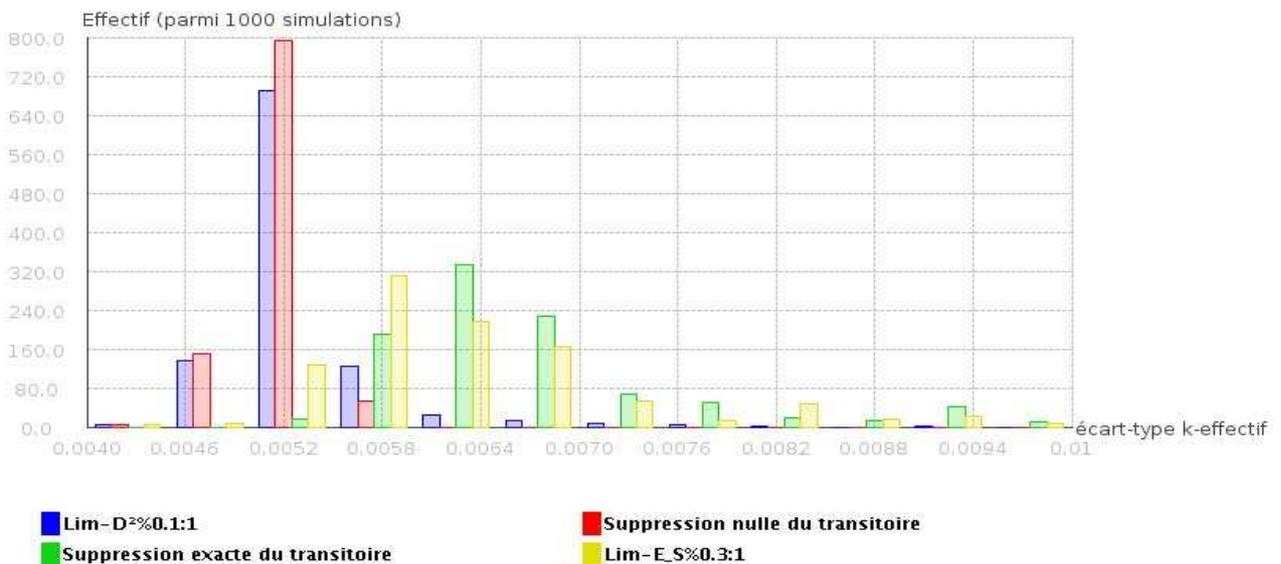
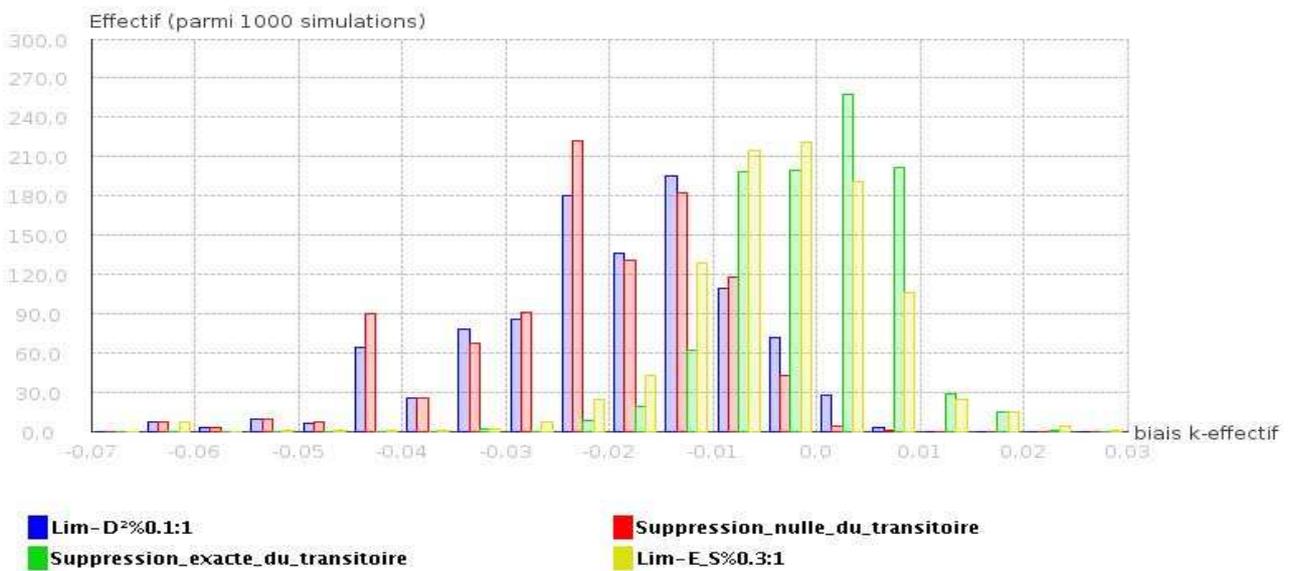


Illustration 63 : Distributions du biais de l'estimation du k -effectif :

$$\mu_{n+1,N}^{\hat{}} - k_{\text{effectif}} \text{ et de l'écart-type de l'estimation du } k\text{-effectif : } \sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{(N-n-1)}} .$$

Relativement à la pratique des expertises de sûreté-criticité, on souhaite que le quantile à 99.865 % du modèle de k-effectif estimé ne sous-estime pas le k-effectif réel après suppression du régime

transitoire : $\mu_{n+1,N} + 3\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}} > k_{\text{effectif}}$, soit $\frac{\mu_{n+1,N} - k_{\text{effectif}}}{\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}} > -3$

(illustration 64, tableau 4).

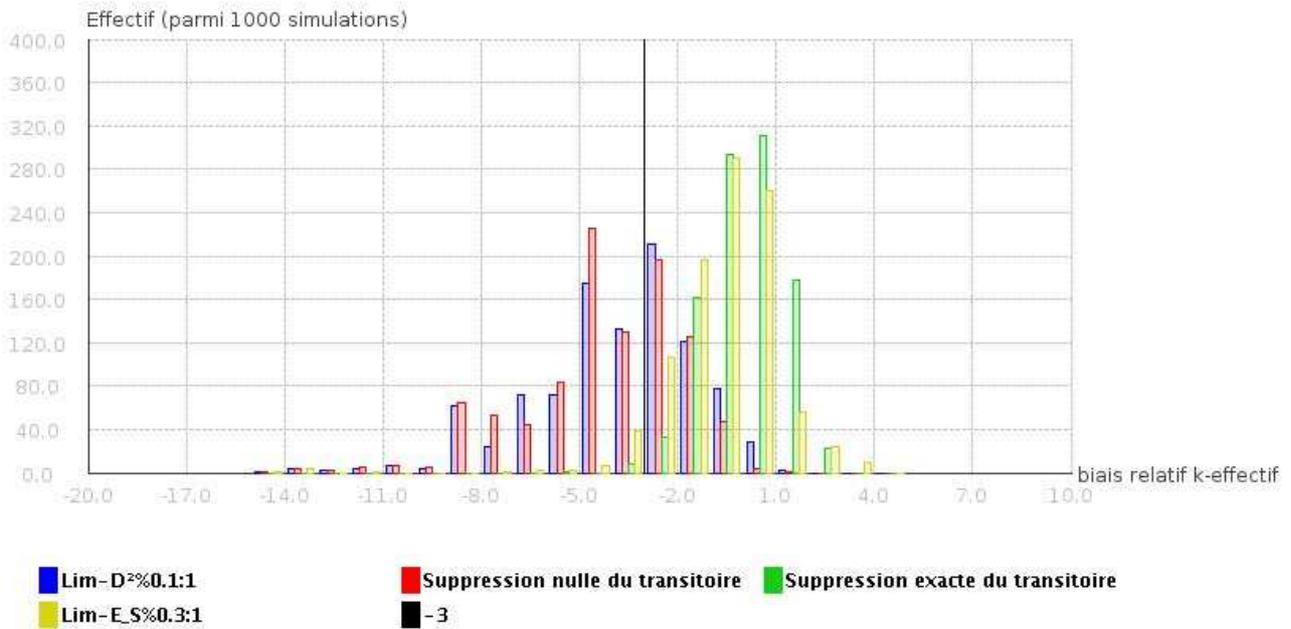
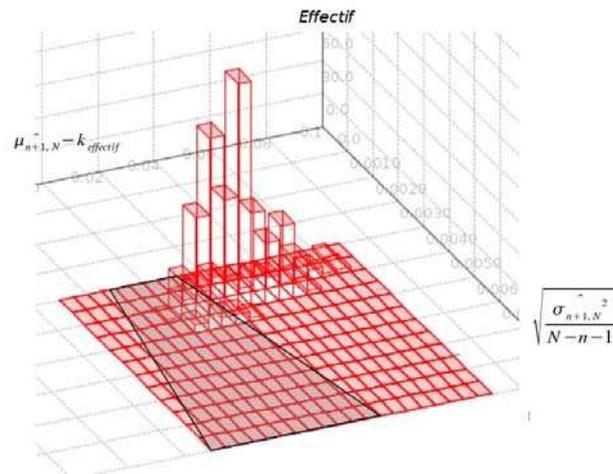
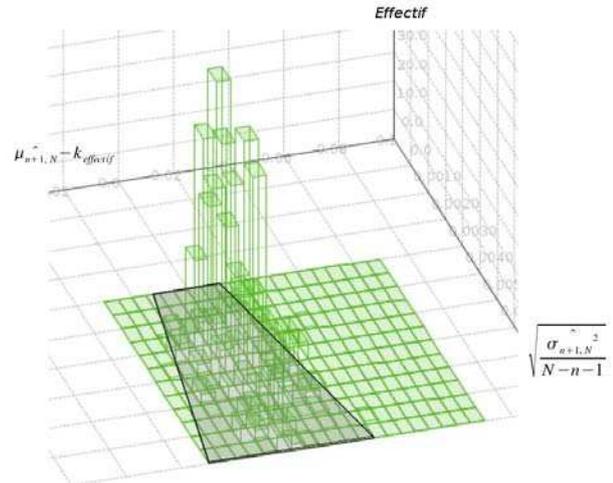


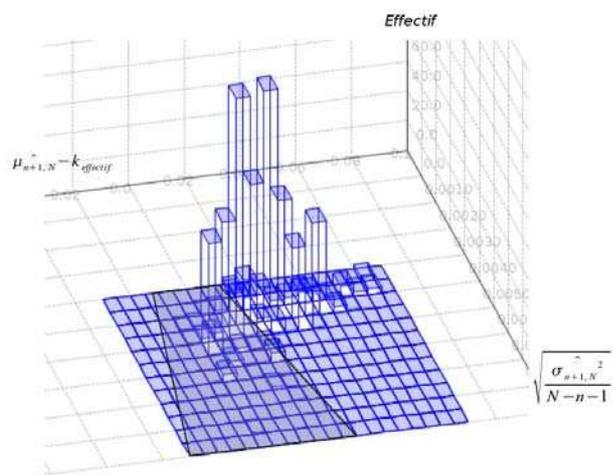
Illustration 64 : Distributions du biais relatif d'estimation du k-effectif : $\frac{\mu_{n+1,N} - k_{\text{effectif}}}{\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}}$.



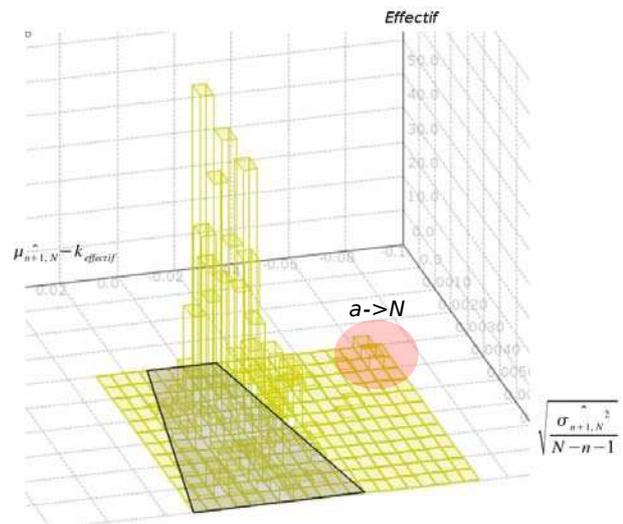
$n=0$



$n=a$



$n = \text{lim} - D^2 \% 0.1 : 1$



$n = \text{lim} - E_s \% 0.3 : 1$

Tableau 4 : Distributions du modèle de biais d'estimation du k -effectif d'espérance $\mu_{n+1,N} - k_{\text{effectif}}$ et d'écart-type $\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}$. La zone grisée délimite $|\mu_{n+1,N} - k_{\text{effectif}}| < 3 \sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}$.

Comme précédemment, la suppression nulle et la méthode $\text{lim} - D^2 \% 0.1 : 1$ laissent une proportion importante de modèles du k -effectif non pertinents parmi les 1000 simulations. Inversement, la méthode $\text{lim} - E_s \% 0.3 : 1$ corrige presque autant le modèle que la suppression exacte. Une proportion résiduelle de simulations restent cependant contaminées dans les cas où a est proche de N car alors, le transitoire est difficile à détecter et contamine néanmoins fortement le modèle de k -effectif du système (tableau 4).

VI.3.3. Conclusions

Ces deux configurations géométrico-chimiques, pourtant très différentes, ont généré des régimes transitoires initiaux assez proches en termes de caractérisations théorique $(\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N})$. En outre, les ordres de grandeur de ces paramètres sont homogènes avec les plages de variations définies dans le plan d'expériences, ce qui tend à valider la pertinence de la définition de ce plan d'expériences.

Indépendamment, on constate que certaines conclusions faites sur le plan d'expériences sont également valables sur les benchmarks :

- les meilleures variables de détection de la stationnarité sur le plan d'expériences sont aussi très performantes sur les benchmarks : LL_S, E_S, E_B, M_B ,
- l'équivalence des deux types de distributions des variables de décision sous hypothèse nulle : "limite" ou "asymptotique", est également observée,
- le niveau du test de stationnarité à 20 % apparaît fréquemment parmi les meilleures méthodes.

Les performances des heuristiques d'arrêt de la troncature itérative "1" sont les plus efficaces sur les benchmarks et les heuristiques "0.2", "0.4", "0.6" (arrêt de la troncature itérative lorsque les 20 %, 40 % ou 60 % d'étapes suivantes sont diagnostiquées stationnaires) ne semblent pas pertinentes.

Finalement, les méthodes $lim-E_S \% 0.3:1$ et $lim-LL_S \% 0.1:1$ permettent dans ces deux configurations d'estimer avec une bonne précision la longueur du régime transitoire, et de réduire significativement le biais sur la modélisation du k-effectif du système. En effet, les modèles du k-effectif corrigés par ces méthodes restant "faux" pour une expertise de sûreté-criticité (au sens

où l'inégalité $\mu_{n+1,N} + 3\sqrt{\frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}} < k_{effectif}$ n'est pas vérifiée) sont marginaux, alors que

l'utilisation de la méthode de référence $lim-D^2 \% 0.1:1$ n'aurait pas permis d'améliorer ce modèle du k-effectif.

VI.4. Considérations techniques sur l'implémentation

Pour valider la faisabilité de la suppression du transitoire, un prototype logiciel implémentant les différentes méthodes proposées a été développé. Le paramétrage (i.e. tabulation des statistiques sous hypothèse nulle) et l'application sur des séquences de k-effectifs réelles ou simulées des différentes méthodes proposées ont nécessité la disponibilité d'une puissance de calcul adéquate.

En particulier, pendant les phases de recherche et de conception des différentes méthodologies, l'utilisation d'un langage de programmation de haut niveau d'abstraction (en l'occurrence Scilab [SCIL]) a été nécessaire, au détriment de la rapidité d'exécution des calculs. Par exemple, le plan d'expériences des régimes transitoires présenté, a demandé un temps de calcul cumulé de l'ordre de 500 heures à une fréquence de 2 GHz. Cette relative lenteur d'exécution a été compensée par une distribution dynamique des calculs indépendants sur tout le parc de machines disponible (soit 10 à 20 processeurs de fréquence supérieure à 2 GHz).

Finalement, les contraintes de performance a priori bloquantes pour l'utilisation d'un langage de programmation adapté à l'abstraction mathématique (i.e. de type Matlab, Octave, R, Scilab ou Scipy) ont été levées par une parallélisation des calculs. L'utilisation d'un langage de bas niveau (C, Fortran) n'a donc pas été nécessaire, réduisant ainsi la lourdeur de l'implémentation qui aurait été préjudiciable à la prospection scientifique.

Si cette problématique purement technique peut tout d'abord paraître anecdotique, elle fut en réalité une des clés de voûte de la réalisation de ce travail. Plus précisément, la disponibilité d'une puissance de calcul effective importante nous a permis d'envisager :

- une modélisation statistique non théorique, c'est-à-dire faisant appel à des tabulations précisément ajustées aux caractéristiques des échantillons testés (en l'occurrence, la longueur et l'autocorrélation des séquences de k-effectifs d'étapes),
- une approche systématique de l'estimation de la performance par l'utilisation d'un plan d'expériences complet recouvrant des configurations de calculs de criticité très variés.

Sans cette ressource de calcul (disponible industriellement seulement depuis quelques années), les méthodes de suppression de transitoire testées auraient été moins exhaustives, limitant ainsi la portée et l'intérêt industriel des résultats obtenus.

Les outils et protocoles suivants ont été utilisés :

- plate-formes d'exécution des calculs : architectures x86 32 bits,
- systèmes d'exploitation : systèmes GNU/Linux 2.6.X, distributions basées sur Debian [DEBI] et RedHat Linux [REDH],
- environnement de programmation : Scilab 4.0 pour GNU/Linux sur x86 [SCIL]. Notons que la disponibilité du logiciel Scilab sur de nombreuses combinaisons d'architectures et de systèmes d'exploitation aurait permis d'envisager l'utilisation de machines de bureautique classiques,
- exécution distante des calculs par Shell Unix déportés (de type SSH [SSH]),
- distribution centralisée des calculs par partage d'espace disque (protocoles NFS et SMB).

VII Perspectives

Suite au développement des différentes méthodes de suppression du régime transitoire initial, plusieurs voies d'amélioration ont été suggérées. L'approfondissement de ces questions pourrait permettre d'améliorer les performances des méthodes présentées, ou d'en proposer de nouvelles. L'objet de ce paragraphe est de présenter quelques unes de ces perspectives possibles d'amélioration ou d'adaptation, prometteuses pour l'amélioration de la suppression des régimes transitoires.

VII.1. Adaptation des indicateurs de performance de suppression de transitoire

Comme mentionné dans la définition des critères de performance utilisés dans le plan d'expériences, le compromis entre le conservatisme de sûreté-criticité (priviliégiant la sur-estimation de la longueur du transitoire) et la conservation des étapes stationnaires (impliquant un risque de sous-estimation de la longueur du transitoire) est une notion subjective fortement dépendante du contexte d'utilisation des calculs Monte-Carlo de criticité.

Ainsi, en plus du critère de performance basé sur l'erreur relative d'estimation de la

longueur du transitoire $\frac{n-a}{a} : E\left[\left(\frac{n-a}{a}\right)^2\right]$, d'autres critères pourraient être pertinents en fonction des priorités de la mise en production des méthodes de suppression de transitoire, tels que :

- l'erreur quadratique moyenne d'estimation de la longueur du transitoire : $E[(n-a)^2]$,
- l'erreur quadratique moyenne d'estimation normalisée de la longueur du transitoire :

$$E\left[\left(\frac{n-a}{N-a}\right)^2\right],$$

- l'erreur quadratique moyenne d'estimation du k-effectif moyen : $E[(\hat{\mu}_{n+1,N} - k_{\text{effectif}})^2]$,
- la distribution de l'erreur quadratique moyenne d'estimation du k-effectif :

$$(\hat{\mu}_{n+1,N} - k_{\text{effectif}})^2 + \frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1},$$

- la distribution du risque de sous-estimation du k-effectif du système (en utilisant le modèle gaussien classique) : $1 - \text{cdfLG}_{\mu_{n+1,N}, \frac{\hat{\sigma}_{n+1,N}^2}{N-n-1}}(k_{\text{effectif}})$.

VII.2. Exploitation des caractéristiques des processus ponts

Au cours de la phase de conception des troncatures itératives, nous avons tenté d'exploiter une particularité des ponts présentés : la cohérence entre l'abscisse de l'extremum du pont et la fin du régime transitoire (Illustration 65) :

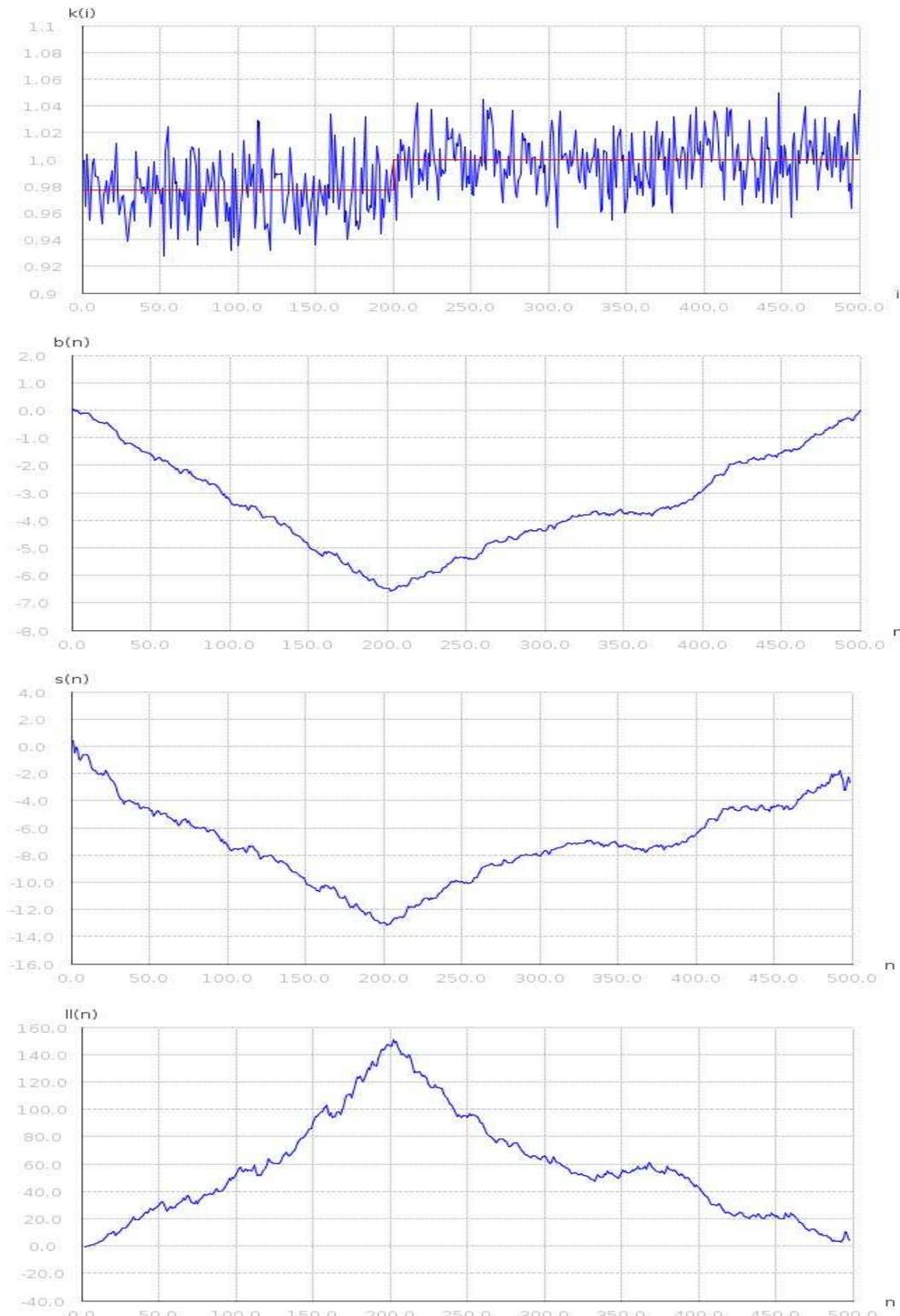


Illustration 65: Séquences de k -effectifs d'étapes contaminés et de processus ponts

Différentes méthodes exploitant cette propriété ont été testées, mais leur grande sensibilité à l'erreur de première espèce du test de stationnarité tendait à générer une sur-troncature forte. En effet, en cas de non stationnarité diagnostiquée à tort, l'extremum du pont (quel qu'il soit) peut être distribué de manière très aléatoire entre 0 et N . Ainsi, en itérant cette procédure, on augmente ce risque de supprimer un grand nombre d'étapes à tort.

Finalement, la méthodologie de troncature itérative telle que décrite dans ce document semble donc inadaptée à l'utilisation de l'extremum du pont pour définir la longueur du régime transitoire. Il pourrait donc être intéressant de concevoir une autre méthode de troncature, limitant l'impact du risque de première espèce du test de stationnarité, pour permettre d'utiliser les propriétés des extremums des différents ponts.

VII.3. Contrôle de la portée de sur-troncature

Un des paramètres des méthodes proposées est la définition du niveau de rejet du test de stationnarité. On peut ainsi contrôler le risque de désigner à tort une séquence de k -effectifs d'étapes comme non stationnaire. Toutefois, du fait de la méthodologie de suppression itérative de la première étape restante, ce risque de première espèce du test de stationnarité ne renseigne pas directement sur le nombre d'étapes qui vont être effectivement supprimées à tort.

Cependant, dans un contexte d'exploitation industrielle, il pourrait être souhaitable de définir explicitement cette « portée » de sur-troncature et son risque associé, plutôt qu'un risque de rejet de la stationnarité (Illustration 66).

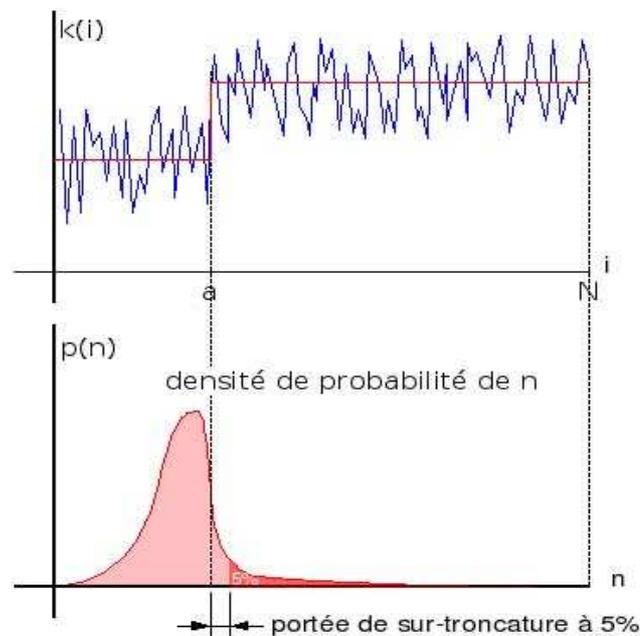


Illustration 66: Estimation de la longueur d'un transitoire : portée de sur-troncature et risque associé

En fait, la relation entre le risque de première espèce du test de stationnarité et le risque de supprimer à tort un nombre d'étapes données (i.e. la portée) est déterministe, mais elle est particulièrement délicate à évaluer empiriquement.

Pour un même modèle de k-effectif d'étapes $(N, \rho, \frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}, \frac{a}{N})$ et une portée p définie dans

$$\mathbb{N}^+, \text{ c'est la fonction bijective croissante } \begin{matrix} \alpha & \rightarrow & P(n > a + p) \\ [0,1] & \rightarrow & [0,1] \end{matrix} .$$

Finalement, pour comparer de manière pertinente les différentes méthodes entre elles, il aurait été intéressant que leur sur-troncature sous hypothèse nulle soit équivalente. Cette option n'a pas été finalisée dans le plan d'expériences de régimes transitoires ou dans les benchmarks. Nous avons par exemple tenté de fixer le risque de supprimer plus de 50 étapes à 5% sous hypothèse nulle, c'est-à-dire pour un modèle de séquence de k-effectifs d'étapes $(N=500, \rho=0.2, a=0)$. Toutefois la contrainte du temps de calcul s'est finalement avérée rédhibitoire pour cette approche.

VII.4. Généralisation de la modélisation des régimes transitoires

Les séquences de k-effectifs d'étapes théoriques contaminés par un régime transitoire sont modélisées par la somme d'un processus stationnaire et d'une composante déterministe de biais (illustration 67) : $KT = \{k_i + t_i\}_{1 \leq i \leq N}$,

- K étant un processus gaussien autorégressif d'ordre 1 : $K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$,
- $k_1 \equiv LG_{k_{\text{effectif}}, \frac{\sigma_\epsilon^2}{1-\rho^2}}$,
- $\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, k_{i+1} = k_{\text{effectif}} + \rho(k_i - k_{\text{effectif}}) + \epsilon_i$, avec les paramètres suivants :
 - la longueur N ,
 - l'espérance du processus k_{effectif} ,
 - l'autocorrélation ρ ,
 - le bruit blanc gaussien (ϵ_i) d'espérance nulle et de variance σ_ϵ^2 ,
- T est une composante déterministe de biais $T = \{t_i\}_{1 \leq i \leq N}$ avec :
 - pour $i \leq a, t_i = -A$,
 - pour $i > a, t_i = 0$.

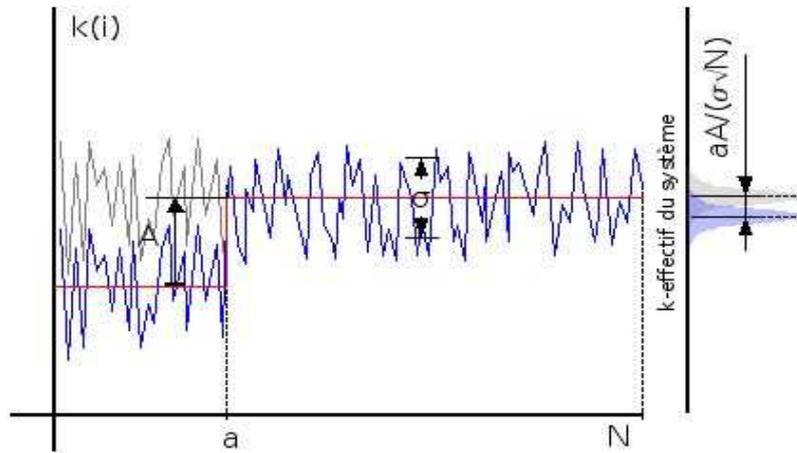


Illustration 67 : Modèle de séquence de k -effectifs d'étapes contaminées par un régime transitoire "abrupt".

Cette modélisation des régimes transitoires est particulièrement restrictive et s'appuie sur la notion de changement « abrupt » de régime [BASS]. Mais en pratique, les changements de régime des calculs Monte-Carlo de criticité ne sont pas instantanés et il conviendrait donc d'enrichir le modèle de régime transitoire par une continuité entre la partie contaminée ($i \leq a$) et la partie non contaminée ($i > a$) sous la forme d'une phase intermédiaire d'atténuation linéaire.

Notons que d'autres types d'atténuations auraient pu être pertinentes, telle l'atténuation logistique ou exponentielle.

On définit donc le modèle continu de régime transitoire suivant (illustration 68) :

- pour $i \leq a, t_i = -A$,
- pour $a < i < b, t_i = -A \frac{b-i}{b-a}$,
- pour $b \leq i, t_i = 0$.

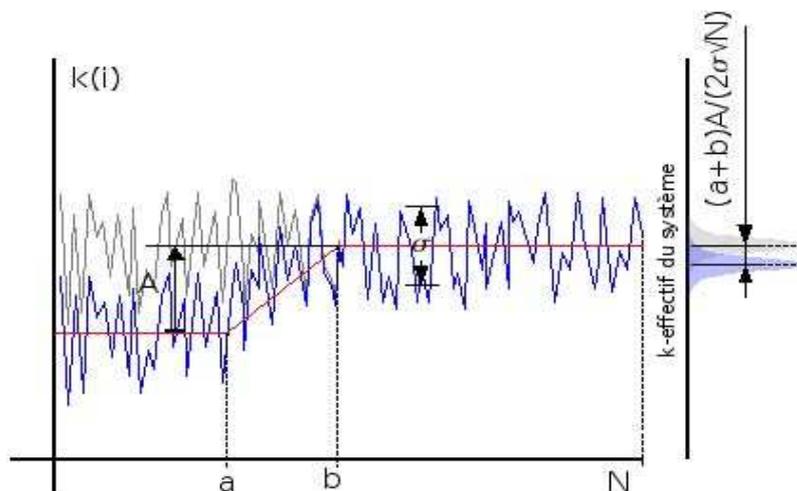


Illustration 68 : Modèle de séquence de k -effectifs d'étapes contaminées par un régime transitoire continu à atténuation linéaire.

Ce type de transitoire présente l'intérêt d'être plus pertinent pour représenter certains régimes transitoires des calculs Monte-Carlo de criticité, car il permet notamment de modéliser des transitoires ne présentant pas l'état de pseudo-stabilité pour $i \leq a$, c'est-à-dire que la phase d'atténuation commence immédiatement : $a=0$ (illustration 69), .

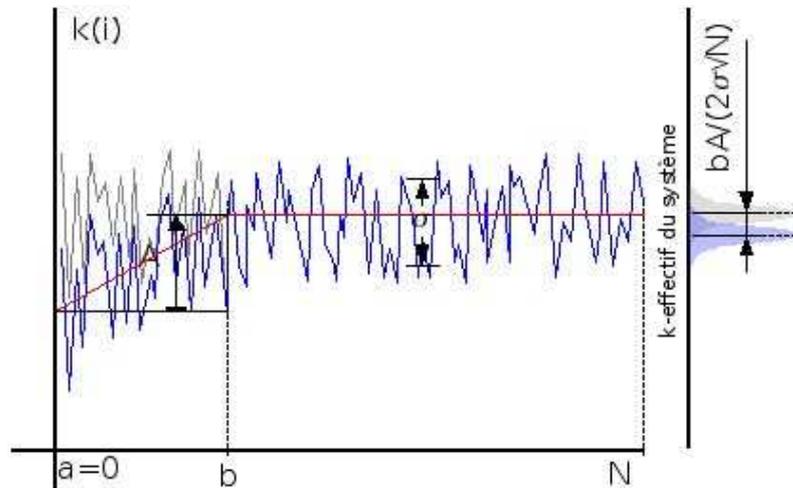


Illustration 69 : Modèle de séquence de k -effectifs d'étapes contaminées par un régime transitoire d'atténuation immédiate.

L'état de pseudo-stabilité modélisé pour $i \leq a$, n'apparaît en fait que dans des simulations présentant une convergence neutronique soudaine vers une zone de plus forte réactivité du système après un état d'apparente stationnarité des neutrons dans un zone de réactivité moindre. Ces régimes transitoires présentant une pseudo-stabilité sont les plus impactants en terme de biais sur le k -effectif du système, mais ce type de simulation est généralement dû à une configuration géométrico-chimique et à un paramétrage initial de la population neutronique simulée particuliers (cas du benchmark des sphères).

En pratique, de nombreuses simulations Monte-Carlo de criticité ne présentent pas ces défauts et sont alors contaminées par un transitoire dont l'atténuation commence immédiatement ($a=0$), sans état pseudo-stabilité initiale. Ces dernières simulations ne sont alors pas correctement modélisables avec les régimes transitoires abrupts du plan d'expériences utilisé dans cette thèse.

Une étude plus approfondie sur ce thème pourrait donc être menée en ajoutant $0 \leq \frac{b-a}{N-a} < 1$

aux précédents paramètres du plan d'expériences :

- le biais normalisé de l'espérance du k -effectif du système : $0 \leq \frac{(a+b)A}{2\sigma\sqrt{N}} \leq 10$,
- la longueur relative de contamination : $0 \leq \frac{a}{N} < 1$.

En outre, le modèle de transitoire « abrupt » est également la base de la conception des « processus ponts » qui détectent la présence d'un transitoire par comparaison du sous-échantillon initial (supposé transitoire) $\{k_i\}_{1 \leq i \leq n}$ et du sous-échantillon final (supposé stationnaire) $\{k_i\}_{n < i \leq N}$.

Ces processus devraient donc être redéfinis pour prendre correctement en compte (ou éventuellement ignorer) le sous-échantillon intermédiaire d'atténuation $\{k_i\}_{a < i \leq b}$.

Par exemple, le pont de vraisemblance prenant en compte le sous-échantillon d'atténuation pourrait être défini en utilisant la vraisemblance de l'échantillon d'atténuation sur la base d'une régression linéaire de cet échantillon (illustration 70).

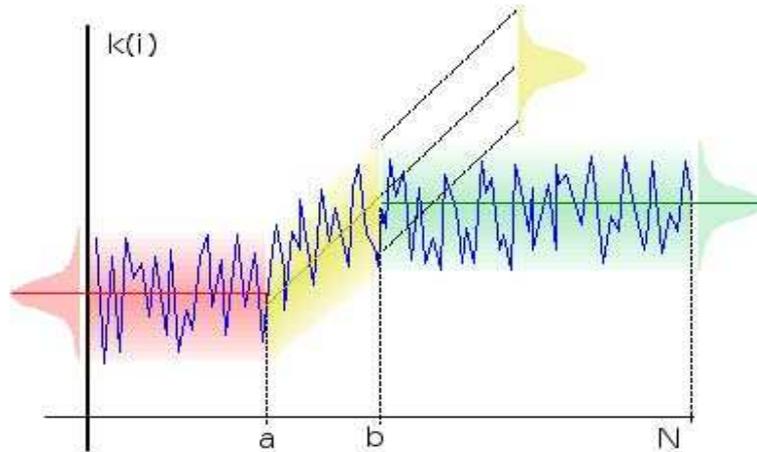


Illustration 70 : Modèle de séquence de k -effectifs d'étapes contaminée par un régime transitoire d'atténuation linéaire, vraisemblance des sous-échantillons.

Soit $LL2 = \{ll2_{na, nb}\}_{\substack{2 \leq na \leq N-2 \\ na+1 \leq nb \leq N-2}}$ ce nouveau pont de vraisemblance (illustrations 71, 72) :

$$ll2_{na, nb} = N \ln(\hat{\sigma}_{1, N}^2) - na \ln(\hat{\sigma}_{1, na}^2) - (nb - na - 1) \ln(\hat{\sigma}_{RE, na+1, nb}^2) - (N - nb) \ln(\hat{\sigma}_{nb+1, N}^2)$$

où $\hat{\sigma}_{RE, na+1, nb}^2$ est l'estimation de la variance de l'erreur de régression linéaire sur l'échantillon

$$\text{d'atténuation } \{k_i\}_{a < i \leq b} : \hat{\sigma}_{RE, na+1, nb}^2 = \hat{\sigma}_{na+1, nb}^2 \left(1 - \frac{\left(\sum_{i=a+1}^b (k_i - \hat{\mu}_{na+1, nb}) \left(i - \frac{a+1+b}{2} \right) \right)^2}{\sum_{i=a+1}^b \left(i - \frac{a+1+b}{2} \right)^2 \sum_{i=a+1}^b (k_i - \hat{\mu}_{na+1, nb})^2} \right).$$

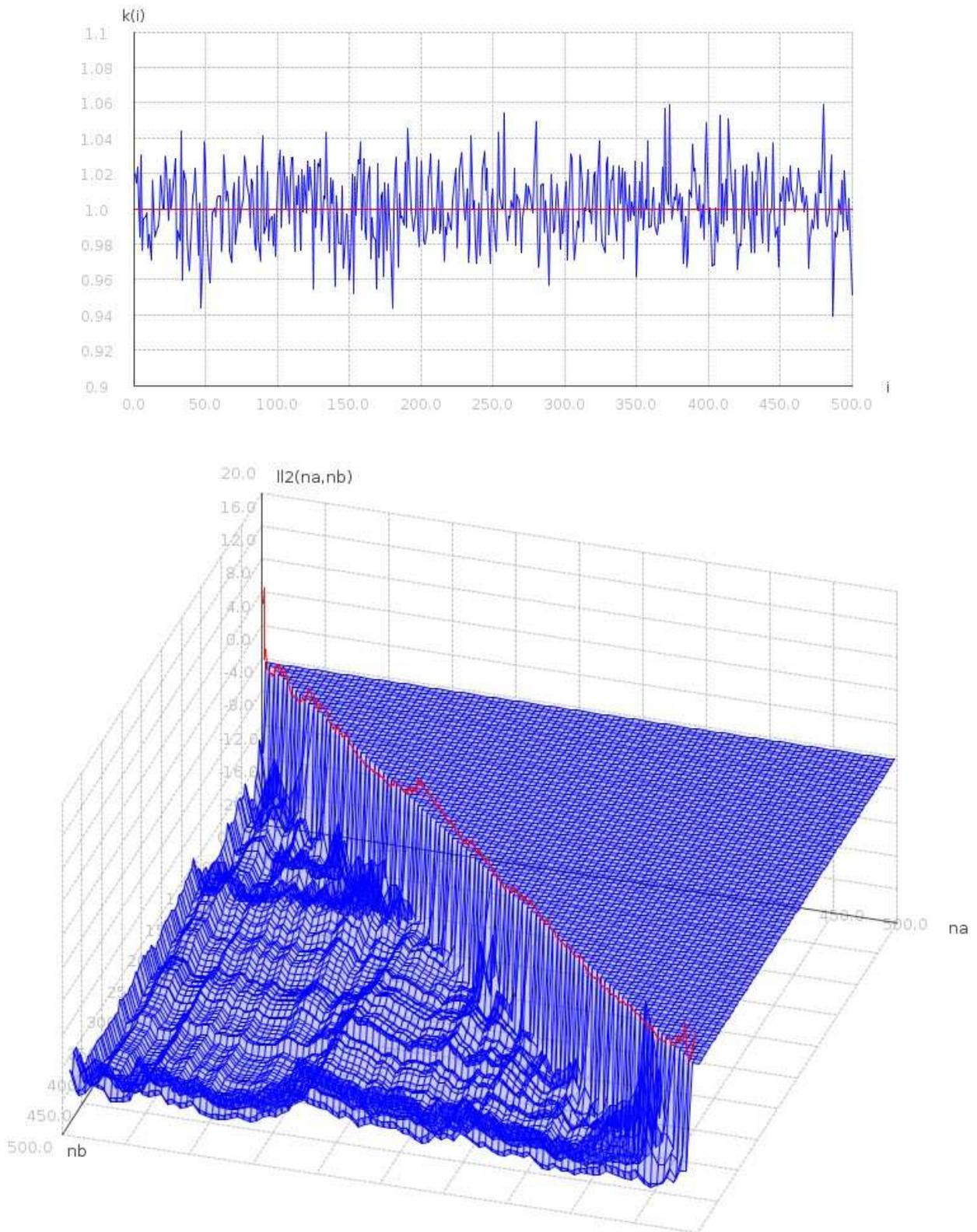


Illustration 71 : Séquence et pont de vraisemblance en fonction des paramètres de l'atténuation des k -effectifs d'étapes stationnaires : na, nb .

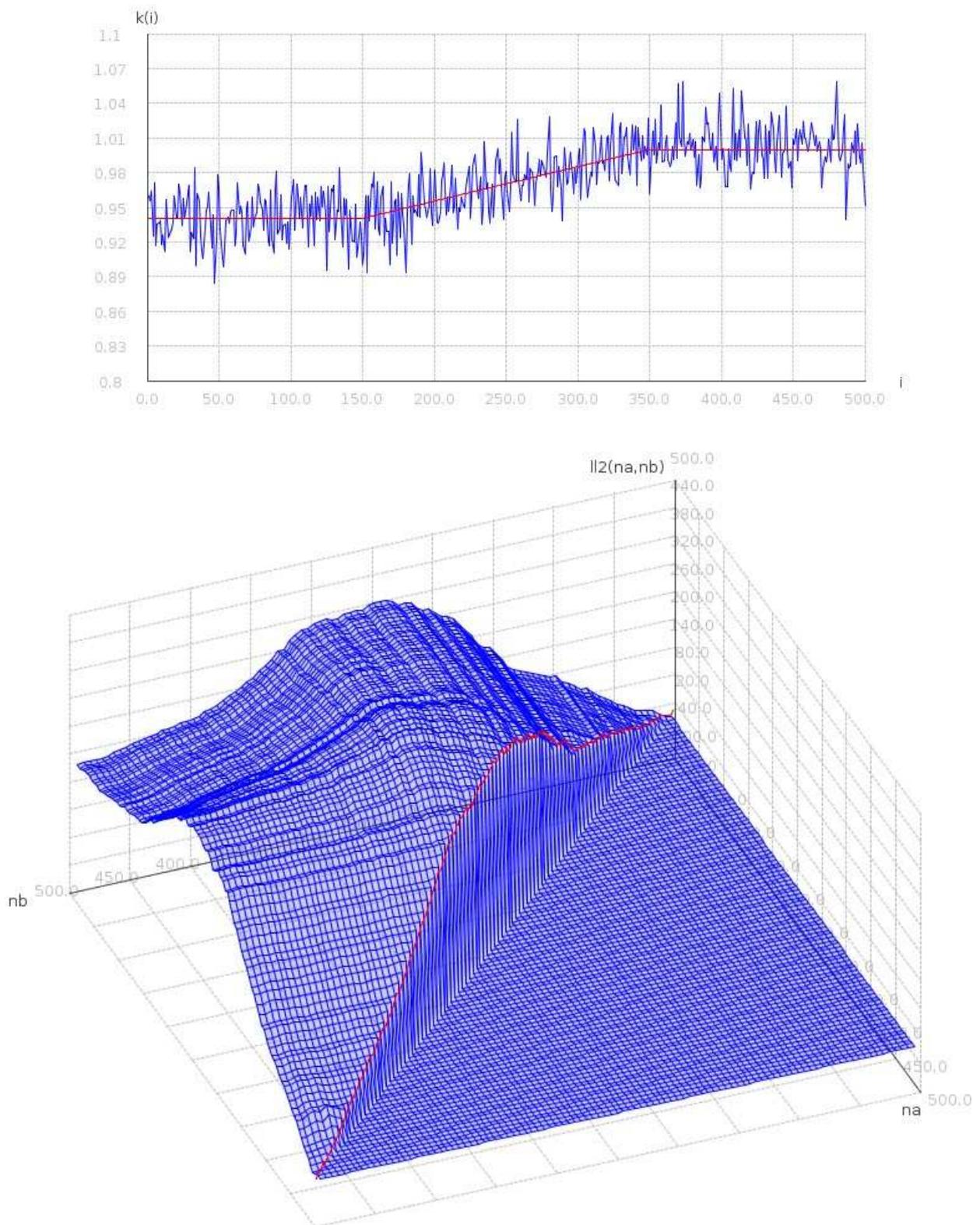


Illustration 72: Séquence et pont de vraisemblance avec prise en compte de l'atténuation des k -effectifs d'étapes contaminés par un transitoire. Pour $na=nb$ (en rouge), $LL2 \rightarrow LL$.

On constate effectivement que ce pont défini en fonction de na et nb discrimine la présence d'un régime transitoire de longueur b et de pseudo-stabilité sur a étapes en maximisant la vraisemblance pour $na \rightarrow a$ et $nb \rightarrow b$.

Finalement, un paramétrage plus complet du modèle des régimes transitoires pourrait donc être profitable pour une exploitation des méthodes de suppression de transitoire sur un éventail plus large de types de transitoires. Néanmoins, la modélisation de ce type de ponts pourrait être non seulement assez délicate à réaliser, mais aussi plus dépendante des paramètres de nuisance, et donc pas nécessairement valorisable en pratique.

VII.5. Variables de discrimination de la stationnarité

En partant de la définition du pont brownien, nous avons imaginé une généralisation de la notion de processus pont se basant sur des statistiques d'homogénéité d'échantillons. Ainsi, nous avons proposé le pont de Student et le pont de vraisemblance se basant respectivement sur la statistique de comparaison d'échantillon de Student et sur la statistique de ratio des log-vraisemblance.

De la même manière, on pourrait donc utiliser d'autres statistiques de comparaison d'échantillon (par exemple la statistique de Smirnov [SAPO]) qui pourraient présenter une performance accrue pour la détection de stationnarité. Plus généralement, toute variable exprimant un écart entre deux échantillons aurait pu être utilisée (par exemple la distance de Kullback-Leibler).

Enfin, ces variables de discrimination de la stationnarité auraient pu être améliorées par la prise en compte de la corrélation entre les k-effectifs d'étapes, afin de mieux les adapter aux propriétés des k-effectifs d'étapes considérés, et ainsi améliorer la puissance des tests les utilisant.

Nous avons ainsi testé une telle approche sur le pont de vraisemblance en modélisant le ratio du log-vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation. Nous détaillons ci-dessous cette approche.

VII.5.1. Pont de vraisemblance d'échantillons autocorrélés

Afin d'adapter la vraisemblance d'échantillons aux échantillons de k-effectifs d'étapes autocorrélés, nous pouvons intégrer l'estimation du coefficient d'autocorrélation dans l'expression du log-ratio des vraisemblances. Ce log-ratio des vraisemblances prenant en compte l'autocorrélation s'exprime en fonction des estimations des paramètres, $\forall n \in \llbracket 3, N-3 \rrbracket$,

$$2 \ln \frac{L_n}{L_0} = N \ln((1 - \hat{\rho}_{1,N}^2) \hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln((1 - \hat{\rho}_{1,n}^2) \hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N - n) \ln((1 - \hat{\rho}_{n+1,N}^2) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2) \quad \text{où}$$

- $\hat{\rho}_{1,N}$ est l'estimation du coefficient d'autocorrélation sur tout l'échantillon,
- $\hat{\rho}_{1,n}$ est l'estimation du coefficient d'autocorrélation sur le sous-échantillon transitoire,
- $\hat{\rho}_{n+1,N}$ est l'estimation du coefficient d'autocorrélation sur le sous-échantillon stationnaire.

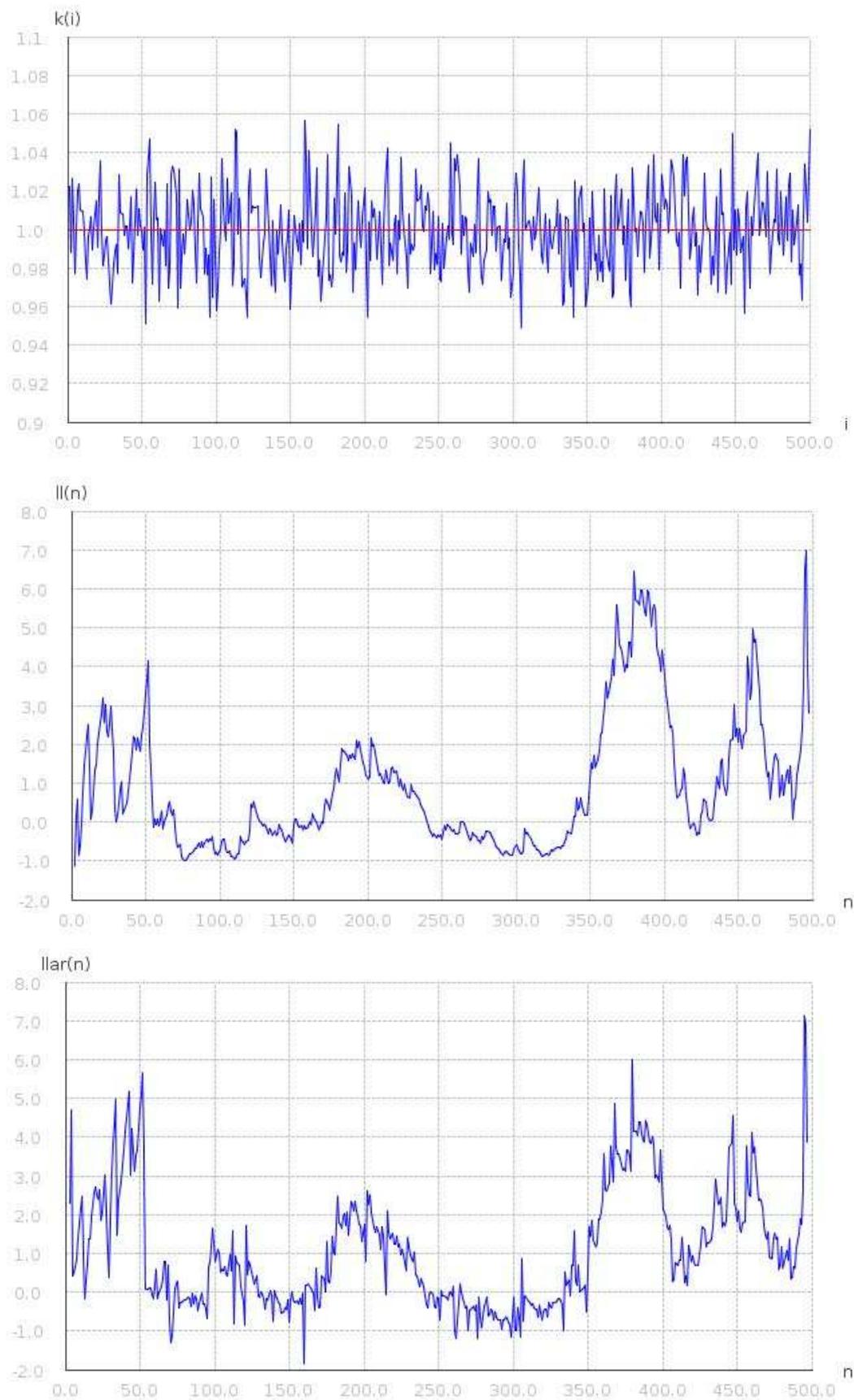


Illustration 73 : Séquence, pont de vraisemblance et pont de vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation de k -effectifs d'étapes stationnaires.

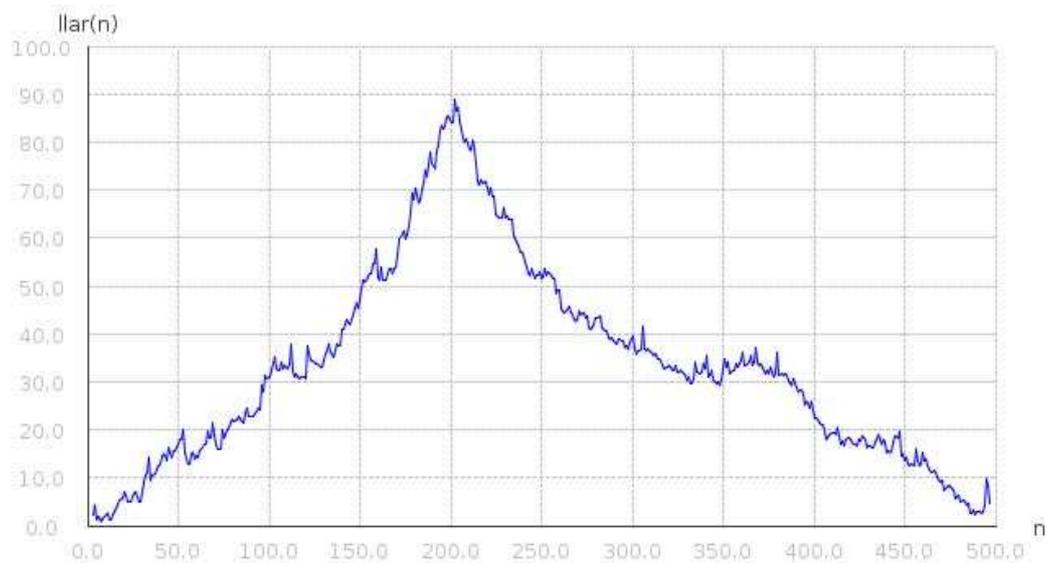
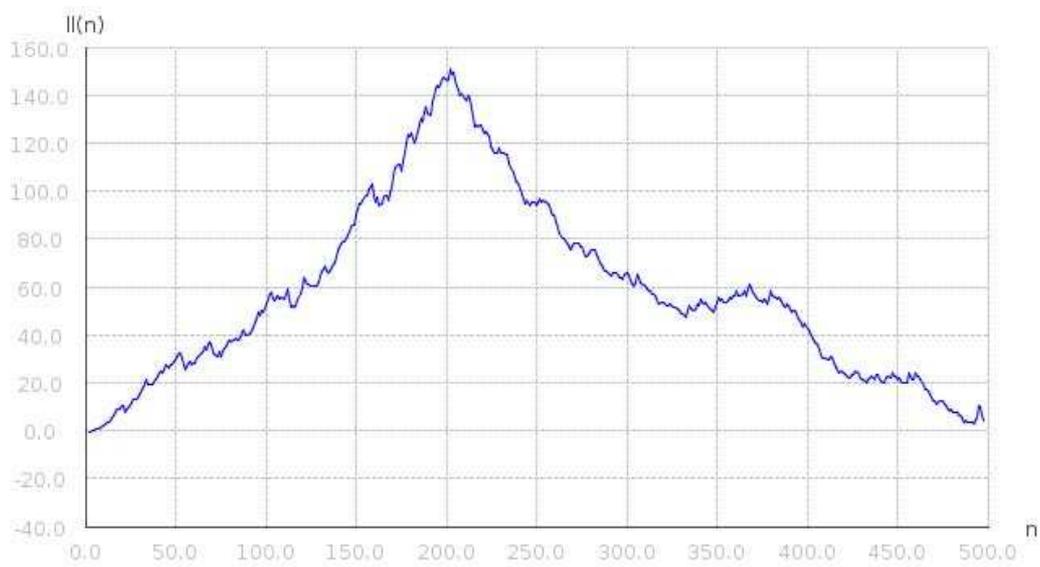
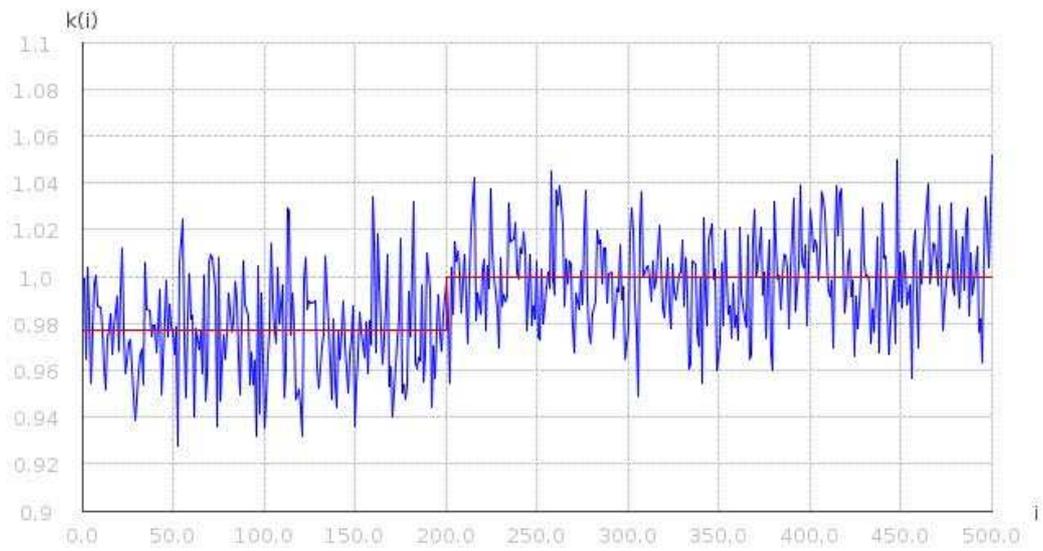


Illustration 74 : Séquence, pont de vraisemblance et pont de vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation de k -effectifs d'étapes contaminés par un transitoire initial de 200 étapes.

Le pont de vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation s'écrit donc $LLAR = \{llar_n\}_{3 \leq n \leq N-3}$

où $llar_n = N \ln((1 - \hat{\rho}_{1,N}^2) \hat{\sigma}_{1,N}^2) - n \ln((1 - \hat{\rho}_{1,n}^2) \hat{\sigma}_{1,n}^2) - (N-n) \ln((1 - \hat{\rho}_{n+1,N}^2) \hat{\sigma}_{n+1,N}^2)$.

Il présente des caractéristiques similaires au pont de log-vraisemblance simple (illustrations 73, 74) décrit au paragraphe « Ponts d'homogénéité de sous-échantillons ». Les variables de décision utilisées sont les mêmes que pour le pont de vraisemblance simple :

- statistique du maximum : $M_{LLAR} = \sup \{llar_n : 3 \leq n \leq N-3\}$
- statistique de la moyenne : $E_{LLAR} = \overline{LLAR}$ où $\overline{LLAR} = \frac{1}{N-5} \sum_{n=3}^{N-3} llar_n$,
- statistique de la variance : $S_{LLAR}^2 = \frac{1}{N-6} \sum_{n=3}^{N-3} (llar_n - \overline{LLAR})^2$,
- statistique de l'autocovariance : $arS_{LLAR}^2 = \frac{1}{N-6} \sum_{n=3}^{N-4} (llar_n - \overline{LLAR})(llar_{n+1} - \overline{LLAR})$,
- statistique du ratio des extremums : $RM_{LLAR} = \left| \frac{\sup \{llar_n : 3 \leq n \leq N-3\}}{\inf \{llar_n : 3 \leq n \leq N-3\}} \right|$.

Cependant, du fait de sa sensibilité à l'estimation du coefficient d'autocorrélation, $\hat{\rho}$ est un paramètre de nuisance non négligeable qui peut pénaliser la performance de ce pont de vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation (illustration 75).

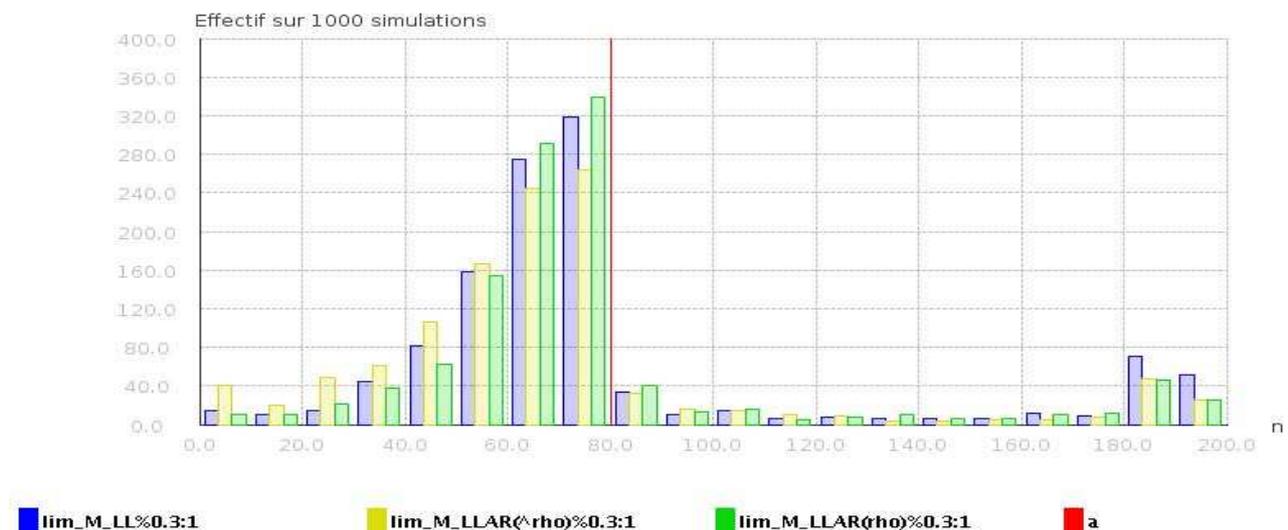


Illustration 75 : Distributions des estimateurs n pour les méthodes

- $\lim - M_{LL} \% 0.3 : 1$,
 - $\lim - M_{LLAR(\hat{\rho})} \% 0.3 : 1$ (estimation de ρ),
 - $\lim - M_{LLAR(\rho)} \% 0.3 : 1$ (cas théorique sans estimation de ρ),
- sur 1000 séquences de k -effectifs d'étapes contaminés.

Méthode	$E[n-a]$	StDev(n)	RMSE
$\lim - M_{LL} \% 0.3 : 1$	-4.20	38.92	0.489
$\lim - M_{LLAR(\hat{\rho})} \% 0.3 : 1$	-12.55	37.28	0.492
$\lim - M_{LLAR(\rho)} \% 0.3 : 1$	-5.64	34.38	0.435

On constate en effet une amélioration de la précision de troncature par l'utilisation du pont de vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation ($LLAR(\rho)$), à condition que ρ soit parfaitement connu. Sinon, i.e. en condition réelle, le pont de vraisemblance simple (LL) donne un biais plus faible et une variance équivalente au pont de vraisemblance prenant en compte l'autocorrélation quand ρ est estimé ($LLAR(\hat{\rho})$). En pratique, la prise en compte de l'autocorrélation ne se traduit donc pas nécessairement par une amélioration réelle de la qualité de suppression du transitoire si ρ est mal estimé.

Finalement, on retiendra qu'une amélioration des performances de méthodes de suppression de transitoire pourra être obtenue à condition que l'estimation de l'autocorrélation soit suffisamment précise. En particulier, l'estimateur classique de l'autocorrélation n'est pas assez efficace dans ce cas.

VIII Conclusion

Le travail présenté a permis de concevoir, tester, puis valider des méthodologies de suppression du régime transitoire initial des calculs Monte-Carlo de criticité.

En s'inspirant de l'exploitation des propriétés statistiques du pont brownien proposées par Schruben [SCHR1], nous avons introduit d'autres transformations que la transformation usuelle conduisant au pont brownien. Ces nouveaux « processus ponts », qui peuvent être construits à partir de toute statistique de comparaison d'échantillons, sont révélateurs de l'inhomogénéité statistique d'une séquence temporelle. A l'instar du pont brownien, leurs propriétés statistiques peuvent donc être exploitées pour valider la stationnarité de cette séquence.

Par exemple, les calculs Monte-Carlo de criticité peuvent présenter un régime transitoire initial induisant un biais sur l'espérance des premières étapes de la séquence des k-effectifs. Ce comportement des k-effectifs d'étapes peut donc être discriminé par un processus pont basé sur une statistique de comparaison de l'espérance d'échantillons, telle la statistique de Student. On peut ainsi construire un test statistique de la séquence des k-effectifs d'étapes pour la stationnarité (définie comme la stabilité de l'espérance de cette séquence).

La simulation Monte-Carlo peut alors être décontaminée de son régime transitoire initial en répétant ce test de stationnarité, après avoir supprimé les premières étapes de la séquence des k-effectifs d'étapes.

Nous avons défini un modèle simplifié des séquences de k-effectifs d'étapes, paramétré pour simuler les régimes transitoires observés dans les simulations Monte-Carlo de criticité réelles. Ce modèle a permis de tester la précédente méthodologie de suppression du régime transitoire pour diverses statistiques de comparaison d'échantillon, et pour divers paramétrages de l'heuristique d'itération. Certaines déclinaisons de cette méthodologie de suppression du régime transitoire ont alors montré une bonne capacité d'estimation de la longueur de différents régimes transitoires simulés, paramétrés à partir du retour d'expériences des calculs Monte-Carlo de criticité industriels.

En outre, deux expériences (« benchmarks ») de calculs de criticité réels ont été utilisées pour valider l'exploitation des méthodologies dans un cadre plus réaliste, indépendant du modèle simplifié des k-effectifs d'étapes. Cette fois encore, l'estimation de la longueur du régime transitoire par ces méthodes s'est montrée performante et a permis de réduire significativement le biais du modèle du k-effectif du système, et de le rendre ainsi exploitable dans le cadre industriel des calculs Monte-Carlo de criticité.

Finalement, le recoupement des meilleures méthodes de suppression du transitoire initial entre ces différents cas de test (plan d'expériences de régimes transitoires simulés et benchmarks) nous permet de retenir les méthodologies désignées par $lim-E_S\%0.3:1$ et $lim-LL_S\%0.1:1$, se basant sur le pont dit « de Student », pour estimer le nombre d'étapes transitoires.

Précisément, les méthodes $lim-E_S\%0.3:1$ et $lim-LL_S\%0.1:1$ consistent en une suppression itérative des premières étapes de la séquence des k-effectifs d'étapes tant que leur test de stationnarité respectif ne diagnostique pas la stationnarité des étapes restantes :

- le test de $lim-E_S\%0.3:1$ compare la valeur prise par la statistique de l'extremum du pont de Student avec le quantile à 30% d'une tabulation de cette statistique obtenue pour des séquences stationnaires, gaussiennes, autorégressives d'ordre 1, de 500 étapes et d'autocorrélation $\rho=0.2$,
- de même, le test de $lim-LL_S\%0.1:1$ compare la valeur prise par la statistique de la vraisemblance du pont de Student avec le quantile à 10% d'une tabulation de cette statistique obtenue pour des séquences stationnaires, gaussiennes, autorégressives d'ordre 1, de 500 étapes et d'autocorrélation $\rho=0.2$.

En particulier sur les benchmarks de calculs de criticité, l'utilisation de ces méthodes permet de supprimer des régimes transitoires biaisant le k-effectif du système significativement. En pratique, le modèle de k-effectif corrigé par ces méthodes devient cohérent avec le critère des expertises de sûreté-criticité qui consiste à contrôler le quantile à 99.865 % du modèle de k-effectif comme inférieur au seuil réglementaire du k-effectif autorisé (tenant compte de la marge de sécurité).

En conclusion, si cette méthodologie, basée sur la suppression itérative des premiers k-effectifs d'étapes, nous permet de corriger le modèle du k-effectif du système, elle reste toutefois limitée intrinsèquement par la faible visibilité sur le k-effectif de certains régimes transitoires observés dans les simulations Monte-Carlo de criticité. De plus, l'assimilation faite entre le régime transitoire des k-effectifs d'étapes et le régime transitoire de la simulation (i.e. de la population des neutrons) n'est pas parfaitement exacte, car lorsque l'hypothèse de stationnarité des k-effectifs d'étapes est vérifiée, elle n'implique pas nécessairement que la population des sources de la simulation ait elle-même atteint son propre régime stationnaire.

D'autres travaux sont menés parallèlement pour pallier cette problématique particulière, dont l'objectif est de définir un critère de stationnarité de la simulation basé directement sur la position des neutrons [UEKI 2,3,4] et non sur une fonction intégrale comme le k-effectif. La méthodologie

proposée pourrait alors être appliquée sur une fonction scalaire de la position des neutrons autre que le k-effectif et plus pertinente (et discriminante) pour décrire la stabilité de la simulation du point de vue neutronique. Certains régimes transitoires, pas nécessairement perceptibles sur les k-effectifs d'étapes mais néanmoins biaisant le modèle du k-effectif du système pourraient ainsi être détectés puis supprimés.

IX Sémantique et notations

k-effectif du système

C'est le coefficient de multiplication neutronique effectif, il peut être défini comme le rapport entre le nombre de neutrons de deux générations successives. Pour un système géométrico-chimique donné, il caractérise la capacité à entretenir les réactions de fission en chaîne.

k-effectifs d'étapes

C'est la séquence des coefficients de multiplication neutronique des étapes successives de la simulation Monte-Carlo de criticité. On estime le k-effectif du système comme la moyenne de ces k-effectifs d'étapes.

Stationnarité

Elle caractérise un état d'équilibre stable où la population des neutrons simulés forme un échantillon représentatif de la distribution réelle des neutrons du milieu. Dans cet état, les étapes de la simulation produisent une séquence de k-effectifs d'étapes dits également « stationnaires », que l'on considère issus d'une même loi de probabilité, dont la moyenne est le k-effectif du système modélisé.

Transitoire initial

C'est le régime temporaire caractérisant la migration de la population des neutrons simulés vers l'état stationnaire. Ces étapes transitoires forment une séquence initiale de k-effectifs d'étapes non représentative de l'état stationnaire. En particulier, on fera l'hypothèse que la tendance de cette séquence est une fonction du temps non constante qui converge en temps fini vers le k-effectif du système, c'est-à-dire la moyenne de la loi stationnaire.

Formellement, on définit alors les hypothèses suivantes :

H_0 : "Les k-effectifs d'étapes $\{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ sont identiquement distribués et de loi normale"

désigne l'hypothèse statistique nulle utilisée dans ce document caractérisant la "stationnarité" de la séquence des k-effectifs d'étapes,

H_1 : "Les k-effectifs d'étapes $\{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ présentent un régime transitoire initial"

désigne l'hypothèse alternative caractérisant la contamination par un régime transitoire de la séquence des k-effectifs d'étapes.

Note : ces deux hypothèses sont transposées dans le cadre du formalisme probabiliste.

Troncature

Elle désigne la procédure consistant à supprimer des éléments d'une séquence ordonnée : par exemple la première étape d'une séquence de k-effectifs d'étapes.

IX.1. Loïs et densités de probabilité

LG_{μ, σ^2} désigne la loi gaussienne (ou loi normale) d'espérance μ et de variance σ^2 , ainsi :

- $pdfLG_{\mu, \sigma^2}$ désigne la densité de probabilité de la loi normale d'espérance μ et de variance σ^2 ,
- $cdfLG_{\mu, \sigma^2}$ désigne la probabilité cumulée ou fonction de répartition de la loi normale d'espérance μ et de variance σ^2 .

T_n désigne la loi de Student à n degrés de liberté, ainsi :

- $pdfT_{N-2}$ désigne la densité de probabilité de la loi de Student à $N-2$ degrés de liberté,
- $cdfT_{N-2}$ désigne la probabilité cumulée de la loi de Student à $N-2$ degrés de liberté.

IX.2. Séquence des k-effectifs d'étapes et processus associés

$K = \{k_i\}_{1 \leq i \leq N}$ désigne la séquence des N k-effectifs d'étapes k_i (parfois notés $k(i)$).

Suivant le modèle théorique utilisé (processus autorégressif d'ordre 1 : AR1), la séquence de k-effectifs d'étapes K est caractérisée par :

- N le nombre d'étapes de la simulation,
- $k_{effectif}$ l'espérance des k-effectifs d'étapes (non contaminés),
- ρ l'autocorrélation d'ordre 1 des k-effectifs d'étapes,
- σ_ϵ l'écart-type du bruit des k-effectifs d'étapes,
- σ^2 , la variance des k-effectifs d'étapes, dans le cas d'un processus AR1 $\sigma^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{1 - \rho^2}$,
- $\frac{\tau^2}{N}$, la variance asymptotique de l'estimateur de la moyenne des k-effectifs d'étapes, dans

le cas d'un processus AR1 $\tau^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{(1 - \rho)^2}$,

- $\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i$, la moyenne empirique,
- $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (k_i - \hat{\mu})^2$, la variance empirique (non biaisée).

Le régime transitoire, s'il existe, est paramétré par :

- $\frac{aA}{\sigma\sqrt{N}}$ le biais sur l'espérance du k-effectif du système normalisé par son écart-type,
- $\frac{a}{N}$ la longueur relative de contamination des k-effectifs d'étapes.

$K_{n1, n2} = \{k_i\}_{n1 \leq i \leq n2}$ désigne la sous-séquence des k-effectifs d'étapes de n1 à n2 (y comprises). on pose alors :

- $\mu_{n1, n2}^{\hat{}} = \frac{1}{n2 - n1 + 1} \sum_{i=n1}^{n2} k_i$ désigne la moyenne empirique du sous-échantillon $K_{n1, n2}$,
- $\sigma_{n1, n2}^{\hat{ } 2} = \frac{1}{n2 - n1} \sum_{i=n1}^{n2} (k_i - \mu_{n1, n2}^{\hat{}})^2$ désigne la variance empirique de $K_{n1, n2}$,
- $\rho_{n1, n2}^{\hat{}}$ est l'estimation du coefficient d'auto-corrélation du sous-échantillon $K_{n1, n2}$,
- $p_{n1, n2}$ est la vraisemblance du sous-échantillon $K_{n1, n2}$.

$B = \{b_n\}_{0 \leq n \leq N}$ désigne le processus nommé abusivement par la suite « pont brownien » de la séquence des k-effectifs d'étapes K , où $b_n = \frac{n(\mu_{1, n}^{\hat{}} - \mu_{1, N}^{\hat{}})}{\hat{\sigma} \sqrt{N}}$.

$S = \{s_n\}_{1 \leq n \leq N-1}$ désigne le processus nommé arbitrairement « pont de Student » où

$$s_n = \sqrt{N-2} \frac{\mu_{1, n}^{\hat{}} - \mu_{n+1, N}^{\hat{}}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \left((n-1) \sigma_{1, n}^{\hat{ } 2} + (N-n-1) \sigma_{n+1, N}^{\hat{ } 2} \right)}}$$

$LL = \{l_n\}_{2 \leq n \leq N-2}$ désigne le processus nommé « pont de vraisemblance » où

$$l_n = N \ln(\sigma_{1, N}^{\hat{ } 2}) - n \ln(\sigma_{1, n}^{\hat{ } 2}) - (N-n) \ln(\sigma_{n+1, N}^{\hat{ } 2})$$

IX.3. Statistiques de test ou de décision

- D^2 désigne la statistique du χ^2 (telle qu'implémentée dans le code MORET) de la séquence des k-effectifs d'étapes K ,
- $\sqrt{N} D_N$ désigne la statistique de Kolmogorov de la séquence des N k-effectifs d'étapes K ,
- $N \omega_N^2$ désigne la statistique de Cramer von Mises de la séquence des N k-effectifs d'étapes K ,
- M_B désigne la statistique de l'extremum du processus B (abusivement dénommé « pont brownien »),
- LLM_B désigne la statistique du log-vraisemblance de l'extremum du processus B,
- E_B désigne la statistique de la moyenne du processus B,
- S_B^2 désigne la statistique de la variance du processus B,
- arS_B^2 désigne la statistique de l'autocovariance du processus B,
- LL_B désigne la statistique de la moyenne des log-vraisemblance du processus B,
- RM_B désigne la statistique du ratio des extremums du processus B,
- $RLLM_B$ désigne la statistique du ratio des log-vraisemblance d'extremums du processus B ,
- M_S désigne la statistique de l'extremum du processus S,
- LLM_S désigne la statistique du log-vraisemblance de l'extremum du processus S,
- E_S désigne la statistique de la moyenne du processus S,
- S_S^2 désigne la statistique de la variance du processus S,
- arS_S^2 désigne la statistique de l'autocovariance du processus S,
- LL_S désigne la statistique de la moyenne des log-vraisemblance du processus du processus S,
- RM_S désigne la statistique du ratio des extremums du processus S,
- $RLLM_S$ désigne la statistique du ratio des log-vraisemblance d'extremums du processus S,
- M_{LL} désigne la statistique de l'extremum du processus LL,
- E_{LL} désigne la statistique de la moyenne du processus LL,
- S_{LL}^2 désigne la statistique de la variance du processus LL,
- arS_{LL}^2 désigne la statistique de l'autocovariance du processus LL,
- RM_{LL} désigne la statistique du ratio des extremums du processus LL.

IX.4. Méthodes de suppression de transitoire

On désigne une méthode de suppression du transitoire par l'expression :

- " *lim* - $S\% \alpha : h$ " pour l'utilisation de la tabulation limite,
- " *param* - $S\% \alpha : h$ " pour l'utilisation de la tabulation paramétrée.

Cette méthode de suppression de transitoire est constituée par :

- un test statistique de stationnarité caractérisé par :
 - une variable de décision, "S",
 - une distribution de cette variable de décision sous hypothèse nulle :
 - "*lim*": « limite » ou « asymptotique » si la tabulation est faite sur un modèle constant de séquence de k-effectifs d'étapes,
 - "*param*": « paramétrée » si la tabulation est paramétrée par les caractéristiques de la séquence des k-effectifs d'étapes,
 - une erreur de première espèce " α ",
- une heuristique d'arrêt de la troncature itérative, dont la condition d'acceptation de la stationnarité est :
 - soit un nombre entier : "*h*" (≥ 1) d'itérations successives dont le diagnostic de stationnarité est positif,
 - soit un pourcentage des itérations restantes successives : "*h*" (< 1) dont le diagnostic de stationnarité est positif.

Sur une population suffisante de cas d'application, on modélise le critère de performance d'une telle méthode de suppression de transitoire par :

$$RMSE(n) = E \left[\left(\frac{n-a}{a} \right)^2 \right] \quad \text{l'erreur quadratique moyenne relative d'estimation de la longueur du}$$

transitoire, où n est la longueur estimée du transitoire et a la longueur réelle du transitoire.

X Bibliographie et références

X.1. Neutronique et criticité

- [BLOM] R. Blomquist et al.,
“OECD/NEA Source Convergence Benchmark Program: Overview and Summary of Results”,
ICNC2003 Challenges in the Pursuit of Global Nuclear Criticality Safety, Tokai-mura,
Japan, 20-24 October 2003.
- [COUS] P. Cousinou,
“Le risque de criticité et sa prévention dans les usines, les laboratoires et les transports”,
Clefs CEA n°45, <http://www.cea.fr/Fr/Publications/clefs45/clefs45fr/clefs4541.html>.
- [EGSC1] The NEA Expert Group on Source Convergence in Criticality-Safety Analysis,
“Benchmark specifications”,
'<http://www.nea.fr/html/science/wpncs/convergence/specifications/index.html>'.
- [EGSC2] The NEA Expert Group on Source Convergence in Criticality-Safety Analysis,
“Phase I: Results of Four Test Problems”,
OECD / NEA, '<http://www.nea.fr>'.
- [JACQ1] O. Jacquet et al.,
“Eigenvalue uncertainty evaluation in MC calculations, using time series Methodologies”,
in A. Kling et al. (Eds), Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport
Simulation and Applications, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2001.
- [JACQ2] O. Jacquet, J. Miss, G. Courtois,
“MORET: version 4.B, a multigroup Monte Carlo criticality code”,
ICNC2003 Challenges in the Pursuit of Global Nuclear Criticality Safety, Tokai-mura,
Japan, 20-24 October 2003.
- [LECO] A. Le Cocq,
“Contributions au développement des méthodes Monte-Carlo pour les études de criticité :
représentation de l'anisotropie de la diffusion, étude des perturbations”,
Thèse de l'Université Paris-Sud, 23 novembre 1998.
- [MISS] J. Miss, O. Jacquet, A. Nouri,
“Development and Comparison of Monte Carlo Techniques Implemented in the MORET 4
Code for the Calculation of Loosely Coupled Systems”,
in A. Kling et al. (Eds), Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport
Simulation and Applications, SpringerVerlag, Berlin Heidelberg, 2001.
- [RICH1] Y. Richet, O. Jacquet, X. Bay,
“Automated Suppression of the Initial Transient in Monte Carlo Calculations based on
Stationarity Detection using the Brownian Bridge Theory”,
ICNC2003 Challenges in the Pursuit of Global Nuclear Criticality Safety, Tokai-mura,
Japan, 20-24 October 2003.
- [RICH2] Y. Richet, O. Jacquet, X. Bay,
“Initialization Bias Suppression of an Iterative Monte Carlo Calculation”,
Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and
Biological Applications Palais des Papes, Avignon, France, September 12-15, 2005, on
CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL (2005)
- [RICH3] Y. Richet, O. Jacquet, X. Bay,
“Initialization Bias Suppression in Iterative Monte Carlo Calculation: Benchmarks on
Criticality Calculation”,

Monte Carlo 2005 The Monte Carlo Method: Versatility Unbounded In A Dynamic Computing World, Chattanooga, Tennessee, April 17–21, 2005.

- [UEKI1] T. Ueki, F.B. Brown,
“Stationarity Diagnostic Using Shannon Entropy in Monte Carlo Criticality Calculation I: F test”,
ANS Winter Meeting, Washington, Nov 2002.
- [UEKI2] T. Ueki, F.B. Brown, D. Kent Parsons, Drew E. Kornreich,
“Autocorrelation and Dominance Ratio in Monte Carlo Criticality Calculations”,
Nuclear Science and Engineering vol. 145 nov. 2003.
- [UEKI3] T. Ueki, F.B. Brown,
“Informatics Approach to Stationarity Diagnostics of the Monte Carlo Fission Source Distribution”,
ANS 2003 Winter Meeting, New Orleans, LA, November 16-20, 2003.
- [UEKI4] T. Ueki, F.B. Brown,
“Stationarity and Source Convergence Diagnostics in Monte Carlo Criticality Calculation”,
ANS Topical Meeting in Mathematics & Computations, Gatlinburg, TN 2003.

X.1.1. Documents IRSN

- [BAY] X. Bay,
“Détection de stationnarité pour l’estimation du facteur de multiplication effectif des neutrons”,
Rapport IPSN / ARMINES, EMSE/3MI 2001.
- [CHAJ] R. Chajari,
“Meilleure estimation de l’incertitude sur le coefficient de multiplication effectif calculé par la méthode de Monte-Carlo”,
Rapport de stage de D.E.A., Septembre 2000
- [DAMO] S. Damoiseau,
“Détection et suppression de la partie non stationnaire dans les calculs du facteur de multiplication effectif par Monte-Carlo”,
Rapport de stage de DESS, Septembre 1999, Note SEC/T/99.306.
- [DEMA] L. Demaret,
“Prise en compte des corrélations entre générations dans le calcul de l’incertitude statistique du facteur de multiplication effectif par Monte-Carlo”,
Rapport de stage de D.E.A., Septembre 98, Note SEC/T/99.321.
- [DUPA] J. Dupas, A. Nouri,
“Comparaisons et combinaisons des estimateurs du keff dans le code Monte-Carlo MORET 4”,
Note SEC/T/99.054, 1999.

X.2. Mathématiques appliquées

- [ASMU] S. Asmussen, P. Glynn, H. Thorison,
“Stationarity Detection in the Initial Transient Problem”,
ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation. Vol. 2 , No. 2, April 1992.
- [BASS] M. Basseville and I. Nikiforov,
“Detection of Abrupt Changes: Theory and Application”,
Previously published by Prentice-Hall, now available at
'<http://www.irisa.fr/sisthem/kniga/>'.
- [BILL] P. Billingsley,
“Convergence of probability measures”,
John Wiley & Sons, 1968.
- [BORO] A. N. Borodin, and P. Salminen, (1996),
“Handbook of Brownian Motion - Facts and Formulae”,
Birkhäuser Verlag, Basel - Boston - Berlin
- [FISH1] G. S. Fishman,
“Concepts and Methods in Discrete Event Digital Simulation”,
John Wiley & Sons, New York (1973).
- [FISH2] G. S. Fishman,
“Principles of Discrete Event Simulation”,
John Wiley & Sons, New York (1978).
- [GARF] A. V. Garfarian, C. J. Ancker, and T. Morisaka,
“Evaluation of commonly used rules for detecting « steady state » in computer simulation”,
Nav. Res. Log. Q. 24, 667-678 (1978).
- [HAND] “Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables
(1970)”,
edited by Milton Abramowitz and Irene A. Stegun
- [HEID1] P. Heidelberger and P. Welch,
“A spectral method for confidence interval generation and run length control in
simulations”,
Comm. Assoc. Comput. Mach. 24, 233-245, 1981.
- [HEID2] P. Heidelberger and P. Welch,
“Adaptative spectral methods for simulation output analysis”,
IBM J. Res. Dev. 25, 860-876, 1981.
- [HEID3] P. Heidelberger and P. Welch,
“Simulation Run Length Control in the Presence of an Initial Transient”,
Operations Research, vol. 31, Nov Dec 1983.
- [LAW] A. M. Law,
“A Comparison of Two Techniques for Determining the Accuracy of Simulation Output”,
Report No. 75-11, Department of Industrial Engineering, University of Wisconsin at
Madison (1975).
- [MA] X. Ma and A.K. Kochhar,
“A Comparison Study of Two Tests for Detecting Initialization Bias in Simulation Output”,
Simulation, August 1993.

- [PRES] K.Preston White,
"An Effective Truncation Heuristic for Bias Reduction in Simulation Output",
 Simulation, december 1997.
- [RIPL] B. D. Ripley,
"Stochastic Simulation",
 John Wiley & Sons, 1987.
- [ROBI] S. Robinson,
"A Statistical Process Control Approach for Estimating the Warm-Up Period",
 Proceedings of the 2002 Winter Simulation2002 Conference, E. Yücesan, C.-H. Chen, J.
 L. Snowdon, and J. M. Charnes, eds.
- [SAPO] G. Saporta,
"Probabilités, analyse des données et statistiques",
 éditions TECHNIP, 1990.
- [SCHR1] L. Schruben,
"Detecting Initialization Bias in Simulation Output",
 Operations Research, vol. 30, May June 1982.
- [SCHR2] L. Schruben, H. Singh, and L. Tierney,
"Optimal tests for initialization bias in simulation output",
 Operations Research, vol. 31, 1167-1178, 1983.
- [VASS] G. Vassilacopoulos,
"Testing for initialization bias in simulation output »",
 Simulation, vol. 52, pp. 151-153, 1989.
- [WILS] J.R. Wilson and Pritsker,
"A survey of research on the simulation start-up problem",
 Simulation 31, 55-58, 1978.

X.3. Environnement informatique

- [DEBI] Software in the Public Interest Inc., *"Debian GNU/Linux"*,
<http://www.debian.org/>.
- [REDH] Red Hat Inc., *"RedHat GNU/Linux"*,
<http://www.redhat.com/>.
- [SCIL] INRIA, *"Scilab : la plateforme open source de calcul scientifique"*,
<http://www.scilab.org/>.
- [SSH] OpenBSD, *"OpenSSH, a free version of the SSH connectivity tools"*,
<http://www.openssh.org/>.

**Ecole Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Etienne**

N° d'ordre : 429 MA

Author: Yann Richet

Title: Suppression of the initial transient in Monte-Carlo criticality simulations

Speciality: Applied Mathematics

Key words: Monte Carlo, initial transient, Brownian bridge, criticality, neutron science

Abstract:

Criticality Monte Carlo calculations aim at estimating the effective multiplication factor (k -effective) for a fissile system through iterations simulating neutrons propagation (making a Markov chain). Arbitrary initialization of the neutron population can deeply bias the k -effective estimation, defined as the mean of the k -effective computed at each iteration. A simplified model of this cycle k -effective sequence is built, based on characteristics of industrial criticality Monte Carlo calculations.

Statistical tests, inspired by Brownian bridge properties, are designed to discriminate stationarity of the cycle k -effective sequence. The initial detected transient is, then, suppressed in order to improve the estimation of the system k -effective.

The different versions of this methodology are detailed and compared, firstly on a plan of numerical tests fitted on criticality Monte Carlo calculations, and, secondly on real criticality calculations. Eventually, the best methodologies observed in these tests are selected and allow to improve industrial Monte Carlo criticality calculations.

**Ecole Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Etienne**

N° d'ordre : 429 MA

Auteur : Yann Richet

Titre : Suppression du Régime Transitoire Initial des Simulations Monte-Carlo de Criticité

Spécialité : Mathématiques Appliquées

Mots clefs : Monte-Carlo, régime transitoire initial, pont brownien, criticité, neutronique

Résumé :

Les calculs Monte-Carlo de criticité permettent d'estimer le facteur de multiplication effectif ("k-effectif") d'un système fissile au cours d'itérations simulant la propagation d'une population de neutrons, formant une chaîne de Markov. L'initialisation arbitraire de la population des neutrons simulés peut biaiser fortement l'estimation du k-effectif du système, défini comme la moyenne de la séquence des k-effectifs estimés à chaque itération. Un modèle simplifié de cette séquence de k-effectifs d'étapes est établi à partir du contexte technique d'exploitation industrielle des calculs Monte-Carlo de criticité.

Des tests statistiques, inspirés des propriétés du pont brownien, sont construits pour discriminer la stationnarité de la séquence des k-effectifs d'étapes. Le régime transitoire initial éventuellement détecté est alors supprimé pour améliorer l'estimation du k-effectif du système.

Les différentes déclinaisons de cette méthodologie sont détaillées puis comparées, d'une part sur un plan d'expériences représentatif des calculs Monte-Carlo de criticité, et d'autre part sur des calculs réels de configurations de criticité. Finalement, les performances observées sur ces applications permettent d'envisager une exploitation pertinente dans les calculs Monte-Carlo de criticité industriels.