



HAL
open science

Accélération de la simulation Monte Carlo du transport des neutrons dans un milieu évoluant par la méthode des échantillons corrélés

Cyril Dieudonné

► **To cite this version:**

Cyril Dieudonné. Accélération de la simulation Monte Carlo du transport des neutrons dans un milieu évoluant par la méthode des échantillons corrélés. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2013. Français. NNT : 2013PA112324 . tel-00934463

HAL Id: tel-00934463

<https://theses.hal.science/tel-00934463>

Submitted on 22 Jan 2014

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.

THESE DE DOCTORAT

École Doctorale : **MIPEGE**
DISCIPLINE : *Physique Nucléaire*

en vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITE PARIS-SUD

Accélération de la simulation Monte Carlo
du transport des neutrons dans un milieu évoluant
par la méthode des échantillons corrélés

Soutenue le 12 décembre 2013 par

Cyril DIEUDONNÉ

Cheikh M'Backé DIOP
Éric DUMONTEIL

Directeur de recherche (CEA Saclay)
Docteur (CEA Saclay)

*Directeur de thèse
Encadrant de thèse*

Composition du jury :

Pierre DESESQUELLES
Wim HAECK
Gilles BAN
Alexis NUTTIN
Gérard DEJONGHE
David LECARPENTIER

Professeur des Universités (Université Paris XI)
Docteur (IRSN/LNC)
Professeur des Universités (LPC Caen)
Maître de Conférences HDR (PHELMA/LPSC)
Docteur (CEA)
Docteur (EDF R&D Clamart)

*Examineur / Président du jury
Examineur
Rapporteur
Rapporteur
Membre invité
Membre invité*

Remerciements

À mon arrivée en thèse au CEA, j'ai été accueilli au sein du Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe, dirigé par Sylvie Naury et appartenant au Service d'Étude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées, dirigé successivement par Richard Lenain et Patrick Blanc-Tranchant. Je sais gré à ces trois personnes de l'accueil qu'elles m'ont réservé. La thèse elle-même fut dirigée par Cheikh Diop et encadrée par Éric Dumonteil, à qui j'adresse mes remerciements sincères pour la confiance qu'ils m'ont accordée en acceptant et en soutenant ma candidature. Ils m'ont offert l'opportunité d'étudier un sujet qui m'a passionné et m'ont permis d'apprendre dans d'excellentes conditions. Je les remercie aussi pour l'autonomie et la grande liberté d'action qu'ils m'ont offertes pendant ces trois ans. Sans eux, rien de tout ceci n'aurait pu être possible.

Je remercie également vivement Pierre Desesquelles, Gilles Ban, Alexis Nuttin et Wim Haeck d'avoir accepté de juger cet ouvrage et d'avoir participé au jury de soutenance en qualité respectives de président du jury, de rapporteurs et d'examineur. De la même façon, je remercie Gérard Dejonghe et David Lecarpentier de l'intérêt qu'ils ont porté à mes recherches et pour leur participation en tant que membres invités du jury.

Je tiens également à remercier les personnes qui m'ont aidé dans cette thèse, et littéralement facilité la tâche, grâce à leur aide, leurs suggestions ou contributions diverses et variées à mon travail. Je pense ici en particulier à Éric, Fausto, Émeric, Andréa, Jérôme, France, Olga, Clélia, Cédric, F.-X., Odile, Benjamin, Laurent, Karim, Arthur, Fabienne et Richard. Je tiens ici à mentionner le plaisir que j'ai eu à collaborer avec elles. Mais je tiens aussi à rajouter un remerciement plus particulier à Éric qui a suivi l'évolution de ce travail au quotidien et qui tient une grande place dans cette réussite. Son soutien, ses conseils et sa méthode "perturbative" de coaching ("Bon, Cyril, essaie de ne pas trop me décevoir cette fois . . .") m'ont permis de devenir le physicien que je suis.

Cette thèse doit donc beaucoup aux nombreuses personnes qui m'ont encouragé, soutenu et conforté tout au long de ces années. Qu'elles trouvent dans ce travail l'expression de mes plus sincères remerciements.

Mais elle s'est aussi accompagnée de quelques moments difficiles, notamment pour mes proches. M'ayant pris beaucoup de temps, elle ne m'a pas toujours permis de leur en consacrer autant qu'ils le méritent. Aussi, je remercie particulièrement Angélique pour ses encouragements et son soutien : malgré les périodes difficiles qu'on a traversées, tu as toujours été disponible et compréhensive. Plus encore, tu m'as donné le bonheur, avant la fin de cette thèse, de donner vie à notre petite Raphaëlle, qui a éclairé de ses sourires la dernière ligne droite de mon parcours universitaire . . . J'ai également pu compter sur l'aide de mes parents, qui ont toujours cru en moi et m'ont permis d'effectuer ces longues études. C'est à vous quatre que je dédie ce travail.

Résumé

Depuis quelques années, les codes de calculs Monte Carlo évoluant qui couplent un code Monte Carlo, pour simuler le transport des neutrons, à un solveur déterministe, qui traite l'évolution des milieux dû à l'irradiation sous le flux neutronique, sont apparus. Ces codes permettent de résoudre les équations de Boltzmann et de Bateman dans des configurations complexes en trois dimensions et de s'affranchir des hypothèses multi-groupes utilisées par les solveurs déterministes. En contrepartie, l'utilisation du code Monte Carlo à chaque pas de temps requiert un temps de calcul prohibitif.

Dans ce manuscrit, nous présentons une méthodologie originale évitant la répétition des simulations Monte Carlo coûteuses en temps et en les remplaçant par des perturbations. En effet, les différentes simulations Monte Carlo successives peuvent être vues comme des perturbations des concentrations isotopiques de la première simulation. Dans une première partie, nous présenterons donc cette méthode, ainsi que la méthode de perturbation utilisée : l'échantillonnage corrélé. Dans un deuxième temps, nous mettrons en place un modèle théorique permettant d'étudier les caractéristiques de la méthode des échantillons corrélés afin de comprendre ses effets durant les calculs en évolution. Enfin, dans la troisième partie nous discuterons de l'implémentation de cette méthode dans TRIPOLI-4[®] en apportant quelques précisions sur le schéma de calcul qui apportera une accélération importante aux calculs en évolution. Nous commencerons par valider et optimiser le schéma de perturbation à travers l'étude de l'évolution d'une cellule de combustible de type REP. Puis cette technique sera utilisée sur un calcul d'un assemblage de type REP en début de cycle. Après avoir validé la méthode avec un calcul de référence, nous montrerons qu'elle peut accélérer les codes Monte Carlo évoluant standards de presque un ordre de grandeur.

Mots clés : Neutronique, Simulation Monte Carlo, Irradiation, Calculs en évolution, perturbation, échantillonnage corrélé, TRIPOLI-4, ROOT

Abstract

For several years, Monte Carlo burnup/depletion codes have appeared, which couple Monte Carlo codes to simulate the neutron transport to deterministic methods, which handle the medium depletion due to the neutron flux. Solving Boltzmann and Bateman equations in such a way allows to track fine 3-dimensional effects and to get rid of multi-group hypotheses done by deterministic solvers. The counterpart is the prohibitive calculation time due to the Monte Carlo solver called at each time step.

In this document we present an original methodology to avoid the repetitive and time-expensive Monte Carlo simulations, and to replace them by perturbation calculations : indeed the different burnup steps may be seen as perturbations of the isotopic concentration of an initial Monte Carlo simulation. In a first time we will present this method, and provide details on the perturbative technique used, namely the correlated sampling. In a second time we develop a theoretical model to study the features of the correlated sampling method to understand its effects on depletion calculations. In a third time the implementation of this method in the TRIPOLI-4[®] code will be discussed, as well as the precise calculation scheme a meme to bring important speed-up of the depletion calculation. We will begin to validate and optimize the perturbed depletion scheme with the calculation of a REP-like fuel cell depletion. Then this technique will be used to calculate the depletion of a REP-like assembly, studied at beginning of its cycle. After having validated the method with a reference calculation we will show that it can speed-up by nearly an order of magnitude standard Monte-Carlo depletion codes.

Key words : Neutronic, Monte Carlo simulation, Burn-up, Depletion calculations, perturbation, correlated sampling, TRIPOLI-4, ROOT

Table des matières

Remerciements	iii
Résumé	v
Liste des figures	xiv
Liste des tableaux	xv
Liste des algorithmes	xvii
Liste des index	xix
Notations et Conventions	xxi
I INTRODUCTION	1
II SIMULATION MONTE CARLO PERTURBÉE EN ÉVOLUTION	7
1 Simulation du transport des neutrons par la méthode Monte Carlo	11
1.1 Principe de la méthode Monte Carlo	12
1.1.1 Historique et principe général	12
1.1.2 Forme intégró-différentielle de l'équation du transport	13
1.1.3 Simulation du transport des particules par la méthode Monte Carlo	14
1.2 Résolution de l'équation du transport	15
1.2.1 Résolution par simulation naturelle	16
1.2.2 Résolution par simulation non-analogue	17
1.2.3 Efficacité d'une technique de réduction de variance	18
1.3 Le code de transport TRIPOLI-4	18
1.3.1 Présentation du code	19
1.3.2 Les différents modes de simulation	19
1.3.3 Estimation du flux, des taux de réactions et du facteur de multiplication effectif	20
1.3.4 Les méthodes de réduction de variance	22
Références	27
2 Les méthodes perturbatives des simulations Monte Carlo	29
2.1 Développement en séries de Taylor	29
2.2 La méthode des échantillons corrélés	30
2.2.1 Perturbation du noyau de transition	30
2.2.2 Application à la perturbation des concentrations isotopiques	31
2.2.3 Exemple	33

2.2.4	Intérêts et inconvénients de la méthode	33
	Références	36
3	Les codes de calcul Monte Carlo évoluant	37
3.1	Couplage des simulations Monte Carlo et des calculs d'évolution	37
3.2	Présentation de TRIPOLI-4 évoluant	38
3.2.1	Le solveur d'évolution MENDEL	38
3.2.2	Hypothèses physiques et modélisation de TRIPOLI-4 évoluant	40
3.2.3	Schémas temporels définis dans les scripts d'évolution	41
3.3	Estimation des erreurs systématiques et statistiques	43
3.3.1	Identification et correction des erreurs systématiques	43
3.3.2	Propagation des erreurs statistiques	43
	Références	45
4	Accélération des calculs en évolution avec l'échantillonnage corrélé	47
4.1	Présentation de l'algorithme	47
4.2	Couplage avec la plateforme d'évolution de TRIPOLI-4	47
4.2.1	Introduction d'une méthode perturbative dans les schémas d'évolution	47
4.2.2	Sélection de la méthode perturbative	48
4.3	Développement d'une librairie de post-traitement : TRIPOLI-4 ROOT-Tools	50
4.3.1	Présentation du projet	50
4.3.2	Architecture du projet	50
	Références	52
III	ÉTUDE THÉORIQUE DE LA MÉTHODE	53
5	Présentation du modèle théorique	57
5.1	Enjeux	57
5.2	Description du système et hypothèses de calcul	57
5.3	Réponse, estimateur et résolution théorique	57
5.4	Notations	58
6	Modèle à 1 isotope	59
6.1	Positionnement du problème	59
6.2	Calcul théorique du score moyen et de sa variance	59
6.2.1	Résolution du problème initial	60
6.2.2	Résolution du problème perturbé	61
6.2.3	Domaine de validité	62
6.3	Simulations et validation	62
6.3.1	Résultats de simulations et validation	63
6.3.2	Analyse du domaine de validité \mathcal{D}_1	64
6.4	Bilan du modèle à 1 isotope	67
	Références	68
7	Modèle à N isotopes	69
7.1	Calcul du score moyen et de sa variance	69
7.1.1	Résolution du problème initial	70
7.1.2	Résolution du problème perturbé	70
7.1.3	Domaine de validité	71
7.2	Simulations et validation	72
7.2.1	Cas particulier : $N = 2$	72
7.2.2	Résultats de simulations pour le cas $N = 2$	72
7.3	Extension au traitement ponctuel de l'énergie et au transport en milieux hétérogènes	73
7.4	Bilan du modèle théorique	76

IV	ÉTUDE PRATIQUE DE LA MÉTHODE	79
8	Optimisations informatiques et physiques du schéma de perturbation	83
8.1	Procédures de validation et de mesure des performances	83
8.1.1	Liste des grandeurs à analyser	83
8.1.2	Procédure de validation	84
8.1.3	La figure de mérite, un critère unique de qualification	85
8.1.4	Matériel utilisé pour la mise en œuvre	85
8.2	Description du premier cas test : la cellule de combustible UOX	85
8.3	Résultats de l'évolution avec la méthode "classique"	86
8.3.1	Évolution de quelques concentrations isotopiques	88
8.3.2	Facteur de multiplication effectif	88
8.3.3	Temps de calcul	89
8.4	Résultats des calculs perturbés	90
8.4.1	Rappel de l'algorithme et définition des paramètres du schéma de calcul perturbé	90
8.4.2	Évolution des concentrations isotopiques	92
8.4.3	Impact sur le temps de calcul	94
8.4.4	Démarrage retardé des perturbations	95
8.5	Méthodes d'accélération de la construction des sections efficaces	95
8.5.1	Profilage du code et optimisation du temps de calcul	98
8.5.2	Unification des compositions	98
8.5.3	Généralisation de la méthode d'accélération à l'exploitation de la persistance des données	99
8.6	Vers des schémas de réduction de variance	102
8.6.1	Procédure d'optimisation des concentrations isotopiques du jeu de traces	103
8.6.2	Validation des résultats	103
8.6.3	Dégradation de la variance	105
8.6.4	Mesure des performances	106
8.7	Impact du découpage temporel sur la figure de mérite	106
	Références	111
9	Application à l'étude d'un assemblage en début de cycle	113
9.1	L'assemblage de combustibles UOX	113
9.1.1	Description du cas test	113
9.1.2	Définition des paramètres temporels	114
9.2	Résultats de l'évolution avec la méthode "classique"	115
9.2.1	Évolution de quelques concentrations isotopiques	115
9.2.2	Le spectre énergétique	116
9.2.3	Facteur de multiplication effectif	116
9.2.4	Temps de calcul	116
9.3	Validation et mesure des performances	119
9.3.1	Validation des résultats	119
9.3.2	Efficacité de la technique de réduction de variance	119
9.3.3	Mesure des performances	123
	Références	130
V	BILAN ET PERSPECTIVES	131
	Bilan du travail de thèse	133
	Perspectives de développement	136
VI	RÉFÉRENCES ET ANNEXES	141
	Liste des références consultées	145

A	Démonstrations de différents calculs en simulation analogue, non-analogue et perturbée	149
A.1	Espérance de l'encaissement relatif	149
A.1.1	Dans le cas d'une simulation naturelle	149
A.1.2	Dans le cas d'une simulation non-analogue	150
A.2	Équation du transport avec carte d'importance	150
A.3	Corrections de poids dues à l'échantillonnage corrélé	151
A.4	Incertitude statistique relative pour des faibles perturbations	152
B	Démonstration des résultats théoriques	155
B.1	Calculs à 1 isotope	155
B.1.1	Equivalence avec le modèle de perturbation en densité	155
B.1.2	Résolution du problème initial	156
B.1.3	Résolution du problème perturbé	157
B.2	Calculs à N isotopes	161
B.2.1	Résolution du problème initial	161
B.2.2	Résolution du problème perturbé	162

Liste des figures

1.1	Algorithme de principe d'une simulation Monte Carlo de l'histoire d'un neutron	16
1.2	Exemple d'une trace traversant trois milieux avant d'effectuer une collision	25
2.1	Application de l'échantillonnage corrélé à un exemple de trace	34
6.1	Représentation du domaine de validité \mathcal{D}_1	63
6.2	Écart (en %) entre la théorie et les simulations	64
6.3	Résultats de simulations et valeurs théoriques pour deux isotopes	65
6.4	Erreur statistique relative théorique et simulée	66
7.1	Représentation du domaine de validité \mathcal{D}_2	73
7.2	Influence de la probabilité de non-absorption d'un isotope sur \mathcal{D}_2	74
7.3	Influence de la probabilité d'interaction avec un isotope sur \mathcal{D}_2	74
7.4	Résultats de simulations et valeurs théoriques	75
8.1	Représentations de la cellule UOX à 1 et 6 couronne(s)	87
8.2	Évolution de la concentration isotopique des principaux isotopes de l'uranium et du plutonium dans les couronnes interne et externe de la cellule de combustible UOX	88
8.3	Évolution du facteur de multiplication effectif de la cellule	89
8.4	Temps de calcul moyen des simulations non-perturbées de l'évolution de la cellule	90
8.5	Schéma d'Euler perturbé	91
8.6	Évolution perturbée de la concentration isotopique de ^{240}Pu dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX	93
8.7	Évolution perturbée de la concentration isotopique de ^{243}Am dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX	93
8.8	Écart type perturbé de la concentration isotopique de ^{240}Pu dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX	96
8.9	Paramètre t du flux total dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif	96
8.10	Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{238}U dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif	97
8.11	Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX	97
8.12	Comparaison des temps de calcul de la simulation de référence avec et sans l'unification des compositions	100
8.13	Performances du calcul perturbé avec l'unification des compositions de la cellule de combustible UOX	100
8.14	Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX avec l'enregistrement des données nucléaires dans le jeu de traces	101
8.15	Schéma d'Euler perturbé avec la méthode de réduction de variance	104

8.16	Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation du flux volumique total dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif avec la procédure de réduction de variance	107
8.17	Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{235}U et de ^{239}Pu dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX avec la procédure de réduction de variance	107
8.18	Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX avec l'enregistrement des données nucléaires dans le jeu de traces et la procédure de réduction de variance	109
8.19	Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation du flux volumique total dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif avec la procédure de réduction de variance et un découpage temporel fin	109
8.20	Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{235}U et de ^{239}Pu dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX avec la procédure de réduction de variance et un découpage temporel fin	110
8.21	Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX avec l'enregistrement des données nucléaires dans le jeu de traces, la procédure de réduction de variance et un découpage temporel fin	110
9.1	Description radiale d'un assemblage de combustibles UOX	114
9.2	Évolution des concentrations de quelques noyaux du calcul de référence de l'assemblage jusqu'à 14GWj/t d'irradiation	117
9.3	Rapport des flux volumiques thermique et total dans chacune des compositions évoluant de l'assemblage jusqu'à 14GWj/t d'irradiation	118
9.4	Temps de calcul moyen des simulations non-perturbées de l'évolution de l'assemblage	118
9.5	Évolutions perturbée et non-perturbée du facteur de multiplication effectif et du flux volumique total du groupe de cellules 1 de l'assemblage	120
9.6	Écart entre les concentrations isotopiques perturbées et non-perturbées de huit noyaux dans le groupe de cellules 1 de l'assemblage	121
9.7	Validation des concentrations isotopiques du calcul perturbé de l'assemblage dans le groupe de cellules 1 avec la méthode de réduction de variance	122
9.8	Performances de la méthode de réduction de variance sur l'estimation du facteur de multiplication effectif	124
9.9	Performances de la méthode de réduction de variance sur l'estimation de la puissance	125
9.10	Performances de la méthode de réduction de variance sur l'estimation des concentrations isotopiques de quelques actinides majeurs dans le groupe de cellules 1	126
9.11	Performances de la méthode de réduction de variance sur l'estimation des concentrations isotopiques de quelques noyaux dans le groupe de cellules 1	127
9.12	Gain obtenu avec le schéma de perturbation et la méthode de réduction de variance entre 4 et 14GWj/t sur l'estimation du facteur de multiplication effectif et de la puissance de chaque milieu évoluant	128
9.13	Gain obtenu avec le schéma de perturbation et la méthode de réduction de variance entre 4 et 14GWj/t sur l'estimation des concentrations isotopiques de huit noyaux	129

Liste des tableaux

2.1	Application de l'échantillonnage corrélé à un exemple de trace	34
8.1	Liste des isotopes de référence du combustible UOX	84
8.2	Valeurs des quantiles à 99,9% en fonction du nombre de simulateurs indépendants	85
8.3	Liste des concentrations isotopiques des matériaux de la cellule de combustible UOX	86
8.4	Estimations du k_{eff} par un calcul non-perturbé sur la cellule de combustible UOX	89
8.5	Paramètre t de trois concentrations isotopiques après 20 GWj/t et 50 GWj/t de perturbation . .	94
8.6	Maximum du paramètre t sur les concentrations isotopiques des différentes couronnes entre 40 et 60 GWj/t d'irradiation	95
9.1	Estimations du k_{eff} par un calcul non-perturbé sur l'assemblage de combustible UOX	116

Liste des algorithmes

3.1	La méthode d'Euler explicite (ordre 1)	42
3.2	La méthode du point milieu (ordre 2)	42
3.3	La méthode de la moyenne (ordre 2)	42
4.1	Remplacement des séquences de transports par des perturbations	49
4.2	Prise en compte de l'apparition des isotopes et de la dégradation des erreurs statistiques	49
8.1	Optimisation des concentrations isotopiques pour la création des traces	105

Liste des index

- Assemblage de combustible UOX, 113
- Biais, voir Erreurs systématiques
- Capture implicite, 23
- Carte d'importance, 22
- Cellule de combustible UOX, 85
- Concentration isotopique, 88, 92, 115, 119
- Correction de poids, 17
 - de l'échantillonnage corrélé, 30, 31, 33, 61
- Criticité, 20
- Cycle, 15
- Découpage
 - spatial, 41, 43
 - temporel, 41, 43, 114
- Dégradation de la variance, 35, 62, 64, 71, 72, 105, 119
- Densité de collision, 14
- Discretisation, voir Découpage
- Domaine de validité, 62, 64, 71, 72
- Données nucléaires, 19, 39, 40, 51
- Echantillons corrélés (méthode de -), 30–35, 47
- Equation
 - s de Bateman/de l'évolution, 37, 39
 - de Boltzmann/du transport, 13, 14, 37
- Erreurs
 - statistiques, 43
 - systématiques, 43
- Estimateur, 15–17, 30
 - des taux de réaction, 21
 - du facteur de multiplication effectif, 21
 - du flux, 20
- Euler explicite (méthode d'-), 41, 48
- Exploitation de la persistance des données, 99
- Facteur de multiplication effectif, 21, 88, 116, 119
- Figure de mérite (FOM), 18, 35, 85, 106, 123
- Flux neutronique, 13, 20, 57, 116
- Fonction détecteur, 14
- Grille universelle, 138
- Loi des grands nombres, 12
- Maillage, voir Découpage
- MENDEL, 38
- Modèle théorique, 53, 67, 76
- Monte Carlo (méthode de -), 12–15, 44
- Monte Carlo évoluant (méthode de -), 37–38
- Moyenne (méthode de la -), 41
- Neumann (série de -), 14, 31
- Opérateur
 - de collision, 14, 32
 - de transition, 14, 30
 - de transport, 14, 32
- Perturbation, 29, 47
 - Algorithme de -, 47, 48, 90, 103, 136
 - Amplitude de -, 35, 48, 95
 - des concentrations isotopiques, 31, 33
- Poids, 17, 21
 - corrigé, 17
 - naturel, 17
- Point milieu (méthode du -), 41
- Protection, 20
- Pseudo-scattering, voir Woodcock
- Quantile, 85
- Réduction de variance (méthode de -), 17, 22–26, 102–106, 119
- Répliques indépendantes (méthode des -), 44, 86, 114
- Réponse, 14
- ROOT, 47, 50
- ROOT-Tools, 50
- Roulette russe, 24
- Séries de Taylor, 30
- Schémas de calcul, 41, 47
- Simulation
 - analogue (ou naturelle), 16
 - non-analogue, 17
- Splitting, 24
- Taux de réaction, 21
 - multigroupe, 40
- Taylor (séries de -), 29
- Temps de calcul, 35, 47, 89, 94, 98, 116, 123, 136

Test de Student, 84
Théorème central-limite, 12, 15, 35, 43
Total Monte Carlo (TMC), 44, 137
Traces, 15, 47, 51, 94
TRIPOLI-4, 18–26
TRIPOLI-4 évoluant, 38–44, 47

Unification des compositions, 98

Weight watching, 24
Woodcock (méthode de -), 25, 47

Notations et Conventions

Tout au long de ce document, un grand nombre de symboles est utilisé. Afin de maintenir une certaine cohérence et pour éviter toute confusion, quelques conventions ont été établies. Dans un effort de conformité à cette terminologie conventionnelle, chaque symbole est, à de très rares exceptions, associé à une unique définition indiquée ci-après.

Outils mathématiques

\equiv	égale par définition
$E_{\mathcal{E}}[\cdot]$	l'espérance mathématique sur l'espace \mathcal{E}
$Var_{\mathcal{E}}[\cdot]$	la variance sur l'espace \mathcal{E}
$CoV_{\mathcal{E}}[\cdot]$	la covariance sur l'espace \mathcal{E}
$\ \cdot\ $	la norme euclidienne
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	le produit scalaire sur l'espace vectoriel des fonctions de \mathcal{E} dans \mathbb{R} : $\langle f_1, f_2 \rangle = \int_{\mathcal{E}} f_1(P) f_2(P) dP$

Eléments de la géométrie

Positionnement dans l'espace

\mathcal{E}	l'espace des phases à 6 dimensions
\mathcal{M}	la partie spatiale de l'espace des phases \mathcal{E}
\mathcal{D}	un volume élémentaire centré autour d'un point de l'espace des phases \mathcal{E}
P ou \mathbf{z}	un point de l'espace des phases \mathcal{E} , décomposable arbitrairement en position-vitesse ou en position-énergie-direction
\vec{r} ou x	les coordonnées spatiales du point P ou \mathbf{z}
\vec{v}	le vecteur vitesse du point P ou \mathbf{z}
E	l'énergie du point P ou \mathbf{z}
$\vec{\Omega}$	la direction du vecteur vitesse du point P ou \mathbf{z}

Caractéristiques des milieux

X_m	la grandeur X dans le milieu \mathcal{M}_m
N	le nombre d'isotopes
$N^i(\vec{r})$	la concentration de l'isotope i au point \vec{r}
$\{N^i\}_{(t)}$	l'ensemble des concentrations isotopiques de chacune des compositions à l'instant t

Données nucléaires

m_n	la masse du neutron
σ_r^i	la section efficace microscopique de l'interaction r des neutrons sur l'isotope i
Σ_r^i	la section efficace macroscopique de l'interaction r des neutrons sur l'isotope i
Σ_r	la section efficace macroscopique de l'interaction r du milieu
ν_i	le nombre de neutrons produits par fission sur l'isotope i
$\sigma_{i \rightarrow j}$	la section efficace microscopique d'alimentation de l'isotope i vers l'isotope j
$\lambda_{i \rightarrow j}$	la constante de décroissance radioactive de l'isotope i vers l'isotope j
λ_i	la constante de décroissance radioactive de l'isotope i

Données de simulation

Grandeurs physiques

$n(P, t)$	la densité de neutron au point P à l'instant t
$\phi(P)$	le flux de particules au point P
$\psi(P)$	la densité de collisions entrantes au point P
$\tau_r(P)$	le taux de réaction macroscopique de l'interaction r au point P
$S(P)$	la source externe de particules (mode protection) ou de fission (mode criticité)
k_{eff}	le facteur de multiplication effectif
$\{\phi, \tau\}_{(t)}$	l'ensemble des flux et taux de réaction à l'instant t sur tout l'espace des phases

Opérateurs de l'équation du transport

$T(\cdot)$	l'opérateur de transport
$C(\cdot)$	l'opérateur de collision
$K(\cdot)$	l'opérateur de transition

Particules simulées

N_γ	le nombre de particules simulées
γ	la trace d'une particule simulée
$\{\gamma(t)\}$	l'ensemble des traces d'un transport Monte Carlo simulées dans l'état du système à l'instant t
$p(P \rightarrow P')$	la probabilité qu'une particule diffusée en P aille jusqu'au point P' et y fasse une collision
$dp(\gamma)$	la probabilité d'apparition de la trace γ
$dp^n(\gamma)$	la probabilité d'apparition jusqu'à la $n^{ième}$ collision de la trace γ
$k(P)$	le nombre moyen de particules suite à une collision en P
$\omega^n(\gamma)$	le poids de la particule de trace γ avant sa $n^{ième}$ collision
$\omega_+^n(\gamma)$	le poids de la particule de trace γ après sa $n^{ième}$ collision
$l^n(\gamma)$	la distance parcourue par la particule de trace γ entre sa $n^{ième}$ et sa $(n+1)^{ième}$ collision

Estimation des scores

R	une réponse (flux, taux de réaction, ...)
\bar{R}	la réponse moyenne
σ^2	la variance de la réponse
g	la fonction détecteur associée à la réponse R
\bar{I}^n	la contribution au score des particules ayant subi n collisions
$i^n(\gamma)$	l'encaissement relatif au $n^{ième}$ choc de la trace γ

Simulation non-analogue

X^*	la grandeur X en simulation non-analogue
\mathfrak{S}	une fonction associée à une carte d'importance
$\Pi(P)$	le poids de référence au point P
ω_c	la correction de poids de la capture implicite

Simulation perturbée

\tilde{X}	la grandeur X perturbée
X^{cs}	la grandeur X perturbée par la méthode des échantillons corrélés
$\kappa_{cs}^n(\gamma)$	la correction de poids cumulée de l'échantillonnage corrélé avant la $n^{i\grave{e}me}$ collision de la trace γ
η_i	le rapport des concentrations perturbées et initiales de l'isotope i
q_i	la probabilité d'interaction avec l'isotope i
p_i	la probabilité de survie à une interaction avec l'isotope i
p	la probabilité de survie à une interaction dans le milieu
α	le rapport des sections efficaces macroscopiques totales des milieux perturbé et initial

Mesure des performances

T	le temps de calcul d'une simulation Monte Carlo évoluant
t	le temps de calcul d'une simulation Monte Carlo (soit un pas en évolution)
FOM	la figure de mérite (F igure O f M erit)

Première partie

INTRODUCTION

La simulation neutronique en évolution

L'étude de la **physique des cœurs** de réacteurs en fonctionnement normal et accidentel cherche à caractériser en tout point de l'**espace des phases** et en fonction du **temps** des grandeurs physiques d'intérêt d'un point de vue neutronique, telle que le facteur de multiplication des neutrons, la distribution spatiale de puissance, ou encore l'inventaire des concentrations isotopiques du combustible. La connaissance des grandeurs physiques est essentielle pour les études de sûreté et de criticité des réacteurs nucléaires. Dans ce contexte, depuis plusieurs décennies, différents codes de calcul ont été développés (notamment au CEA) afin de reconstruire numériquement l'évolution des grandeurs d'intérêt.

Les grandeurs physiques fondamentales de la neutronique sont le flux des neutrons et les concentrations isotopiques du milieu combustible dans lequel ils se propagent. Celles-ci sont régies par deux équations couplées entre-elles, respectivement l'équation de **Boltzmann** qui modélise le transport (ou propagation) des neutrons dans la matière, et les équations généralisées de **Bateman** (ou équation d'évolution) qui gouvernent l'évolution temporelle des concentrations des nucléides du milieu de propagation. Le **couplage** "Boltzmann-Bateman" résulte du fait que les neutrons se propageant dans un milieu induisent des réactions nucléaires dans celui-ci. Cette transmutation modifie donc continûment la composition du milieu traversé par les neutrons, phénomène qui rétroagit sur la propagation de ces derniers dans ce même milieu. Le nouveau comportement des neutrons va à son tour se répercuter sur la cinétique de l'évolution isotopique du milieu de propagation. Et ainsi de suite. Dans un cœur de réacteur, ce couplage entre "transport et évolution" est particulièrement important.

Il existe plusieurs **approches numériques** pour résoudre l'équation du transport : **déterministe et stochastique** (aussi appelée probabiliste ou **Monte Carlo**). L'intérêt de la première, qui opère par discrétisation de l'espace des phases, est sa rapidité d'exécution mais au prix d'approximations portant par exemple sur la représentation, en fonction de l'énergie, des sections efficaces qui décrivent l'interaction entre les neutrons et les noyaux-cibles : c'est l'approximation dite "multigroupe". La seconde consiste à simuler, au plus près de la réalité, l'histoire des neutrons. Elle est donc par nature quasi-exacte mais présente l'inconvénient de nécessiter des **temps de calcul** importants. Les équations d'évolution, elles, se prêtent très bien à un traitement déterministe et il n'y a pas d'intérêt pour les problèmes traités ici de recourir, pour les résoudre, à une méthode probabiliste.

L'amélioration récente des **outils informatiques** autorise à présent d'investiguer la voie des méthodes stochastiques. Restreintes jusqu'alors aux études stationnaires, la puissance de calcul des ordinateurs aujourd'hui disponible permet de mettre en œuvre la méthode Monte Carlo pour calculer un cœur de réacteur de puissance à trois dimensions, sans approximation, en couplant un solveur de **transport Monte Carlo** à un **solveur déterministe d'évolution** des concentrations isotopiques. Ce type de couplage a déjà été réalisé par différentes équipes dans le monde, par exemple¹ : MOCUP (MCNP et ORIGEN2), MCB (MCNP et CINDER), MCWO (MCNP et ORIGEN2), MONTEBURN (MCNP et ORIGEN2), MURE (MCNP(X) et un module d'évolution propre), MCODE (MCNP et ORIGEN2), ALEPH (MCNP(X) et ORIGEN2), MCNP-ACAB (MCNP et ACAB), MCNPX (MCNPX et CINDER90), MCOR (MCNP et ORIGEN-S, puis KORIGEN) et VESTA (MCNP, MORET, ... et ORIGEN2, PHOENIX, ...). La mise en pratique des couplages opérationnels présente deux difficultés : l'une concerne les **temps de calcul** lorsque l'on recherche par exemple la distribution fine

1. Dans la liste qui suit, on nomme le code réalisant le couplage suivi, entre parenthèses, des codes de transport et d'évolution qu'il couple. Les références de certains de ces codes sont indiquées à la fin de cette introduction.

de la puissance d'un cœur (idéalement à l'échelle de la pastille de combustible) et la seconde la **maîtrise des incertitudes statistiques** associées aux grandeurs physiques calculées, maîtrise rendue d'autant plus difficile que l'on couple deux solveurs, l'un d'eux étant probabiliste.

L'originalité du travail de thèse présenté dans ce mémoire réside dans les solutions apportées sur ces aspects précis. On perçoit donc que la finalité de notre travail est de contribuer à la mise au point d'un schéma de calcul de cœur de réacteur à trois dimensions exempt d'approximation et aux incertitudes parfaitement maîtrisées. En couplant efficacement un code de transport Monte Carlo des neutrons à un code déterministe d'évolution des concentrations isotopiques on offre la possibilité de traiter des configurations complexes à effets physiques 3D significatifs difficilement modélisables par les codes déterministes (exemple des réacteurs à eau bouillante). L'approche que nous avons adoptée laisse aussi entrevoir son application à des situations de transitoires de puissance (normaux et accidentels) et par suite à un couplage avec les équations de la thermohydraulique cœur. Nous adapterons dans la suite le vocable "**Monte Carlo évoluant**" pour nommer le couplage entre un code de transport Monte Carlo et un solveur d'évolution temporelle déterministe.

Le principe de notre schéma consiste à ne réaliser qu'une seule simulation Monte Carlo de transport et à considérer que les évolutions des concentrations isotopiques représentent des **perturbations** relativement à cette simulation initiale. Or, les calculs perturbatifs sont plus **rapides** que les calculs de transport purs. Par conséquent, en enregistrant toutes les histoires d'une simulation initiale, il est possible d'éviter de refaire les transports Monte Carlo successifs coûteux en temps, au profit d'un traitement statistique par **échantillonnage corrélé** (qui est une méthode de perturbation statistique n'introduisant pas de biais dans les résultats) des histoires de la simulation initiale. Et pour investiguer cette idée originale, le travail de thèse s'est déroulé en trois étapes.

Dans un premier temps, un travail de bibliographie m'a permis de me familiariser aux techniques de réduction de variance et à la théorie des perturbations et de l'échantillonnage corrélé. Ce travail, ajouté à l'étude du couplage des codes Monte Carlo évoluant, a débouché sur la mise en forme précise du **formalisme** à implémenter et est décrit dans la partie II de ce document. Plus particulièrement, je me suis intéressé au fonctionnement du code TRIPOLI-4 évoluant, qui est le code Monte Carlo évoluant développé au sein de mon laboratoire d'accueil² et dans lequel j'ai implémenté la méthode de perturbation. Ce code couple TRIPOLI-4 pour traiter le transport des neutrons et MENDEL pour traiter la transmutation isotopique. Ces deux codes sont également développés au CEA et des calculs utilisant l'ensemble TRIPOLI-4 évoluant ont d'ores et déjà été réalisés sur des configurations neutroniques REP (réacteurs à neutrons thermiques) et RNR (réacteurs à neutrons rapides) à des fins de validation et de qualification.

Comme la méthode proposée dans cette thèse pose des questions de modélisation, une **étude théorique** visant à déterminer précisément les **contraintes** et les **limites** d'application de cette méthode a été réalisée et est présentée en partie III. Celle-ci a permis de montrer que si les résultats issus d'un calcul perturbé ne sont pas dégradés en moyenne, il n'en va pas de même de leur variance. Celle-ci peut être fortement altérée lorsque l'amplitude des perturbations est trop importante, ce qui limite donc l'utilisation de l'échantillonnage corrélé. Toutefois, on montrera dans cette même partie que cette dégradation des résultats perturbés ne représente pas un frein à l'utilisation des échantillons corrélés en évolution, puisque l'amplitude maximale des perturbations acceptables reste **applicable aux études visées**. De plus, on verra que la connaissance précise des limitations de l'échantillonnage corrélé permettra par la suite d'améliorer le schéma de perturbation mis en place dans TRIPOLI-4 évoluant.

Enfin, la dernière étape a consisté à implémenter concrètement **l'algorithme de perturbation** dans le code de calcul TRIPOLI-4 évoluant. Ce développement logiciel spécifique s'appuie sur ROOT, le framework C++ produit par le CERN, et a abouti à la création de plusieurs bibliothèques. Ces dernières regroupent l'ensemble des fonctionnalités nécessaires à la mise en œuvre de la nouvelle fonctionnalité dans les scripts de couplage de TRIPOLI-4 évoluant. Afin de valider la méthode, on a considéré un cas test simple, une cellule de type REP, sur lequel ont été réalisés plusieurs tests permettant d'**optimiser la méthode** d'évolution par utilisation des perturbations (cf. partie IV, chapitre 8). Cette phase d'optimisation a été réalisée dans le cadre formel de la propagation des incertitudes grâce à la réalisation d'un grand nombre de simulations indépendantes. Cela a

2. Le Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe (LTSD) du Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (SERMA) du CEA Saclay.

alors permis de construire un **schéma de réduction de variance** (mis en œuvre au chapitre 8), qui a été utilisé dans une étude plus complète, celle d'un assemblage de type REP également, en début de cycle. On montrera que la méthode s'est montrée très efficace et a permis d'**accélérer de manière remarquable** le code d'évolution.

Références

- [1] J. CETNAR, J. WALLENUS ET W. GUDOWSKI, “MCB : a continuous energy Monte Carlo burnup simulation code”, *Proceedings of the Fifth Information Exchange Meeting on Actinide and Fission Product Partitioning and Transmutation*, (SCK-CEN, Mol), nov 1998
- [2] G. S. CHANG, “MCWO - Linking MCNP and ORIGEN2 for fuel burnup analysis”, *Proceedings of The Monte Carlo Method : Versatility Unbounded In A Dynamic Computing World*, (Chattanooga, Tennessee), avr 2005.
- [3] A. TALAMO, W. LI, J. CETNAR ET W. GUDOWSKI, “Comparison of MCB and MONTEBURNS Monte Carlo burnup codes on a one-pass deep burn”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 33, p. 1176-1188, 2006.
- [4] O. MÉPLAN, et AL., “MURE, MCNP Utility for Reactor Evolution : couples Monte-Carlo transport with fuel burnup calculations”, <http://www.oecd-neo.org/tools/abstract/detail/nea-1845>, Data Bank Computer Program Services, OECD Nuclear Energy Agency, 2009.
- [5] N. GARCIA-HERRANZ, O. CABELLOS et J. SANZ, “Applicability of the MCNP-ACAB system to inventory prediction in high-burnup fuels : sensitivity/uncertainty estimates”, *Proceedings of Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, (Palais des Papes, Avignon, France), sep 2005.

Deuxième partie

SIMULATION MONTE CARLO PERTURBÉE
EN ÉVOLUTION

Table des matières de la partie II

1	Simulation du transport des neutrons par la méthode Monte Carlo	11
1.1	Principe de la méthode Monte Carlo	12
1.1.1	Historique et principe général	12
1.1.2	Forme intégrô-différentielle de l'équation du transport	13
1.1.3	Simulation du transport des particules par la méthode Monte Carlo	14
1.2	Résolution de l'équation du transport	15
1.2.1	Résolution par simulation naturelle	16
1.2.2	Résolution par simulation non-analogue	17
1.2.3	Efficacité d'une technique de réduction de variance	18
1.3	Le code de transport TRIPOLI-4	18
1.3.1	Présentation du code	19
1.3.2	Les différents modes de simulation	19
1.3.3	Estimation du flux, des taux de réactions et du facteur de multiplication effectif	20
1.3.4	Les méthodes de réduction de variance	22
	Références	27
2	Les méthodes perturbatives des simulations Monte Carlo	29
2.1	Développement en séries de Taylor	29
2.2	La méthode des échantillons corrélés	30
2.2.1	Perturbation du noyau de transition	30
2.2.2	Application à la perturbation des concentrations isotopiques	31
2.2.3	Exemple	33
2.2.4	Intérêts et inconvénients de la méthode	33
	Références	36
3	Les codes de calcul Monte Carlo évoluant	37
3.1	Couplage des simulations Monte Carlo et des calculs d'évolution	37
3.2	Présentation de TRIPOLI-4 évoluant	38
3.2.1	Le solveur d'évolution MENDEL	38
3.2.2	Hypothèses physiques et modélisation de TRIPOLI-4 évoluant	40
3.2.3	Schémas temporels définis dans les scripts d'évolution	41
3.3	Estimation des erreurs systématiques et statistiques	43
3.3.1	Identification et correction des erreurs systématiques	43
3.3.2	Propagation des erreurs statistiques	43
	Références	45

4	Accélération des calculs en évolution avec l'échantillonnage corrélé	47
4.1	Présentation de l'algorithme	47
4.2	Couplage avec la plateforme d'évolution de TRIPOLI-4	47
4.2.1	Introduction d'une méthode perturbative dans les schémas d'évolution	47
4.2.2	Sélection de la méthode perturbative	48
4.3	Développement d'une librairie de post-traitement : TRIPOLI-4 ROOT-Tools	50
4.3.1	Présentation du projet	50
4.3.2	Architecture du projet	50
	Références	52

Simulation du transport des neutrons par la méthode Monte Carlo

Dans le domaine de la neutronique des cœurs de réacteurs, plusieurs méthodes sont employées pour résoudre l'équation du transport des neutrons (l'équation de Boltzmann linéaire). Elles se classent en deux catégories : les méthodes déterministes et les méthodes statistiques, dites Monte Carlo [Reus2003]. Les premières résolvent le problème en discrétisant l'espace des phases (théorie multigroupe, développement en série, méthode des éléments finis, ...) et, parfois, en réduisant la géométrie des problèmes à deux dimensions spatiales, simples ou extrudées (bien que la dernière génération de codes déterministes, dont APOLLO3 fait partie, gère les géométries 3D). Ces méthodes, souvent économes en temps de calcul, reposent donc sur des approximations à l'origine d'incertitudes sur les réponses neutroniques calculées. A contrario, les méthodes de type Monte Carlo ne font pratiquement aucune hypothèse de modélisation. Leur grand avantage est de résoudre des problèmes complexes avec un minimum d'approximations. Appliquées au transport des particules, les méthodes Monte Carlo simulent les interactions particule-matière et l'histoire des particules au plus près de leurs réalités physiques, tout en traitant rigoureusement des géométries complexes à trois dimensions. Comme ces méthodes sont des méthodes statistiques, le résultat du calcul est donné avec un intervalle de confiance qu'il est possible de diminuer arbitrairement en simulant plus de particules. Cette particularité leur confère un caractère de référence pour la validation des modèles et approximations des méthodes déterministes.

Le transport des neutrons par la méthode Monte Carlo étant au cœur du travail effectué, le premier chapitre est donc consacré à la présentation de cette méthode. En premier lieu, le formalisme théorique de la résolution de l'équation de Boltzmann sera présenté, ce qui permettra de comprendre comment cette résolution est effectuée au sein des codes Monte Carlo. Les principales techniques utilisées dans ces codes pour accélérer les simulations seront aussi examinées, et plus particulièrement celles implémentées dans le code mis à ma disposition pour la réalisation de ces travaux, TRIPOLI-4. Par la suite, cela aidera le lecteur à mieux comprendre la méthode des échantillons corrélés, ainsi que l'intégration de cette dernière dans les calculs en évolution¹.

Enfin, il est à noter que le transport des particules ne concerne ici que les neutrons, et aucune autre particule, car le cadre de ces travaux se restreint à l'évolution des concentrations isotopiques due à l'irradiation sous le flux neutronique (les autres réactions intervenant dans l'évolution des compositions et impliquant d'autres particules ne seront pas traitées ici). Le terme "particule" sera tout de même utilisé lorsqu'une généralisation aux autres particules pourra être faite.

1. Si le lecteur est déjà familiarisé avec les codes de transport Monte Carlo et leurs différentes techniques de réduction de variance et de perturbations, il pourra directement passer au chapitre 4.

1.1 Principe de la méthode Monte Carlo

1.1.1 Historique et principe général

La méthode Monte Carlo² est une méthode numérique visant à calculer des grandeurs à l'aide d'un modèle stochastique. Elle est particulièrement utilisée pour calculer des intégrales en dimensions plus grandes que 1 et est très prisée car elle nécessite peu, voire pas, d'approximations ou hypothèses de modélisation pour être mise en œuvre.

Cette méthode consiste à échantillonner un grand nombre de fois les variables aléatoires du problème traité et à estimer la valeur de grandeurs d'intérêt associées à ces variables à partir des échantillons produits. La distribution des résultats obtenus permet d'estimer la moyenne des grandeurs d'intérêt et d'affecter à ces estimations un intervalle de confiance. Cette caractéristique est obtenue grâce à l'application de la loi des grands nombres, qui stipule que si la taille des échantillons est suffisamment grande³ alors la moyenne empirique des résultats est un estimateur sans biais de l'espérance des grandeurs d'intérêt, et du théorème central-limite, qui prédit la forme de la distribution des résultats :

Loi des grands nombres

Soit $\{X_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, d'espérance μ . On pose : $\forall N \in \mathbb{N}$, $Y_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$. Alors la suite $\{Y_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ converge presque sûrement vers μ .

Théorème central-limite

Soit $\{X_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, d'espérance μ et de variable finie σ^2 . On pose : $\forall N \in \mathbb{N}$, $Y_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$ et $\forall N \in \mathbb{N}$, $Z_N = \frac{Y_N - \mu}{\sigma/\sqrt{N}}$. Alors la suite $\{Z_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ converge en loi vers la loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$.

Toutefois, la précision des résultats est inversement proportionnelle à la racine du nombre d'échantillons générés. Cette méthode converge donc lentement vers le bon résultat. On verra dans la suite de ce chapitre que, outre la qualité du générateur de nombres aléatoires permettant de produire les échantillons, le choix de la définition des lois de densité de probabilité est déterminant pour optimiser la méthode Monte Carlo. Et pour bien comprendre le principe de la méthode Monte Carlo, on présente un exemple d'application simple. L'application de cette méthode au transport de particules sera traitée ensuite.

Calcul de la superficie d'un lac

Le calcul de la superficie d'un lac fait partie des exemples classiques de vulgarisation de la méthode Monte Carlo. L'objectif de cet exemple est d'estimer la superficie d'un lac dont le contour est complexe. Pour cela, on définit un terrain rectangulaire (ou carré) incluant le lac et dont on connaît les dimensions (et donc la surface). Au sein de ce terrain, on détermine la position d'un grand nombre de points générés aléatoirement⁴. Le rapport du nombre de points échantillonnés dans le lac sur le nombre total de points est alors égal au rapport de la surface du lac sur celle du terrain rectangulaire. Cette relation permet alors d'estimer la superficie du lac. Et plus le nombre de points échantillonnés est grand, plus l'ensemble du terrain est couvert de points et plus la précision de l'estimation est forte.

Dans la suite de ce chapitre, on commencera par écrire dans un premier temps l'équation intégral-différentielle de Boltzmann et on montrera dans un second temps (à l'aide du formalisme de décomposition en série de Neumann) que cette équation peut être mise sous forme intégrale. Cette forme intégrale est très intuitive physiquement car elle fait intervenir des suites de transports et de collisions, ce qui formalise mathématiquement le principe très simple de la simulation Monte Carlo du transport des particules. Ceci sera vu à la fin de cette section.

2. Le nom de cette méthode fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte Carlo et a été inventé en 1947 par Nicholas Metropolis, puis publié pour la première fois en 1949 avec Stanislaw Ulam.

3. En pratique, on considère généralement que cela est vérifié lorsque cette taille est supérieure à 30.

4. En tirant un coup de canon à l'aveugle par exemple.

Remarque :

En réalité, il n'est pas nécessaire d'établir l'équation de Boltzmann pour comprendre, ni mettre en œuvre, la méthode Monte Carlo appliquée au transport des particules. Toutefois, cela permettra d'introduire les différents opérateurs liés au transport des particules et qui seront importants pour comprendre le fonctionnement des méthodes de réduction de variance, ainsi que l'échantillonnage corrélé (présenté dans le chapitre suivant).

1.1.2 Forme intégral-différentielle de l'équation du transport

Soit un volume élémentaire, noté \mathcal{D} , de l'espace des phases \mathcal{E} (à 6 dimensions) centré autour du point $P = (\vec{r}, \vec{v})$, où \vec{r} représente une position spatiale et \vec{v} une vitesse. On cherche à faire un bilan de la masse des neutrons présents dans \mathcal{D} ayant pour coordonnées spatiales \vec{r} et pour vecteur vitesse \vec{v} . Pour cela, on peut aussi écrire P en fonction de \vec{r} , de l'énergie E des neutrons et de leur direction de propagation $\vec{\Omega}$, car $\vec{v} = v(E) \vec{\Omega}$ et $v(E) = \sqrt{2E/m_n}$ (en $cm.s^{-1}$). Les caractéristiques du matériau occupant ce volume sont définies par les grandeurs suivantes :

- N le nombre d'isotopes présents dans le volume \mathcal{D} ,
- $N^i(\vec{r})$ la concentration de l'isotope i , $i \in \llbracket 1; N \rrbracket$ (en nombre d'atomes par $10^{-24} cm^3$),
- $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) dE d\vec{\Omega}$ la probabilité pour un neutron situé au point \vec{r} et ayant subi une collision à l'énergie E' dans la direction $\vec{\Omega}'$ d'en ressortir dans un intervalle d'énergie dE centré en E et dans un angle solide $d\vec{\Omega}$ autour de $\vec{\Omega}$,
- $\sigma_r^i(P)$ la section efficace microscopique de l'interaction r sur l'isotope i au point P (en b),
- $\Sigma_r^i(P)$ la section efficace macroscopique de l'interaction r sur l'isotope i (c-à-d $N^i(\vec{r}) \sigma_r^i(P)$, en cm^{-1}),
- $\Sigma_r(P)$ la section efficace macroscopique de l'interaction r du matériau (c-à-d $\sum_{i=1}^N \Sigma_r^i(P)$, en cm^{-1}).

Concernant les types d'interaction, on notera en particulier t l'interaction totale, a la somme des interactions d'absorption et s la somme des autres interaction. Et pour définir l'équation du transport des neutrons, on introduit les éléments suivants :

- $n(P, t)$ la densité de neutrons dans le volume \mathcal{D} à l'instant t (en $cm^{-3}.eV^{-1}.sr^{-1}$),
- $S(P)$ la densité de sources externes de particules imposée (en $cm^{-3}.s^{-1}.eV^{-1}.sr^{-1}$).

Un bilan de la masse totale des neutrons dans \mathcal{D} permet d'établir l'équation intégral-différentielle du transport des neutrons, dite équation de Boltzmann linéaire [Depi2000],

$$\begin{aligned} & \partial_t n(P, t) + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} n(P, t) + v(E) \Sigma_t(P) n(P) \\ &= \int_0^\infty \int_{4\pi} v(E') \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S(P). \end{aligned}$$

Cette équation correspond à une égalité entre les pertes neutroniques

1. $\partial_t n(P, t)$ les variations dues au temps,
2. $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} n(P, t)$ les fuites du volume élémentaire \mathcal{D} ,
3. $v(E) \Sigma_t(P) n(P)$ l'atténuation par interaction dans le volume \mathcal{D} ,

et les sources

1. $\int_0^\infty \int_{4\pi} v(E') \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE'$ les sources par choc non-absorbant dans le volume élémentaire \mathcal{D} ,
2. $S(P)$ les sources externes imposées⁶.

Mais on ne s'intéresse pas à la variation temporelle de la densité de neutrons : on supposera que la stationnarité a été atteinte et que les sources ne dépendent pas du temps. De plus, dans le domaine de la neutronique, la grandeur que l'on cherche à estimer n'est pas la densité neutronique mais le flux neutronique (en $cm^{-2}.s^{-1}.eV^{-1}.sr^{-1}$), aussi appelé flux angulaire ou flux en phase, qui est défini par

$$\phi(P) \equiv v(E) n(P). \quad (1.1)$$

5. Ceci n'est vrai qu'en cinématique classique, mais comme la propagation des neutrons ne se fera qu'à basse énergie (typiquement inférieure à 20 MeV), cette relation sera toujours respectée.

6. On se restreint pour l'instant à l'étude de problèmes stationnaires à sources externes imposées, car les problèmes en milieu multiplicateur peuvent être traités comme une succession de problèmes avec de telles sources.

On peut donc réécrire l'équation de Boltzmann pour le flux neutronique à l'état stationnaire :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \phi(P) + \Sigma_t(P) \phi(P) = \iint_{0}^{\infty} \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S(P). \quad (1.2)$$

On montre [Reus2003, Depi2000, Meti2006] que le flux recherché a pour expression

$$\begin{aligned} \phi(P) = & \int_0^{\infty} e^{-\int_0^s \Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega}, E) ds'} \iint_{0}^{\infty} \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}-s\vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' ds \\ & \dots + \int_0^{\infty} e^{-\int_0^s \Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega}, E) ds'} S(\vec{r}-s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) ds. \end{aligned}$$

En vue de simplifier l'expression précédente, on introduit une autre quantité très utilisée en neutronique : la densité de collision entrante au point P , définie par

$$\psi(P) \equiv \Sigma_t(P) \phi(P), \quad (1.3)$$

ainsi que les opérateurs suivants :

1. $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})$ l'opérateur de transport (avec $\vec{r}' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$), de noyau : $\Sigma_t(P) e^{-\int_0^s \Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) ds'}$,
2. $C(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ l'opérateur de collision, de noyau : $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) / \Sigma_t(P)$,
3. $K(P' \rightarrow P) = TC(P' \rightarrow P)$ l'opérateur de transition des particules de P' ($\vec{r}', E', \vec{\Omega}'$) vers P ($\vec{r}, E, \vec{\Omega}$),

ce qui permet d'écrire l'équation du transport des neutrons sous une forme plus compacte :

$$\psi(P) = \int_{\mathcal{E}} K(P' \rightarrow P) \psi(P') dP' + \int_{\mathcal{E}} T(P' \rightarrow P) S(P') dP'. \quad (1.4)$$

Il s'agit d'une équation intégrale de Fredholm non-homogène du second type [Abra1972, Dejo1982].

1.1.3 Simulation du transport des particules par la méthode Monte Carlo

Considérons un milieu quelconque, noté (\mathcal{M}_0) . Par soucis de clarté, toutes les grandeurs associées à un milieu indexé par un entier i seront elles-mêmes indexées par cet entier. Ainsi, avec cette notation, K_0 , T_0 et C_0 représentent les opérateurs de transition, de transport et de collision associés au milieu (\mathcal{M}_0) . La propagation des neutrons dans ce milieu est décrite par une équation intégrale de Fredholm :

$$\psi(P) = \int_{\mathcal{E}_0} K_0(P' \rightarrow P) \psi(P') dP' + \int_{\mathcal{E}_0} T_0(P' \rightarrow P) S_0(P') dP'. \quad (1.5)$$

On définit la réponse⁷ moyenne \bar{R}_0 recherchée, caractérisée par une fonction détecteur g et produite par ψ , solution de (1.5), par

$$\bar{R}_0 \equiv \int_{\mathcal{E}_0} g(P) \psi(P) dP = \langle \psi, g \rangle_0. \quad (1.6)$$

Le problème initial, direct, s'écrit alors

$$(\mathcal{P}_0) \begin{cases} \psi = \langle K_0, \psi \rangle_0 + \langle T_0, S_0 \rangle_0 \\ \bar{R}_0 = \langle \psi, g \rangle_0 \end{cases}.$$

On suppose que le milieu (\mathcal{M}_0) est sous-critique (c'est-à-dire que le rayon spectral est inférieur à 1, soit : $\|K_0\| < 1$), ainsi la théorie des équations intégrales prouve que ψ , solution de l'équation (1.5), existe, est unique et est développable en série de Neumann [Meti2006, Span1969] :

$$\psi(P) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(P), \quad (1.7)$$

7. Aussi appelée score.

avec

$$\begin{aligned} \psi_0(P) &= \int_{\mathcal{E}_0} T_0(P' \rightarrow P) S_0(P') dP' = \langle T_0, S_0 \rangle_0(P), \\ \forall n \in \mathbb{N}^*, \psi_n(P) &= \int_{\mathcal{E}_0} K_0(P' \rightarrow P) \psi_{n-1}(P') dP' = \langle K_0, \psi_{n-1} \rangle_0(P), \end{aligned}$$

ce qui donne, par itération successive

$$\forall n \in \mathbb{N}, \psi_n = \langle K_0^n T_0, S_0 \rangle_0. \quad (1.8)$$

On note $\overline{I}_0^n = \langle \psi_n, g \rangle_0$ la contribution de ψ_n au score. On peut montrer [Dejo1982] que la série de terme général \overline{I}_0^n converge uniformément vers la réponse \overline{R}_0 .

Le développement en série de Neumann de ψ permet de formaliser la résolution de l'équation du transport des neutrons (Eq. 1.2) et peut être directement interprété en terme d'algorithme Monte Carlo, algorithme qui permet de résoudre numériquement cette équation. En effet, pour tout $n \in \mathbb{N}$, ψ_n peut être interprété comme la contribution à ψ des particules issues de la source S et ayant subi n collisions pour arriver au point P . De ce fait, la reconstruction de l'intégralité des événements qui constituent l'histoire de la propagation des particules permet de calculer numériquement la réponse recherchée. Ce principe est à la base des méthodes Monte Carlo appliquées au transport des particules. En pratique, cela consiste à [Reus2003, Depi2000, Dejo1982, Rief1984] :

- associer à chaque particule une suite d'évènements $\{\mathbf{z}_0, \dots, \mathbf{z}_n, \dots\}$, notée γ et appelée trace,
- définir les règles de transitions ($\mathbf{z}_n \rightarrow \mathbf{z}_{n+1}$), c'est-à-dire les processus statistiques que suivent les particules (l'ensemble de ces règles étant appelé jeu),
- définir une fonction Γ telle que l'espérance mathématique de $\Gamma(\gamma)$ soit la réponse recherchée :
 $E[\Gamma(\gamma)] = \overline{R}$ (Γ étant alors appelé estimateur sans biais de la réponse \overline{R}).

Et pour calculer l'espérance mathématique de $\Gamma(\gamma)$, on simule le jeu N fois de manière indépendante, chaque simulation étant appelée cycle. L'ensemble des résultats moyens des N cycles permet d'obtenir, grâce à l'application du théorème central-limite, une valeur moyenne du score recherché associé à un intervalle de confiance. De plus, les règles du jeu, qui définissent les transitions entre chaque événement, peuvent être choisies de façon à simuler la réalité des processus mis en jeu lors du transport des particules, on parle alors de simulation naturelle ou analogue, ou bien de façon à minimiser la variance qui caractérise l'intervalle de confiance sur le résultat, on parle alors de simulation biaisée ou non-analogue.

Dans une simulation Monte Carlo, la vie d'un neutron, de son émission jusqu'à sa disparition, est une suite d'évènements aléatoires, alternativement de type transport et de type collision (avec un noyau d'atome), tel que cela est résumé sur la figure 1.1. Ce processus est dit markovien car chaque événement qui se produit ne dépend que de l'état présent du neutron, c'est-à-dire de sa position dans l'espace des phases, et pas de son histoire. Concrètement, pour simuler un neutron, on commence par tirer aléatoirement son lieu de naissance (dans l'espace des phases) selon une distribution de sources spécifiée par l'utilisateur. Ensuite, la distance que le neutron va parcourir avant d'effectuer une collision est échantillonnée et, si celui-ci se trouve toujours au sein de la géométrie après son déplacement, on traite la collision. Les lois d'échantillonnage de ces deux processus (de transport et de collision) correspondent aux noyaux des opérateurs de transport et de collision définis précédemment (voir 1.1.2) et sont construites durant la simulation à partir des caractéristiques de la géométrie et des données nucléaires fournies par l'utilisateur. Tant que le neutron n'est pas arrêté suite à une collision ou n'a pas fui hors du système, on itère successivement entre les phases de transport et de collision.

1.2 Résolution de l'équation du transport

Pour la suite, on introduit les notations suivantes :

- $k_0(P) = \int_{\mathcal{E}_0} K_0(P \rightarrow P') dP'$ le nombre moyen de particules suite à une collision en P ,
- $p_0(P \rightarrow P') dP' = \frac{K_0(P \rightarrow P')}{k_0(P)} dP'$ la probabilité qu'une particule diffusée en P aille jusqu'au point P' et y fasse une collision, à dP' près.

Ainsi, pour tous points P et P' de l'espace des phases \mathcal{E} , $K_0(P \rightarrow P')$ est réécrit comme la probabilité pour une particule située au point P de subir une collision, d'émettre $k_0(P)$ particules d'énergie E' dans la direction $\vec{\Omega}'$ et de se propager jusqu'au point P' .

On montre maintenant que la résolution du problème (\mathcal{P}_0) selon la méthode Monte Carlo peut être effectuée soit avec les lois de probabilités naturelles ($T_0, C_0, K_0, p_0, \dots$), soit avec des lois non-naturelles préalablement

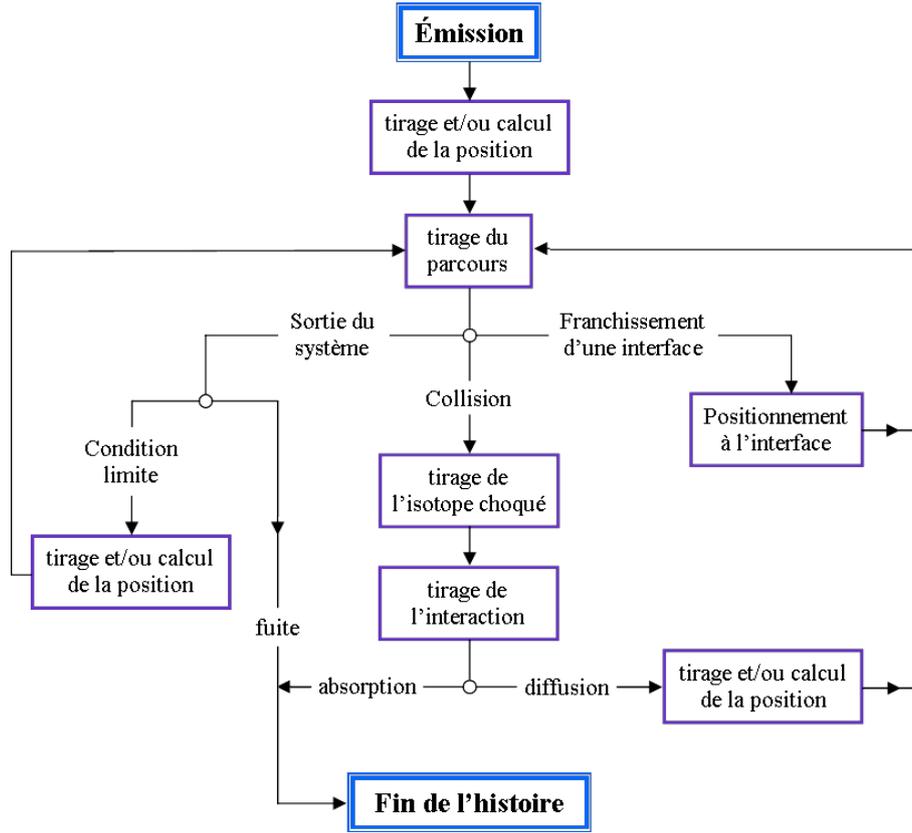


FIGURE 1.1 : Algorithme de principe d'une simulation Monte Carlo de l'histoire d'un neutron. Entre sa naissance et sa mort (par fuite ou par absorption), le neutron est simulé par une succession de phases de transport (mouvement dans la matière) et de collision (interaction dans la matière).

définie par l'utilisateur (T_0^* , C_0^* , K_0^* , p_0^* , ...). Pour cela, il sera nécessaire de définir un estimateur sans biais de la réponse \bar{R} et d'introduire la notion de poids des particules. Enfin, on définira un outil pour mesurer les performances des différentes simulations.

1.2.1 Résolution par simulation naturelle

Considérons une suite d'évènements $\gamma = \{\mathbf{z}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ telle que \mathbf{z}_0 soit un évènement issu de la densité de probabilité S_0 , \mathbf{z}_1 soit un évènement issu de la densité de probabilité $T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \cdot)$ et $\forall n > 1$, \mathbf{z}_n soit un évènement issu de la densité de probabilité $p_0(\mathbf{z}_{n-1} \rightarrow \cdot)$. La trace γ a donc une probabilité d'apparition :

$$dp_0(\gamma) = S_0(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \prod_{i=1}^{\infty} p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) d\mathbf{z}_{i+1},$$

avec une probabilité d'apparition jusqu'à la $n^{\text{ième}}$ collision de la trace γ donnée par

$$\begin{cases} dp_0^0(\gamma) &= S_0(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \\ \forall n \in \mathbb{N}^*, dp_0^n(\gamma) &= S_0(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \prod_{i=1}^n p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) d\mathbf{z}_{i+1} \end{cases} \quad (1.9)$$

On définit alors une suite d'estimateurs $\{i_0^n(\gamma)\}_{n \in \mathbb{N}}$ par

$$i_0^0(\gamma) = g(\mathbf{z}_1) \text{ et } \forall n \in \mathbb{N}^*, i_0^n(\gamma) = g(\mathbf{z}_{n+1}) \prod_{i=1}^n k_0(\mathbf{z}_i). \quad (1.10)$$

La quantité $i_0^n(\gamma)$ est appelée encaissement relatif au $n^{\text{ième}}$ choc de la trace γ et on peut démontrer que son espérance est égale à \bar{T}_0^n (voir Annexe A). On a ainsi construit tous les éléments nécessaires à l'estimation de

\overline{R}_0 à partir d'une simulation d'un nombre suffisamment grand de particules :

$$\overline{R}_0 = \langle \psi, g \rangle_0 = \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n, g \right\rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \overline{T}_0^n = \sum_{n=0}^{\infty} E_{\mathcal{E}_0} [i_0^n].$$

Tous les outils nécessaires à la résolution du problème (\mathcal{P}_0) à partir des lois de probabilité naturelles ont donc été définis.

1.2.2 Résolution par simulation non-analogue

Comme on vient de le voir, la méthode Monte Carlo permet de simuler des chaînes d'évènements suivant leurs lois naturelles. Or, la simulation de la "réalité microscopique" d'un très grand nombre de particules sollicite en revanche d'importantes ressources matérielles. Par exemple, dans les calculs de radioprotection, où l'on s'intéresse souvent à des situations à forte atténuation du flux de particules, un grand nombre d'évènements doit être simulé afin que quelques-uns puissent contribuer à la mesure. Dans ce cas, les erreurs statistiques sont relativement élevées et les temps de calcul relativement longs.

Pour ne pas renoncer à l'utilisation de cette méthode, on introduit au sein de la simulation une ou des techniques dites de biaisage, aussi appelées techniques de réduction de la variance [Peti2009], visant à accélérer la simulation⁸. Le principe consiste à modifier les lois de probabilités, en favorisant les évènements d'intérêt et en affectant lors de chaque évènement une valeur numérique au neutron appelée poids. Le but étant de donner un poids aux particules qui soit proportionnel à la probabilité de leur contribution au résultat recherché. Dans TRIPOLI-4 le poids peut être modifié par différentes techniques, telles que la roulette russe, le splitting et la capture implicite. La roulette russe consiste à tuer aléatoirement les particules qui ont un poids trop faible, contrairement au splitting qui fractionne les particules de poids trop fort ; et la capture implicite permet, par un changement de poids, de ne pas traiter les absorptions. Ces différentes actions préservent la moyenne des scores de la simulations analogue mais permettent de diminuer la variance obtenue à partir d'un même nombre de particules simulées. On parle alors de simulations non-analogues.

Afin de généraliser le formalisme Monte Carlo aux simulations non-analogues, on note S_0^* , T_0^* et C_0^* les densités de probabilité non-analogues qui remplacent les lois naturelles S_0 , T_0 et C_0 . Toutes les grandeurs définies à partir de ces lois auront la même notation (K_0^* , p_0^* , ...). Une trace $\gamma = \{\mathbf{z}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ apparaît alors avec la probabilité

$$dp_0^*(\gamma) = S_0^*(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \prod_{i=1}^{\infty} p_0^*(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) d\mathbf{z}_{i+1}.$$

On définit la suite d'estimateurs $\{i_0^{n*}(\gamma)\}_{n \in \mathbb{N}}$ par

$$\begin{cases} i_0^{0*}(\gamma) &= g(\mathbf{z}_1) \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \frac{T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}, \\ \forall n \in \mathbb{N}^*, i_0^{n*}(\gamma) &= g(\mathbf{z}_{n+1}) \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \frac{T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{p_0^*(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} k_0(\mathbf{z}_i). \end{cases} \quad (1.11)$$

On démontre que l'espérance de l'encaissement relatif $i_0^{n*}(\gamma)$ est égal à \overline{T}_0^n (voir l'Annexe A). Pour la suite, il est nécessaire d'introduire les notations suivantes :

- $\omega_0^n(\gamma) = \prod_{i=1}^n k_0(\mathbf{z}_i)$ le poids naturel de la particule avant son $n^{\text{ième}}$ choc (avec $\omega_0^0(\gamma) = 1$),
- $c_0^0(\gamma) = \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \frac{T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}$ la correction de poids due à la variation de la source,
- $c_0^n(\gamma) = c_0^{n-1}(\gamma) \frac{p_0(\mathbf{z}_n \rightarrow \mathbf{z}_{n+1})}{p_0^*(\mathbf{z}_n \rightarrow \mathbf{z}_{n+1})}$ la correction de poids cumulé au $n^{\text{ième}}$ choc,
- $\omega_0^{n*}(\gamma) = c_0^n(\gamma) \omega_0^n(\gamma)$ le poids corrigé de la particule à son $n^{\text{ième}}$ choc.

Les encaissements relatifs, analogue et non-analogue, s'écrivent donc

$$\forall n \in \mathbb{N}, \begin{cases} i_0^n(\gamma) &= \omega_0^n(\gamma) g(\mathbf{z}_{n+1}) \\ i_0^{n*}(\gamma) &= \omega_0^{n*}(\gamma) g(\mathbf{z}_{n+1}) \end{cases}. \quad (1.12)$$

⁸. L'accélération n'étant pas forcément obtenue par une diminution du temps de simulation moyen des particules, mais par une diminution de la variance des scores obtenues par l'ensemble de la simulation, quitte à augmenter, mais de façon plus restreinte, le temps moyen de simulation des particules. On parle donc d'accélération des simulations lorsque, pour un même temps de calcul, l'erreur statistique des résultats est améliorée.

Avec le nouvel estimateur i_0^{n*} , il est possible comme précédemment d'estimer \bar{R}_0 , mais avec des densités de probabilité S_0^* , T_0^* et C_0^* arbitraires. On peut alors montrer qu'en choisissant correctement S_0^* , T_0^* et C_0^* , il est possible d'obtenir un jeu à variance nulle [Span1969, Lux1991]. Mais ce cas idéal n'est que théorique car il suppose que ψ est connue, c'est-à-dire que le problème est déjà résolu. Néanmoins, lorsque cela est possible, l'utilisateur du code Monte Carlo peut utiliser des formes effectives de densité de probabilités non-analogues (par exemple issues d'un pré-calcul à l'aide d'un code déterministe [Span1969, Lux1991]) et obtenir ainsi d'important gain en terme de réduction de variance.

Par contre, pour définir les poids des particules corrigés, il convient d'imposer les conditions suivantes :

$$\forall P \in \mathcal{E}_0, \begin{cases} S_0^*(P) = 0 & \Rightarrow S_0(P) = 0 \\ \forall P' \in \mathcal{E}_0, T_0^*(P \rightarrow P') = 0 & \Rightarrow T_0(P \rightarrow P') = 0 \\ \forall P' \in \mathcal{E}_0, p_0^*(P \rightarrow P') = 0 & \Rightarrow p_0(P \rightarrow P') = 0 \end{cases} . \quad (1.13)$$

Ce système d'équations traduit le simple fait que tous les événements d'intérêt de la simulation analogue doivent être pris en compte dans la simulation non-analogue. On peut favoriser, ou défavoriser, l'apparition de certains événements, mais s'ils disparaissent on prend le risque de perdre leurs contributions au score. Par exemple, si l'on résume les événements de la simulation analogue en les considérant soit comme des captures, soit comme des diffusions, il est possible d'éliminer les premiers de la simulation car ils ne contribuent pas au calcul⁹. Par contre, on comprend aisément qu'il n'est pas possible de faire l'inverse, car s'il n'y avait plus de diffusions, tous les neutrons seraient absorbés à leur première collision et aucune correction de poids ne serait suffisante pour estimer correctement la réponse \bar{R} . Pour ne pas introduire de biais dans les calculs¹⁰, il faut donc respecter les conditions 1.13.

1.2.3 Efficacité d'une technique de réduction de variance

Pour quantifier l'efficacité d'une technique de réduction de variance, il faut tenir compte de deux grandeurs : d'une part, la variance obtenue sur le résultat R , notée $\sigma^2[R]$, et d'autre part le temps de la simulation T . Or, l'erreur statistique, c'est-à-dire $\sigma[R]$, varie en $\frac{1}{\sqrt{n}}$, où n est le nombre de particules simulées, tandis que, pour n suffisamment grand, le temps de calcul, T , est proportionnel à n . Ainsi le produit $\sigma^2[R]T$ ne dépend pas du nombre de particules simulées et peut permettre de comparer différentes simulations pour lesquelles ce nombre de particules est variable. La quantification de l'intérêt d'une méthode de réduction de variance, et plus généralement de la qualité d'une simulation Monte Carlo, se fait en mesurant la figure de mérite (en anglais "Figure Of Merit" ou FOM), qui est définie par

$$FOM[R] = \frac{1}{\sigma^2[R]T}. \quad (1.14)$$

Ainsi, plus la convergence des scores est atteinte rapidement, plus la FOM sera forte. La mesure de ce facteur, qui ne dépend pas du nombre de tirages, permet donc de quantifier les performances d'une simulation Monte Carlo. Lorsqu'une nouvelle méthode est introduite au sein d'un code Monte Carlo, ou lorsqu'un paramètre de l'une d'entre-elles change, les gains obtenus sont mesurables en comparant la FOM à celle d'un calcul sans la méthode ou sans la modification du paramètre (que l'on nommera calcul de référence). Le gain est alors défini par

$$Gain[R] = \frac{FOM[R]}{FOM_{ref}[R]} = \frac{\sigma_{ref}^2[R]T_{ref}}{\sigma^2[R]T}. \quad (1.15)$$

1.3 Le code de transport TRIPOLI-4

Maintenant que le fonctionnement général d'un code de transport Monte Carlo a été décrit, la fin de ce chapitre sera consacrée au code Monte Carlo utilisé dans ces travaux : TRIPOLI-4. Après une rapide description du code, quelques estimateurs et techniques de réduction de variance disponible dans TRIPOLI-4 seront présentés. Cela permettra au lecteur de mieux comprendre les notions abordées précédemment.

9. Cette technique est une méthode de réduction de variance, qui est appelée "capture implicite" et que l'on présentera dans la dernière partie de ce chapitre.

10. Les lois de probabilité non-analogues sont parfois appelées "densités de probabilité biaisées", mais cela est trompeur. Elles ne reflètent pas le comportement naturel des particules, mais elles n'introduisent aucun biais. Les techniques dites de biaisage, ou plutôt de réduction de variance, sont faites pour diminuer la variance sur le résultat sans introduire de biais dans le calcul.

1.3.1 Présentation du code

Développé au sein du LTSD¹¹, TRIPOLI-4 est un code Monte Carlo de transport de particules [Peti2009, Diop2007, Dumo2007, Brun2009]. Il est utilisé pour la simulation du transport des neutrons, des photons, des électrons et des positrons, dans des géométries à 3 dimensions avec un traitement continu de l'énergie. Développé depuis les années 60-70, la famille de codes TRIPOLI est exploitée dans de nombreux domaines du nucléaire et couvre à la fois les applications de radioprotection et de criticité. Ce code est développé dans les langages C, C++ et fortran et se manipule à travers des scripts écrits dans un langage interne. Au sein de ces scripts, la quasi-totalité du jeu de données est définie (géométrie, compositions, sources, techniques de réduction de variance, nombre de particules, ...), le reste étant transmis par des options en ligne de commande. L'ensemble de ses fonctionnalités reposent sur 6 bibliothèques.

La bibliothèque de géométrie

La bibliothèque de géométrie, écrite en C, permet à l'utilisateur de définir le système dans lequel la simulation aura lieu. Cette géométrie peut être définie soit par une combinaison de volumes (on parle alors de géométrie combinatoire), soit par des intersections de surfaces (on parle alors de géométrie surfacique). Plusieurs opérateurs (union, intersection, ...) sont alors disponibles afin de représenter les géométries complexes et/ou sous forme de réseaux dans les scripts de lancement TRIPOLI-4. Les volumes ainsi obtenus sont considérés comme homogènes et isothermes. Mais depuis 2005, TRIPOLI-4 peut être connecté à la bibliothèque de géométrie du framework ROOT¹²[Antc2009, Brun1997], ce qui rend possible l'externalisation de la définition de la géométrie. Celle-ci peut alors être écrite en C++ et exportée dans un fichier au format ROOT que TRIPOLI-4 utilisera durant la simulation.

La bibliothèque de représentation des sections efficaces

Une des plus importantes parties de TRIPOLI-4 concerne la lecture des sections efficaces. Cette partie provient de routines fortran NJOY et permet d'exploiter trois types de représentation des sections efficaces : les sections ponctuelles (produites par NJOY), les sections multigroupes auto-protégées et homogénéisées (produites par APOLLO2 ou par TRIPOLI-4 lui-même) et les sections multigroupes avec tables de probabilité. Lors du traitement de ces données durant les simulations, TRIPOLI-4 tient compte de l'énergie incidente, de l'anisotropie et des transferts d'énergie.

Les bibliothèques de gestion de la mémoire et du parallélisme

Afin d'exploiter au mieux les ressources matérielles disponibles, trois bibliothèques ont été développées en C++. Elles permettent d'optimiser l'utilisation de la mémoire, d'implémenter le parallélisme de la simulation des particules et de gérer les communications entre les différents processus.

La bibliothèque de simulation

Cette dernière partie du code, écrite en C++, est centrale car elle manipule toutes les autres pour réaliser la simulation. Elle est pilotée par un fichier d'entrée contenant des directives définissant les caractéristiques de la simulation à réaliser. Ainsi, l'utilisateur indique dans ce fichier le système dans lequel la simulation aura lieu, mais il peut aussi y préciser les distributions de particules sources de son choix, la ou les techniques de réduction de variance à employer et les scores qu'il veut obtenir [Brun2009]. Et concernant cette dernière partie, les grandeurs physiques qui peuvent être estimées par TRIPOLI-4 sont nombreuses (flux de particules, facteur de multiplication effectif, courant surfacique, taux de réactions, dépôt d'énergie, énergie de recul, ...).

Pour plus d'informations sur le code, le lecteur se reportera aux références [Diop2007, Dumo2007, Brun2009].

1.3.2 Les différents modes de simulation

Au début de ce chapitre, la densité de sources de particules (S) était imposée par l'utilisateur, donc parfaitement connue. Mais il peut aussi arriver que la propagation des neutrons soit simulée dans un milieu multiplicateur où cette distribution n'est pas connue de l'utilisateur. Pour cela, TRIPOLI-4 dispose d'un mode particulier du

11. Laboratoire du Transport Stochastique et Déterministe, CEA Saclay/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

12. ROOT est un ensemble de bibliothèques écrites en C++, créé en 1994 par le CERN et publié sous licence LGPL. C'est un environnement de travail orienté objet avec toutes les fonctionnalités nécessaires pour supporter et analyser de grandes quantités de données le plus efficacement possible.

transport, appelé “criticalité”, où la production de neutrons est propagée d’un cycle à l’autre. Dans ce type de simulation, lorsqu’un neutron effectue une fission et produit d’autres neutrons, au lieu de multiplier son poids par le nombre moyen de neutrons induits par la réaction, noté $\bar{\nu}$, le code génère d’autres neutrons à la même position que la particule incidente, mais avec des caractéristiques cinématiques échantillonnées selon les lois du noyau de fission. Le nombre de neutrons en sortie de réaction est alors échantillonné selon une distribution donnée de telle sorte qu’il soit en moyenne égal au nombre moyen de neutrons émis par la réaction. En général, comme le nombre de neutrons simulés est bien moindre que dans la réalité¹³, on souhaite éviter de simuler un grand nombre de neutrons à partir d’un faible nombre de lieux de fission. On préfère alors utiliser une distribution plus centrée autour de la valeur moyenne que la distribution naturelle et ainsi mieux répartir les neutrons sur les différents sites de fission. Par exemple, dans TRIPOLI-4, on échantillonne soit $E_{\bar{\nu}}^{inf}$ avec la probabilité $E_{\bar{\nu}}^{sup} - \bar{\nu}$, soit $E_{\bar{\nu}}^{sup}$ avec la probabilité $\bar{\nu} - E_{\bar{\nu}}^{inf}$, où $E_{\bar{\nu}}^{inf}$ et $E_{\bar{\nu}}^{sup}$ sont respectivement les entiers inférieur et supérieur les plus proches de $\bar{\nu}$. Mais ces neutrons ne sont pas propagés dans le cycle où ils apparaissent, ils sont transmis au cycle suivant pour y être utilisés comme source. Et pour initialiser ce mode de transport, le premier cycle utilise une distribution définie par l’utilisateur. Ainsi, à chaque cycle, une nouvelle “génération” de neutrons est propagée, dont la distribution converge plus ou moins rapidement vers la distribution de source du système. Il existe donc deux modes de simulation du transport des neutrons en Monte Carlo. Dans le mode “criticalité”, la distribution de sources de particules fait partie du problème à résoudre, tandis que dans le mode appelé “protection”, les sources sont à chaque cycle échantillonnées selon une distribution définie préalablement.

Le mode de simulation “protection” est appelé ainsi car il est le plus souvent utilisé pour estimer la réponse d’un détecteur très éloigné des sources et séparé de celles-ci par de fortes protections. Par exemple, il est utilisé pour connaître l’irradiation autour d’un cœur de réacteur où l’atténuation du flux de particules entre le combustible et les zones d’intérêt est de plusieurs décades. Dans ces cas de figure, comme un très faible nombre de particules atteignent le détecteur, la plupart des particules sont simulées sans jamais contribuer aux scores. Mais différentes techniques de réduction de variance sont utilisables pour “pousser” les particules en direction du détecteur. Celles-ci se retrouvent alors rapidement très éloignées des sources et se propagent dans des milieux non-multiplicateurs. Ces techniques de réduction de variance sont alors exclusivement dédiées au mode protection, car en criticalité elles sont incompatibles avec la création des sources d’un cycle à l’autre. En règle générale, toutes les techniques de réduction de variance sont associées à un mode de simulation particulier.

1.3.3 Estimation du flux, des taux de réactions et du facteur de multiplication effectif

D’après le début de ce chapitre, chaque réponse \bar{R} est mesurée par la méthode Monte Carlo à partir de sa fonction détecteur, notée g , et de l’estimation de la densité de collision (voir Eq. 1.6). Or, dans TRIPOLI-4, comme dans la plupart des codes de transport Monte Carlo, la grandeur de base à partir de laquelle les réponses sont estimées est le flux neutronique. On décompose alors la fonction détecteur selon $g = g_{\psi \rightarrow \phi} \cdot g_{\phi \rightarrow R}$, telle que $g_{\psi \rightarrow \phi}$ soit une fonction détecteur du flux neutronique et $g_{\phi \rightarrow R}$ soit la fonction détecteur de la réponse \bar{R} basée sur l’estimation du flux. En général, les codes Monte Carlo disposent de plusieurs estimateurs du flux, tandis que les réponses ne sont associées qu’à une seule réponse détecteur. Pour bien comprendre l’ensemble des paramètres des simulations réalisées dans les parties III et IV, les deux principaux estimateurs du flux définis dans TRIPOLI-4, ainsi que fonction détecteur des taux de réactions et du facteur de multiplication effectif, sont décrits dans cette section.

1.3.3.1 Estimateurs du flux

Estimateur corde

La distance moyenne parcourue par les neutrons peut être estimée en simulant un grand nombre de particules N_{γ} par

$$\langle l \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_{\mathcal{E}} [l^n(\cdot) \omega_+^n(\cdot)] = \lim_{N_{\gamma} \rightarrow \infty} \frac{1}{N_{\gamma}} \sum_{\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} l^n(\gamma) \omega_+^n(\gamma),$$

où

- N_{γ} est le nombre de particules simulées,

¹³. Il y a plusieurs décades de différence.

- $\omega_+^n(\gamma)$ est le poids de la particule de trace γ après sa $n^{\text{ième}}$ collision¹⁴,
- $l^n(\gamma)$ est la distance parcourue par la particule de trace γ entre sa $n^{\text{ième}}$ et sa $(n+1)^{\text{ième}}$ collision,
- $l^n(\cdot)\omega_+^n(\cdot)$ est un estimateur de la distance moyenne parcourue après la $n^{\text{ième}}$ collision.

Or, pendant un intervalle de temps δt , une particule ayant une vitesse v parcourt la distance $v\delta t$. La distance moyenne parcourue par unité de temps vaut donc

$$\langle l \rangle = \int_{\mathcal{E}} n(P) v(E) dP = \int_{\mathcal{E}} \phi(P) dP.$$

Cela permet d'établir le premier estimateur du flux au $n^{\text{ième}}$ choc d'une particule de trace γ , appelé estimateur "corde" et noté ϕ_{corde}^n , par

$$\phi_{\text{corde}}^n(\gamma) = l^n(\gamma) \omega_+^n(\gamma). \quad (1.16)$$

Estimateur collision

D'après la définition de la densité de collision entrante (1.3), le flux peut s'écrire comme :

$$\phi(P) \equiv \frac{1}{\Sigma_t(P)} \psi(P).$$

On en déduit que $g_\phi = \frac{1}{\Sigma_t}$ est une fonction détecteur du flux. On définit alors l'encaissement relatif du flux neutronique au $n^{\text{ième}}$ choc, appelé estimateur "collision" et noté $\phi_{\text{collision}}^n$, par

$$\phi_{\text{collision}}^n(\gamma) \equiv \frac{\omega^n(\gamma)}{\Sigma_t(\mathbf{z}_n)}. \quad (1.17)$$

1.3.3.2 Évaluation des taux de réactions

Par définition, le taux de réaction de l'interaction r est défini par

$$\forall P \in \mathcal{E}, \tau_r(P) \equiv \Sigma_r(P) \phi(P).$$

On en déduit que $g_{\tau_r} = \Sigma_r \times g_\phi$ est une fonction détecteur du taux de réaction τ_r . On définit alors l'encaissement relatif de ce taux de réaction au $n^{\text{ième}}$ choc soit avec l'estimateur corde du flux :

$$\tau_r^n(\gamma) = \Sigma_r(\mathbf{z}_n^+) l^n(\gamma) \omega_+^n(\gamma), \quad (1.18)$$

avec \mathbf{z}_n^+ l'état du neutron après sa $n^{\text{ième}}$ collision (c'est-à-dire : $\mathbf{z}_n^+ = (x_n, E_n^+, \vec{\Omega}_n^+) = (x_n, E_{n+1}, \vec{\Omega}_{n+1})$), soit avec l'estimateur collision du flux :

$$\tau_r^n(\gamma) = \frac{\Sigma_r(\mathbf{z}_n)}{\Sigma_t(\mathbf{z}_n)} \omega^n(\gamma). \quad (1.19)$$

1.3.3.3 Le facteur de multiplication effectif

Estimation du facteur de multiplication effectif pas par pas

Lors d'une simulation en criticité il est facile de suivre la taille de la population des neutrons et d'estimer le facteur de multiplication effectif, noté k_{eff} . Pour cela, on note \mathcal{N}_g la taille des sources du $g^{\text{ième}}$ cycle, c'est-à-dire la somme des poids des neutrons sources, et on estime le facteur de multiplication effectif au $g^{\text{ième}}$ cycle, noté $k_{\text{eff},g}^{\text{step}}$, par

$$\mathcal{N}_{g+1} = k_{\text{eff},g}^{\text{step}} \mathcal{N}_g.$$

On définit alors l'estimateur, dit "step", du facteur de multiplication effectif qui encaisse au $n^{\text{ième}}$ choc, si celle-ci est une fission, la quantité suivante :

$$k_{\text{eff}}^{\text{step},n}(\gamma) = \frac{\nu_{i_n} \omega_+^n(\gamma)}{\omega_+^0(\gamma)}, \quad (1.20)$$

où

14. Si durant la simulation aucune technique de réduction de variance n'est utilisée entre deux lieux de collision, alors le poids des particules ne change pas, c'est-à-dire que $\omega_+^{n-1}(\gamma) = \omega^n(\gamma)$

- i_n est l'index de l'isotope choqué lors de la $n^{i\grave{e}me}$ collision de la particule de trace γ ,
- ν_{i_n} est le nombre de neutrons échantillonnés suite à la fission de la $n^{i\grave{e}me}$ collision sur l'isotope i_n ,
- $\omega_+^n(\gamma)$ est le poids du neutron après sa $n^{i\grave{e}me}$ collision,
- $\omega_+^0(\gamma)$ est le poids du neutron au début du cycle.

Estimateurs corde et collision du facteur de multiplication

Lors d'une collision, l'estimateur précédent encaisse un score uniquement si la réaction échantillonnée est une fission. Pour estimer ce facteur lors de tous les événements, il faut encaisser le nombre moyen de neutrons produits par fission (fictive) pondéré par la probabilité que la fission ait lieu. On définit alors deux nouveaux estimateurs du facteur de multiplication effectif. Le premier est basé sur l'estimateur collision du flux et s'écrit :

$$k_{eff}^{coll, n}(\gamma) = \frac{\bar{\nu}_{i_n} \sigma_f^{i_n}(\mathbf{z}_n) \omega_+^n(\gamma)}{\sigma_t^{i_n}(\mathbf{z}_n) \omega_+^0(\gamma)}, \quad (1.21)$$

où

- i_n est l'index de l'isotope choqué lors de la $n^{i\grave{e}me}$ collision de la particule de trace γ ,
- $\bar{\nu}_{i_n}$ est le nombre moyen de neutrons produit par fission sur l'isotope i_n ,
- $\sigma_f^{i_n}(\mathbf{z}_n)$ est la section efficace microscopique de fission de l'isotope i_n à l'énergie de la particule avant sa $n^{i\grave{e}me}$ collision,
- $\omega_+^n(\gamma)$ est le poids du neutron avant sa $n^{i\grave{e}me}$ collision.

Le second est, quant à lui, basé sur l'estimateur "corde" du flux :

$$k_{eff}^{corde, n}(\gamma) = \left(\sum_i \bar{\nu}_i \Sigma_f^i(\mathbf{z}_n^+) \right) l^n(\gamma) \omega_+^n(\gamma), \quad (1.22)$$

où

- $\bar{\nu}_i$ est le nombre moyen de neutrons produit par fission sur l'isotope i ,
- $\Sigma_f^i(\mathbf{z}_n^+)$ est la section efficace macroscopique de fission de l'isotope i du le milieu parcouru par le neutron après sa $n^{i\grave{e}me}$ collision,
- $l^n(\gamma)$ est la distance parcourue par le neutron entre sa $n^{i\grave{e}me}$ et $(n+1)^{i\grave{e}me}$ collision,
- $\omega_+^n(\gamma)$ est le poids du neutron après sa $n^{i\grave{e}me}$ collision.

On montre que ces trois quantités ($k_{eff}^{step, n}$, $k_{eff}^{coll, n}$ et $k_{eff}^{corde, n}$) sont des estimateurs non-biaisés du k_{eff} .

1.3.4 Les méthodes de réduction de variance

Dans cette dernière partie, nous ne détaillerons pas les nombreuses techniques de réduction de variance qui existent, mais nous en présenterons deux qui sont notamment utilisées par TRIPOLI-4 : la carte d'importance et la capture implicite (avec les méthodes de weight watching qui l'accompagnent). L'objectif n'est pas de démontrer leurs utilités ni de détailler leurs implémentations au sein de TRIPOLI-4, mais plutôt de montrer leurs fonctionnements. Cela permettra au lecteur de se familiariser avec la notion de poids de particule et à l'utilisation de densités de probabilités non-analogues.

Enfin, la méthode de Woodcock sera présentée à la fin de ce chapitre. Cette technique de réduction de variance n'est pas implémentée dans TRIPOLI-4, mais elle est utilisée dans quelques références qui seront discutée dans la suite de ces travaux. Il sera alors utile d'en comprendre l'intérêt et les limitations.

1.3.4.1 La carte d'importance

La qualité de la mise en œuvre d'une technique de réduction de variance est conditionnée par le choix des densités de probabilité non-analogues. L'une des techniques utilisées pour réaliser ce choix consiste à construire une carte d'importance. Pour cela, il faut effectuer un changement de flux, selon :

$$\forall P \in \mathcal{E}_0, \phi^*(P) = \mathfrak{S}(P) \phi(P), \quad (1.23)$$

où \mathfrak{S} est une fonction arbitraire.

Cette fonction aura pour but d'augmenter le flux dans la partie de l'espace des phases qui présente de l'intérêt (ou de l'importance) pour la simulation, et donc de diriger les particules vers une ou des zones utiles de l'espace des phases. Avec ce flux non-analogue, l'équation de Boltzmann devient (voir l'Annexe A) :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^*(P) + \Sigma_t^*(\vec{r}, E) \phi^*(P) = \iint_{0 \ 4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega} dE' + S^*(P), \quad (1.24)$$

où

- $\Sigma_t^*(P) = \Sigma_t(P) - \kappa(P) \vec{\Omega}(P) \cdot \vec{\Omega}_0(P)$ est la section efficace totale pour le flux non-analogue,
- $\kappa(P) = \frac{|\vec{\nabla}_{\mathfrak{S}(P)}|}{\mathfrak{S}(P)}$ est le paramètre de biaisage,
- $\vec{\Omega}_0(P) = \frac{\vec{\nabla}_{\mathfrak{S}(P)}}{|\vec{\nabla}_{\mathfrak{S}(P)}|}$ est la direction d'intérêt,
- $S^*(P) = \mathfrak{S}(P) S(P)$ est la densité de source non-analogue,
- $K^*(P' \rightarrow P) = \frac{\mathfrak{S}(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\mathfrak{S}(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} K(P' \rightarrow P)$ est l'opérateur de transition non-analogue.

On voit dans l'expression de Σ_t^* que le libre parcours moyen des neutrons est plus grand lorsque $\vec{\Omega}(P) = \vec{\Omega}_0(P)$, c'est-à-dire lorsque les neutrons se déplacent dans la direction d'intérêt. Au contraire, s'ils se dirigent dans la direction opposée, leur trajet moyen avant collision diminue. Tout l'enjeu de cette méthode réside dans le choix de la fonction \mathfrak{S} .

En pratique, pour expliciter la fonction \mathfrak{S} , il existe différentes techniques. Théoriquement, la meilleure solution possible aurait la forme de la solution de l'équation de transport adjointe [Reus2003, Span1969, Dejo1982, Lux1991]. On peut montrer que si \mathfrak{S} est égale au flux adjoint, alors on obtient un jeu idéal à variance nulle. Dans ce cas \mathfrak{S} est appelée la fonction d'importance. Mais cette solution nécessite de connaître la solution du problème adjoint, ce qui, en pratique, n'est pas plus simple que de chercher la solution du problème direct. Il faut alors effectuer des hypothèses simplificatrices pour obtenir des formes efficaces de la fonction d'importance. Par exemple, \mathfrak{S} peut être exprimé sous forme factorisée à partir de fonctions analytiques simples¹⁵. Ou encore, à partir d'un code de calcul déterministe on peut d'obtenir une forme approchée de la solution de l'équation de transport adjointe, et donc de \mathfrak{S} .

De plus, l'équation 1.23 montre que le résultat obtenu avec les cartes d'importance n'est pas égal au résultat analogue. Il faut corriger le poids des particules par $1/\mathfrak{S}(P)$ pour retrouver le flux analogue. L'échantillonnage par importance implique la notion de poids de référence (en chaque point de l'espace des phases P), qui est défini par $\Pi(P) = 1/\mathfrak{S}(P)$, ce qui permet d'encaisser lors de la simulation le poids $\omega(P) = \mathcal{W}(P) * \Pi(P)$, où $\mathcal{W}(P)$ est le poids non-analogue de la particule, pour l'estimation des scores analogues. Dans le cas où \mathfrak{S} est la fonction d'importance, $\Pi(P)$ correspond au poids idéal de la particule pour minimiser la variance des scores.

1.3.4.2 La capture implicite

Lors d'une simulation naturelle, certaines particules peuvent être capturées avant d'avoir pu contribuer aux scores. L'échantillonnage de tels événements peut donc s'avérer contre productif et impacter lourdement le temps de calcul d'une simulation¹⁶. Il peut donc être intéressant de limiter, voire de supprimer, la capture des particules simulées pour les inciter à mieux explorer l'espace des phases, et donc d'accroître leur probabilité d'être encaissées.

La technique qui consiste à remplacer les captures stériles par des diffusions est appelée la capture implicite. En allongeant la durée de vie des particules, elle permet de diminuer le nombre de particules sources à échantillonner et donc a priori de mieux exploiter les ressources nécessaires à la simulation. En contrepartie, lors de chaque événement, après le tirage de l'isotope choqué, le poids de la particule est mis à jour. La correction apportée est alors égale au rapport entre la probabilité d'interagir avec l'isotope (indexé par i) autrement que

15. Une bonne connaissance du système par l'utilisateur est alors requise.

16. Par exemple, dans les calculs à forte atténuation, où l'on recherche la réponse d'un détecteur de particules éloigné de toutes les sources et séparé de celles-ci par d'importantes protections.

par capture, sur la probabilité totale d'interaction avec l'isotope, c'est-à-dire :

$$\omega_c(P) = \frac{\sigma_c^i(P) - \sigma_t^i(P)}{\sigma_t^i(P)} = 1 - \frac{\sigma_c^i(P)}{\sigma_t^i(P)},$$

où

- $\sigma_c^i(P)$ est la section efficace microscopique de capture de l'isotope i ,
- $\sigma_t^i(P)$ est la section efficace microscopique totale de l'isotope i .

Mais dans ces conditions, plus aucun évènement ne peut être échantillonné pour stopper la simulation des particules¹⁷. Il est donc nécessaire d'employer avec la capture implicite une autre méthode qui réintroduise une fin de vie aux particules. C'est le rôle des méthodes dites de weight watching.

1.3.4.3 Le weight watching

Lorsque le poids des particules s'éloigne trop du poids de référence, les performances de la simulation peuvent être dégradées. Les simulations non-analogues sont donc généralement munies de plusieurs méthodes de weight watching qui assurent un contrôle sur la variation du poids des particules. Parmi elles, les deux méthodes les plus utilisées sont la roulette russe et le splitting. La première s'occupe des particules de poids faible et la seconde des particules de poids fort.

La roulette russe

Lorsque le poids d'une particule devient trop faible (par exemple à cause de la capture implicite), sa contribution (éventuelle) au calcul n'est plus significative face aux ressources engagées pour sa simulation. Il faut donc définir une méthode qui puisse soit stopper cette particule et permettre ainsi l'échantillonnage d'une nouvelle particule source, soit réévaluer son poids. C'est ce que propose la roulette russe. Pour cela, on définit une limite de poids en deçà de laquelle les particules risquent d'être stoppées¹⁸. Lorsqu'une particule se retrouve dans une telle situation, son poids - noté $\omega(P)$, ou encore $\mathcal{W}(P) * \Pi(P)$ - correspond au produit des corrections successives de la capture implicite et des autres techniques de réduction de variance, c'est-à-dire au produit des probabilités de survie de la particule lors de chaque évènement qu'elle a subi. L'arrêt de cette dernière est donc échantillonné avec une probabilité de $1 - \omega(P)$, et lorsque celle-ci est conservée, avec la probabilité $\omega(P)$, son poids est réévalué à $\Pi(P)$. Ainsi, on conserve en moyenne le poids total des particules.

L'utilisation de la capture implicite avec la roulette russe permet donc d'échantillonner moins souvent l'arrêt des particules simulées, ce qui augmente leur libre parcours moyen.

Le splitting

Dans la situation inverse, c'est-à-dire lorsque le poids de la particule devient trop important¹⁹, il est nécessaire de mettre en place une technique qui le ramène à une valeur plus modérée, plus proche de la référence $\Pi(P)$. C'est le rôle du splitting²⁰. Pour cette technique, on commence par définir un seuil de poids haut, au-delà duquel la particule sera dupliquée en plusieurs particules de poids moindre. Le splitting sépare alors la particule en n particules de poids $\Pi(P)$, où n est la partie entière du poids de la particule avant splitting, c'est-à-dire $\mathcal{W}(P) * \Pi(P)$. Et pour conserver (en moyenne) le nombre total de particules simulées, une dernière particule de poids $\Pi(P)$ est créée avec une probabilité $\mathcal{W}(P) * \Pi(P) - n$. Ainsi, la taille de la population de particules se trouvant dans les zones d'intérêt de l'espace des phases est augmentée.

Au final, l'association des différentes techniques présentées permet à l'utilisateur de "pousser" les particules qu'il simule vers des zones d'intérêt tout en gardant un contrôle sur leurs poids.

17. Excepté bien sûr la fuite du système (lorsqu'elle est possible). Mais le libre parcours moyen des particules est généralement bien inférieur à la taille caractéristique du milieu dans lequel elles évoluent.

18. La valeur de cette limite est arbitraire et l'efficacité de celle-ci dépend beaucoup des caractéristiques de la simulation.

19. On rappelle que le poids de la particule augmente lorsque celle-ci se trouve dans une zone à forte importance (voir 1.3.4.1) ou lors de réactions ayant plusieurs neutrons en sortie (*fission*, $(n; 2n)$, ...)

20. Le but est d'éviter que le nombre de particules simulées soit réduit significativement par la présence d'une particule de poids élevé. Dans ce cas, lorsqu'une telle particule est encaissée durant un cycle, l'estimation du score et de sa variance peut être fortement perturbée. Ce phénomène, appelé "saut de variance" rend instable le calcul.

1.3.4.4 La méthode de Woodcock

La méthode de Woodcock [Wood1965], aussi appelée pseudo-scattering ou encore δ -scattering, est une technique de réduction de variance qui se distingue des autres techniques présentées dans ce chapitre par son objectif. Au lieu de diminuer la variance du calcul (en augmentant éventuellement le temps de la simulation), cette méthode vise à accélérer une partie de la simulation sans modifier la variance.

Lorsqu'une particule est propagée dans un milieu, le code Monte Carlo doit échantillonner la distance parcourue selon la loi de l'opérateur de transport. Pour cela, une fois que la direction de propagation est connue (soit par calcul, soit par échantillonnage), le parcours optique est échantillonné en fonction des sections efficaces macroscopiques totales des matériaux traversés. Par exemple, si dans la direction de parcours d'un neutron se trouve trois milieux différents, de sections efficaces macroscopiques totales $\Sigma_{t,1}$, $\Sigma_{t,2}$ et $\Sigma_{t,3}$, la probabilité d'échantillonner la distance l vaut

$$p(l) = \begin{cases} \Sigma_1 e^{-\Sigma_1 l}, & \text{si } l \leq l_1 \\ \Sigma_2 e^{-\Sigma_1 l_1} e^{-\Sigma_2 (l-l_1)}, & \text{si } l_1 < l \leq l_2 \\ \Sigma_3 e^{-\Sigma_1 l_1} e^{-\Sigma_2 (l_2-l_1)} e^{-\Sigma_3 (l-l_2)}, & \text{si } l_2 < l \end{cases}$$

où l_1 et l_2 sont les distances entre le point de départ de la particule et les points situés à la frontière des milieux 1 et 2 dans la direction de propagation de la particule. Cet exemple, schématisé sur la figure 1.2 pour $l > l_2$, illustre bien la difficulté des codes Monte Carlo à simuler le transport des neutrons. A chaque mouvement des neutrons, le code doit calculer la distance entre la particule et l'interface du milieu dans lequel elle est propagée dans sa direction de propagation. Et cette opération doit être répétée jusqu'à ce qu'une collision ou une fuite ait lieu.

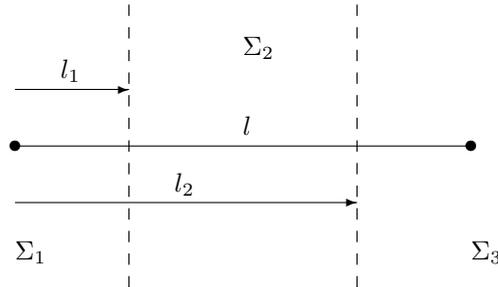


FIGURE 1.2 : Exemple d'une trace traversant trois milieux avant d'effectuer une collision.

La distance entre les deux sites de collision est notée l . La particule traverse donc le milieu 1 sur la distance l_1 , puis le milieu 2 sur la distance $l_2 - l_1$ et enfin le milieu 3 sur la distance $l - l_2$.

Pour accélérer ce calcul, la méthode de Woodcock introduit dans chaque milieu une nouvelle section efficace virtuelle. Cette section, appelée section efficace de pseudo-diffusion, est telle que la nouvelle section efficace macroscopique totale soit uniforme sur l'ensemble de la géométrie où la méthode de Woodcock est appliquée, soit dans notre exemple $\Sigma_1^* = \Sigma_2^* = \Sigma_3^* = \max(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3) = \Sigma_{max}$. La probabilité d'échantillonner la distance l devient alors

$$p(l) = \Sigma_{max} e^{-\Sigma_{max} l}.$$

Le calcul de cette distance est alors grandement accéléré car la connaissance des distances parcourues dans chacun des milieux traversés n'est pas nécessaire. Mais si une collision a lieu, par exemple dans le milieu 3, alors l'interaction de "pseudo-diffusion" peut être échantillonnée avec la probabilité $(\Sigma_3^* - \Sigma_3) / \Sigma_3^*$. Dans ce cas, l'état de la particule n'est pas modifiée et un nouveau parcours est échantillonné jusqu'à ce que la particule effectue une collision réelle.

Dans le cas où les différents milieux du système ne présentent pas de fortes hétérogénéités, les sections de pseudo-diffusions restent faibles en comparaison des sections efficaces macroscopiques totales réelles. Peu de pseudo-diffusions sont alors échantillonnées et le calcul est accéléré. Mais dans le cas où l'un des milieux

présente une section efficace totale beaucoup plus importante que celle des autres milieux, un nombre important de pseudo-diffusions sont échantillonnées dans les autres milieux. Le code s'en trouve alors ralenti. De plus, les distances parcourues dans chacun des milieux n'étant pas connues, les estimateurs basés sur cette grandeur (comme le flux corde par exemple) ne sont pas utilisables. Cette méthode n'est donc pas adaptée à toutes les situations.

Références

- [Abra1972] M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, 9th edition*. Dover, NY, 1972.
- [Antc2009] I. ANTICHEVA, M. BALLINTIJN, B. BELLENOT, M. BISKUP, R. BRUN, N. BUNCIC, P. CANAL, D. CASADEI, O. COUET, V. FINE, L. FRANCO, G. GANIS, A. GHEATA, D. GONZALEZ MALINE, M. GOTO, J. IWASZ- KIEWICZ, A. KRESHUK, D. MARCOS SEGURA, R. MAUNDER, L. MONETA, A. NAUMANN, E. OFFERMANN, V. ONUCHIN, S. PANACEK, F. RADEMAKERS, P. RUSSO et M. TADEL, “ROOT - A C++ framework for petabyte data storage, statistical analysis and visualization”, juillet 2009.
- [Brun1997] R. BRUN et F. RADEMAKERS, “ROOT - An Object Oriented Data Analysis Framework”, *Proceedings AIHENP’96 Workshop*, sep 1997. voir aussi <http://root.cern.ch/>.
- [Brun2009] E. BRUN, E. DUMONTEIL, Y. COBIGO, F.-X. HUGOT, N. HUOT, C. JOUANNE, Y.-K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT, J.-C. TRAMA et T. VISONNEAU, “TRIPOLI-4 Version 6 User Guide”, rapport technique, CEA Saclay, 2009.
- [Dejo1982] G. DEJONGHE, *Études d’effets différentiels par la méthode de Monte Carlo dans le cadre de l’équation du transport. Applications aux calculs de protection et de neutronique*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1982.
- [Depi2000] J. M. DEPINAY, *Automatisation de méthodes de réduction de variance pour la résolution de l’équation de transport*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, mai 2000.
- [Diop2007] C. M. DIOP, O. PETIT., E. DUMONTEIL, F.-X. HUGOT, Y.-K. LEE, A. MAZZOLO et J.-C. TRAMA, “TRIPOLI-4 : A 3D continuous-energy Monte Carlo transport code”, *First International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications*, 2007.
- [Dumo2007] E. DUMONTEIL, F.-X. HUGOT, C. JOUANNE, Y.-K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT et J.-C. TRAMA, “An overview on the Monte Carlo particle transport code TRIPOLI-4”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 97, p. 694-695, nov 2007. Présenté par C. M. Diop.
- [Lux1991] I. LUX et L. KOBLINGER, *Monte Carlo particle transport methods : neutron and photon calculations*. CRC Press, 1991.
- [Meti2006] H. METIVIER, *Radioprotection et ingénierie nucléaire*. EDP Science, 2006.
- [Peti2009] O. PETIT, “Inventaire des techniques de biaisage dans les codes de transport de particules par la méthode Monte Carlo”, rapport technique, CEA Saclay, Rapport DM2S/SERMA/LTSD/RT/09-4680/A, 2009.
- [Reus2003] P. REUSS, *Précis de neutronique*. EDP Science, 2003.
- [Rief1984] H. RIEF, “Generalized Monte Carlo perturbation algorithms for correlated sampling and a second-order Taylor series approach”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 11, no. 9, p. 455-476, 1984.
- [Span1969] J. SPANIER et E. M. GELBARD, *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1969.
- [Wood1965] E. WOODCOCK, T. MURPHY, P. HEMMINGS AND T. LONGWORTH, “Monte Carlo technique for local perturbation in multiplying systems”, *Proceedings of the Conference on the Application of Computing Methods to Reactor Problems, ANL-7050*, p. 557-579, 1965.

Les méthodes perturbatives des simulations Monte Carlo

Au cours d'une simulation Monte Carlo, il est souvent utile de mesurer l'effet sur les grandeurs calculées d'une variation d'un ou plusieurs paramètres. Cependant, répéter des simulations Monte Carlo dans le cadre d'études paramétriques peut s'avérer être une stratégie inadaptée en raison des temps de calcul prohibitifs. Ainsi, l'utilisation de méthodes perturbatives s'avère très efficace puisque celles-ci permettent de mettre en œuvre des études paramétriques au prix d'un temps de simulation peu, voire pas, dégradé. Les algorithmes permettant d'implémenter ces méthodes dans les codes Monte Carlo peuvent être regroupés en deux catégories : il y a d'une part ceux qui se basent sur un développement en série de Taylor des réponses recherchées [Olho1962, Taka1970, Hall1980, Hall1982, Rief1984], et d'autre part ceux qui utilisent la méthode de l'échantillonnage corrélé [Span1969, Bern1974, Naka1978, Dejo1982, Rief1984, Rief2002]. Dans ce chapitre, nous présenterons succinctement ces deux types de méthodes, en nous attardant plus particulièrement sur l'échantillonnage corrélé appliqué à la perturbation des concentrations isotopiques, au centre de ce travail.

2.1 Développement en séries de Taylor

Notons (\mathcal{M}_0) le système dans lequel une simulation Monte Carlo est réalisée pour résoudre le problème suivant :

$$(\mathcal{P}_0) \begin{cases} \psi &= \langle K_0, \psi \rangle_0 + \langle T_0, S_0 \rangle_0 \\ \bar{R}_0 &= \langle \psi, g \rangle_0 \end{cases},$$

et (\mathcal{M}_1) un système identique à (\mathcal{M}_0) mais dans lequel un paramètre, noté α , est perturbé (de la valeur α_0 à la valeur α_1). Pour résoudre le problème perturbé

$$(\mathcal{P}_1) \begin{cases} \psi_{\alpha_1} &= \langle K_1, \psi_{\alpha_1} \rangle_1 + \langle T_1, S_1 \rangle_1 \\ \bar{R}_1 &= \langle \psi_{\alpha_1}, g \rangle_1 \end{cases}$$

à partir de la simulation faite dans (\mathcal{M}_0) , il est possible de développer les grandeurs du système (\mathcal{P}_1) en série de Taylor :

$$(\mathcal{P}_1) \begin{cases} \tilde{\psi}_{\alpha_1}^n &\simeq \psi_{\alpha_0} + \partial_\alpha \psi_{\alpha_0} (\alpha_1 - \alpha_0) + \frac{1}{2} \partial_\alpha^2 \psi_{\alpha_0} (\alpha_1 - \alpha_0)^2 + \dots + \frac{1}{i!} \partial_\alpha^i \psi_{\alpha_0} (\alpha_1 - \alpha_0)^i \\ \bar{R}_1 &\simeq \langle \tilde{\psi}_{\alpha_1}, g \rangle_1 \end{cases},$$

où

- $\tilde{\psi}_{\alpha_1}^n$ est le développement en série de Taylor de ψ_α autour de α_0 à l'ordre n ,
- $\partial_\alpha^i \psi_{\alpha_0}$ est la dérivée partielle de ψ_α d'ordre i par rapport au paramètre α évaluée en α_0 ,
- $\frac{1}{i!} \partial_\alpha^i \psi_{\alpha_0}$ est le coefficient de sensibilité de ψ_α d'ordre i évalué en α_0 .

Ce développement introduit un biais¹ dans le calcul lié à la troncature à un ordre arbitraire du développement, mais en choisissant un ordre suffisamment élevé, cette erreur peut être minimisée. Les dérivées partielles du

1. Les termes "biais" et "erreur systématique" seront utilisés indifféremment

développement en série de Taylor $\tilde{\psi}_{\alpha_1}^n$ sont calculables à partir du développement en série de Neumann de ψ_α (Eq. 1.7 et 1.8)² :

$$\forall i \in \mathbb{N}, \partial_\alpha^i \psi_{\alpha_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} \partial_\alpha^i \left\{ \left[\prod_{j=1}^n K_{\alpha,0}(P_j \rightarrow P_{j+1}) \right] T_{\alpha,0}(P_0 \rightarrow P_1) S_{\alpha,0}(P_0) \right\}_{\alpha_0} dP_n \dots dP_0.$$

Lors de la simulation d'une trace γ dans le milieu initial (\mathcal{M}_0), le coefficient de sensibilité d'ordre i est estimé en encaissant à chaque collision la quantité $\partial_\alpha^i \left\{ \left[\prod_{j=1}^n K_{\alpha,0}(\mathbf{z}_j \rightarrow \mathbf{z}_{j+1}) \right] T_{\alpha,0}(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) S_{\alpha,0}(\mathbf{z}_0) \right\}_{\alpha_0}$, ce qui permet de reconstruire simultanément les réponses initiales et perturbées.

En général, il est possible que plusieurs paramètres soit perturbés simultanément (comme la liste des concentrations isotopiques d'un volume donné par exemple). Il faut alors ajouter aux développements précédents les termes de dérivées croisées, ce qui peut faire augmenter rapidement le nombre de coefficients à estimer. En général, les codes Monte Carlo implémentent le développement en série de Taylor à l'ordre 1 ou 2, ce qui est un bon compromis entre le temps de calcul et l'erreur systématique introduite [Rief1984, Favo2002, Naga2005, Favo2009, Naga2011]. Néanmoins, la variance d'une réponse perturbée obtenue par cette méthode reste proche de celle du calcul initial, ce qui peut entraîner une sous estimation de l'erreur statistique lors de perturbations importantes³.

2.2 La méthode des échantillons corrélés

La méthode des échantillons corrélés, appliquée aux codes Monte Carlo de transport des particules, consiste à perturber l'opérateur de transport de l'équation de Boltzmann. En pratique, cela revient à modifier le poids statistique des particules tout au long de leurs "histoires" (voir 2.2.1). Dans la suite de cette section, la modification du poids des particules est explicitée dans le cadre général d'une perturbation de paramètres quelconques, puis dans le cadre d'une perturbation des concentrations isotopiques (qui sera utilisée pour mettre en œuvre l'accélération des simulations Monte Carlo en évolution). Enfin, les avantages et les inconvénients de cette méthode seront discutés dans la dernière section (en particulier, des considérations sur la variance inhérente à ce type de processus statistique seront présentées).

2.2.1 Perturbation du noyau de transition

On considère deux milieux, notés (\mathcal{M}_0) et (\mathcal{M}_1), sous-critiques (soit en milieu infini : $\|K_0\| < 1$ et $\|K_1\| < 1$) ayant la même géométrie et caractérisés par des paramètres (sections efficaces, concentration, ...) éventuellement différents. On suppose que le problème initial (ou non-perturbé) (\mathcal{P}_0) a été simulé par une méthode Monte Carlo et que toutes les données de la simulation sont accessibles (c'est-à-dire les lieux de collision, les poids des particules, leurs énergies, les sections efficaces de chaque composition, ...).

Pour toute trace $\gamma = \{\mathbf{z}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ simulée dans (\mathcal{M}_0), on note $\kappa_{cs}^n(\gamma)$ la correction de poids cumulée avant le $n^{\text{ième}}$ choc de la particule apportée par la méthode des échantillons corrélés et $\tilde{\gamma}$ la trace obtenue avec les poids perturbés. Le but est de pouvoir utiliser l'estimateur i_1^n sur la trace $\tilde{\gamma}$ simulée dans (\mathcal{M}_0) de la même façon que sur les traces γ créées dans (\mathcal{M}_1), ce qui se traduit par

$$\forall n \in \mathbb{N}, i_1^n(\tilde{\gamma}) dp_0^{n*}(\tilde{\gamma}) = i_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma).$$

On montre (voir l'Annexe A) que i_1^n appliquée à $\tilde{\gamma}$ de (\mathcal{M}_0) est un estimateur non biaisé de $\overline{I_1^n}$ et que la correction de perturbation des poids vaut

$$\forall n \in \mathbb{N}, \kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{\omega_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma)}{\omega_0^n(\gamma) dp_0^n(\gamma)},$$

ou encore

$$\kappa_{cs}^0(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \text{ et } \forall n \in \mathbb{N}^*, \kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{K_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{K_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}. \quad (2.1)$$

2. Par soucis de simplification, dans l'expression des noyaux de transitions de $\psi_{\alpha_0, n}$, le point P_{n+1} vaut P

3. La perturbation d'un paramètre sera considérée arbitrairement comme étant importante lorsque la modification de la valeur de ce dernier sera supérieure à 10%.

Ainsi, le développement en série de Neumann de notre solution (Eq. 1.8) devient

$$\forall n \in \mathbb{N}, \psi_n = \int_{\mathcal{E}_1} \dots \int_{\mathcal{E}_1} K_1^n T_1 S_1 = \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} \kappa_{cs}^n K_0^n T_0 S_0. \quad (2.2)$$

On remarque que les corrections de poids sont indépendantes des techniques de réduction de variance utilisées pour simuler le problème initial. Elles ne dépendent que du rapport des densités de probabilité des sources et de celui des noyaux de transport et de collision.

De plus, l'écriture des $\kappa_{cs}^n(\gamma)$ nécessite d'imposer aux perturbations les conditions suivantes (semblables aux conditions 1.13 que l'on impose en simulation non-analogue) :

$$\forall P \in \mathcal{E}_0, \begin{cases} S_0(P) = 0 & \Rightarrow & S_1(P) = 0 \\ \forall P' \in \mathcal{E}_0, T_0(P \rightarrow P') = 0 & \Rightarrow & T_1(P \rightarrow P') = 0 \\ \forall P' \in \mathcal{E}_0, K_0(P \rightarrow P') = 0 & \Rightarrow & K_1(P \rightarrow P') = 0 \end{cases}. \quad (2.3)$$

Autrement dit, tout évènement observable dans le milieu (\mathcal{M}_1) doit être observé dans le milieu (\mathcal{M}_0), ce qui impose certaines restrictions sur les perturbations permises. En particulier, la géométrie ne peut être modifiée et aucun isotope ne peut apparaître dans le système perturbé.

Mais d'un point de vue informatique, l'expression de $\kappa_{cs}^n(\gamma)$ n'est pas "pratique" car elle dépend des opérateurs de transition K_1 et K_0 . On montre (voir l'Annexe A) que la correction de poids due à l'échantillonnage corrélé peut aussi s'écrire en fonction des poids $\omega_1^n(\gamma)$ et $\omega_0^n(\gamma)$ et des densités de probabilité p_1 et p_0 :

$$\kappa_{cs}^0(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \text{ et } \forall n \in \mathbb{N}^*, \kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{\omega_1^n(\gamma) S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{\omega_0^n(\gamma) S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{p_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}.$$

De plus, on rappelle que $\omega_0^n(\gamma) = \prod_{i=1}^n k_0(\mathbf{z}_i)$ correspond au produit du nombre moyen de particules suite aux n premières collisions de la trace γ . Comme $\tilde{\gamma}$ contient la même suite d'évènements que γ , si la perturbation ne modifie pas le nombre de particules moyen issus de ces évènements, alors $\omega_0^n(\gamma) = \omega_1^n(\gamma)$.

Remarque :

Dans un calcul en criticité, lorsqu'une particule subit une interaction produisant d'autres particules, celles-ci naissent avec le poids de la particule "mère". Dans un tel calcul, la correction de poids de la particule incidente est alors transmise aux particules produites en tant que perturbation de la densité de sources (c'est-à-dire $\frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)}$). La première correction de poids appliquée à ces particules correspond donc à la perturbation de la distribution de sources en mode protection et à la correction de poids cumulée de la particule "mère" en mode criticité.

2.2.2 Application à la perturbation des concentrations isotopiques

L'échantillonnage corrélé peut être appliqué à de nombreux domaines. Par exemple, au sein de TRIPOLI-4, elle est mise en œuvre pour perturber les densités des matériaux, les concentrations isotopiques, ou encore les sections efficaces⁴. Dans le cadre de ce travail, l'échantillonnage corrélé est utilisé pour perturber des concentrations isotopiques. La suite de ce chapitre est donc dédiée à cette application et a pour but d'explicitier l'expression des corrections de poids dans ce cas particulier.

D'après la section 1.1, la probabilité de parcourir la distance $\|x_{k+1} - x_k\|$ entre deux points de collision de coordonnées x_k et x_{k+1} vaut

$$T_m(\mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}) = \Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1}) e^{-\Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1})\|x_{k+1} - x_k\|},$$

où

- $\Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_k)$ est la section efficace macroscopique totale au point \mathbf{z}_k dans le système (\mathcal{M}_m),
- $\|x_{k+1} - x_k\|$ est la distance séparant les lieux de collisions x_k et x_{k+1} .

4. Bien qu'elle ne puisse s'appliquer que sur une seule composition à la fois

Cette dernière formule est valable pour un milieu homogène et isotherme⁵. Plus généralement, il faut prendre en compte le cas où les collisions n'ont pas lieu dans les mêmes volumes, c'est-à-dire lorsque la particule considérée traverse une ou plusieurs interfaces avant d'effectuer un choc. On ajoute alors à la trace $\gamma = \{\mathbf{z}_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ les points qui correspondent aux intersections entre la trajectoire de la particule et les différentes interfaces. Par exemple, lorsque la particule traverse une seule interface, aux coordonnées $\mathbf{y}_k^1 = (y_k^1, E_k, \vec{\Omega}_k)$, entre les deux points de collision précédents, l'opérateur de transport se décompose en deux termes

$$T_m(\mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}) = T_m^{interface}(\mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{y}_k^1) T_m^{collision}(\mathbf{y}_k^1 \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}),$$

avec

$$\begin{aligned} T_m^{interface}(\mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{y}_k^1) &= e^{-\Sigma_{t,m}(\mathbf{y}_k^1) \|y_k^1 - x_k\|}, \\ T_m^{collision}(\mathbf{y}_k^1 \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}) &= \Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1}) e^{-\Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1}) \|x_{k+1} - y_k^1\|}, \end{aligned}$$

et le noyau de collision au point \mathbf{z}_k , qui amène l'état de la particule de \mathbf{z}_k à \mathbf{z}_k^+ par collision sur l'isotope iso_k selon l'interaction r_k , vaut

$$\begin{aligned} C_m(\mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{z}_k^+) &= C_m(x_k, E_k \rightarrow E_{k+1}, \vec{\Omega}_k \rightarrow \vec{\Omega}_{k+1}) \\ &= \nu_{r_k}^{iso_k} \Sigma_{r_k, m}^{iso_k}(\mathbf{z}_k) \chi_{r_k}^{iso_k}(E_k \rightarrow E_{k+1}, \vec{\Omega}_k \rightarrow \vec{\Omega}_{k+1}) / \Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_k) \\ &= \nu_{r_k}^{iso_k} N_m^{iso_k}(x_k) \sigma_{r_k}^{iso_k}(\mathbf{z}_k) \chi_{r_k}^{iso_k}(E_k \rightarrow E_{k+1}, \vec{\Omega}_k \rightarrow \vec{\Omega}_{k+1}) / \Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_k), \end{aligned}$$

où

- $\Sigma_{r_k, m}^{iso_k}(\mathbf{z}_k)$ est la section efficace macroscopique de la réaction r_k sur l'isotope iso_k au point \mathbf{z}_k dans (\mathcal{M}_m) ,
- $\sigma_{r_k}^{iso_k}(\mathbf{z}_k)$ est la section efficace microscopique de la réaction r_k sur l'isotope iso_k au point \mathbf{z}_k ,
- $N_m^{iso_k}(x_k)$ est la concentration de l'isotope iso_k dans le matériau contenant le point x_k et dans (\mathcal{M}_m) ,
- $\nu_{r_k}^{iso_k}$ est le nombre moyen de neutrons produits par l'interaction r_k de l'isotope iso_k ,
- $\chi_{r_k}^{iso_k}(E_k \rightarrow E_{k+1}, \vec{\Omega}_k \rightarrow \vec{\Omega}_{k+1})$ est la probabilité du neutron, suite à un choc de type r_k sur l'isotope iso_k , de passer de l'énergie E_k à E_{k+1} et de la direction $\vec{\Omega}_k$ à $\vec{\Omega}_{k+1}$.

Lors de l'encaissement des scores, les estimateurs définis par code tiennent compte du poids de la particule avant ou après la collision. Cela oblige à préciser les probabilités

- avant la collision :

$$\begin{aligned} p_m(\mathbf{y}_k^1 \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}) &= T_m^{collision}(\mathbf{y}_k^1 \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}) \\ &= \Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1}) e^{-\Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1}) \|x_{k+1} - y_k^1\|}, \end{aligned}$$

- et après la collision :

$$\begin{aligned} p_m(\mathbf{y}_k^1 \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}^+) &= C_m T_m^{collision}(\mathbf{y}_k^1 \rightarrow \mathbf{z}_{k+1}) \\ &= \nu_{r_{k+1}}^{iso_{k+1}} N_m^{iso_{k+1}}(x_{k+1}) \sigma_{r_{k+1}, m}^{iso_{k+1}}(\mathbf{z}_{k+1}) \chi_{r_{k+1}}^{iso_{k+1}}(E_{k+1} \rightarrow E_{k+2}, \vec{\Omega}_{k+1} \rightarrow \vec{\Omega}_{k+2}) e^{-\Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_{k+1}) \|x_{k+1} - y_k^1\|}. \end{aligned}$$

La correction de poids vaut alors

- au point de traversée de l'interface :

$$\kappa_{cs}^k(\gamma) \times e^{-(\Sigma_{t,1}(\mathbf{y}_k^1) - \Sigma_{t,0}(\mathbf{y}_k^1)) \|y_k^1 - x_k\|},$$

- au point \mathbf{z}_{k+1} (avant la collision) :

$$\kappa_{cs}^k(\gamma) \times e^{-(\Sigma_{t,1}(\mathbf{y}_k^1) - \Sigma_{t,0}(\mathbf{y}_k^1)) \|y_k^1 - x_k\|} \times \frac{\Sigma_{t,1}(\mathbf{z}_{k+1})}{\Sigma_{t,0}(\mathbf{z}_{k+1})} e^{-(\Sigma_{t,1}(\mathbf{z}_{k+1}) - \Sigma_{t,0}(\mathbf{z}_{k+1})) \|x_{k+1} - y_k^1\|},$$

- et au point \mathbf{z}_{k+1}^+ (après la collision) :

$$\kappa_{cs}^k(\gamma) \times e^{-(\Sigma_{t,1}(\mathbf{y}_k^1) - \Sigma_{t,0}(\mathbf{y}_k^1)) \|y_k^1 - x_k\|} \times \frac{N_m^{iso_{k+1}}(x_{k+1})}{N_m^{iso_{k+1}}(x_{k+1})} e^{-(\Sigma_{t,1}(\mathbf{z}_{k+1}) - \Sigma_{t,0}(\mathbf{z}_{k+1})) \|x_{k+1} - y_k^1\|}.$$

5. Au sein du code TRIPOLI-4, les différents volumes d'une géométrie sont toujours considérés comme tels (voir 1.3.1)

Finalement, en ajoutant I_k traversées d'interfaces entre chaque événements, c'est-à-dire en considérant la trace $\gamma = \left\{ \dots, \mathbf{z}_k \equiv \mathbf{y}_k^0, \mathbf{y}_k^1, \mathbf{y}_k^2, \dots, \mathbf{y}_k^{I_k}, \mathbf{z}_{k+1}, \dots \right\}_{k \in \mathbb{N}}$, l'expression générale du facteur de perturbation des poids s'écrit : $\forall n \in \mathbb{N}$,

$$\kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} \prod_{0 \leq k \leq n}^{collisions} \left\{ \left[\prod_{0 \leq i < I_k}^{interfaces} e^{-\Delta \Sigma_t(\mathbf{y}_k^{i+1}) \|\mathbf{y}_k^{i+1} - \mathbf{y}_k^i\|} \right] \frac{X_1^{iso_k}(\mathbf{z}_{k+1})}{X_0^{iso_k}(\mathbf{z}_{k+1})} e^{-\Delta \Sigma_t(\mathbf{z}_{k+1}) \|\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{y}_k^{I_k}\|} \right\}, \quad (2.4)$$

où

- $X_m^{iso_k}(\mathbf{z}_k)$ vaut $\Sigma_{t,m}(\mathbf{z}_k)$ si $k = n$ et s'il s'agit de la correction avant la collision, $N_m^{iso_k}(x_k)$ sinon,
- $\Delta \Sigma_t(\mathbf{z}_k)$ vaut $\Sigma_{t,1}(\mathbf{z}_k) - \Sigma_{t,0}(\mathbf{z}_k)$.

2.2.3 Exemple

Pour mieux comprendre l'équation 2.4, elle est appliquée ici à une trace simple. Soit γ la trace d'une particule née au point \mathbf{z}_0 et ayant traversé une interface au point \mathbf{y}_0^1 avant d'effectuer une collision au point \mathbf{z}_1 où elle meurt⁶. Son poids perturbé évolue lors de chacun de ces événements :

1. A sa naissance, la particule a un poids de $\omega_0^0(\gamma)$, qui est perturbé par le rapport des densités de sources pour valoir : $\omega_0^0(\gamma) \times \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)}$.
2. Arrivée à l'interface, la particule a parcouru la distance $\|\mathbf{y}_0^1 - \mathbf{z}_0\|$ dans un milieu de section efficace totale $\Sigma_{t,0}(\mathbf{y}_0^1)$. Pour simplifier l'expression des corrections de poids, on notera L_0 la distance parcourue et Σ_0^0 la section efficace macroscopique totale du milieu (la section perturbée sera donc noté Σ_1^0). Le poids de la particule est donc mis à jour en le multipliant par le rapport des probabilités d'atteindre l'interface (soit $e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0}$). Il vaut alors $\omega_0^0(\gamma) \times \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0}$.
3. Enfin, la particule traverse une longueur $\|\mathbf{z}_1 - \mathbf{y}_0^1\|$ dans un milieu de section efficace totale $\Sigma_{t,0}(\mathbf{z}_1)$. De même que pour l'évènement précédent, on note L_1 la distance parcourue depuis la traversée et Σ_0^1 la section efficace macroscopique totale du milieu. La particule interagit avec l'isotope i , de concentration N_0^i , et subit une capture. Son poids passe donc de $\omega_0^1(\gamma)$, avant la collision, à $\omega_{+0}^1(\gamma) = 0$, après la collision. Comme la particule a subi un choc, la correction de poids due à la perturbation est différente avant et après le choc. Elle vaut $\frac{\Sigma_1^1}{\Sigma_0^1} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$ avant la collision et $\frac{N_1^i}{N_0^i} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$ après. Au final, le poids perturbé de la particule vaut
 - $\omega_0^1(\gamma) \times \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0} \frac{\Sigma_1^1}{\Sigma_0^1} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$ avant la collision,
 - $\omega_{+0}^1(\gamma) \times \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0} \frac{N_1^i}{N_0^i} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$ après la collision.

L'ensemble de cette exemple est détaillé sur le tableau 2.1 et est imagé sur la figure 2.1. La trajectoire de la particule, ainsi que la valeur de ses poids perturbés en chacun de ses événements, y sont indiquées.

Remarque :

Si cette particule est générée dans un calcul critique, alors $\frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)}$ correspond à la correction de poids après collision de la particule "mère", au moment où celle-ci l'a produite. De même, si cette particule est stoppée en subissant une interaction produisant d'autres particules (qui seront transportées au cycle suivant), alors les particules "filles" auront pour correction de poids initial la dernière correction de leur "mère", c'est-à-dire $\frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} \times e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0} \times \frac{N_1^i}{N_0^i} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$.

2.2.4 Intérêts et inconvénients de la méthode

L'utilisation d'une méthode statistique de calcul de perturbations telle que l'échantillonnage corrélé peut s'avérer extrêmement intéressante. En effet, cette méthode ne fait aucune approximation ou hypothèse de modélisation et ce quelle que soit l'amplitude des perturbations. Les résultats ainsi obtenus conservent les propriétés inhérentes au Monte Carlo. De plus, on remarque que l'échantillonnage corrélé n'effectue aucun nouveau tirage aléatoire d'évènements et surtout ne nécessite aucun calcul géométrique. Elle requiert donc a priori moins de

6. Par capture radiative par exemple

Évènement	\mathbf{z}_0	\mathbf{y}_0^1	\mathbf{z}_1
poids initial avant collision	$\omega_0^0(\gamma)$	$\omega_0^0(\gamma)$	$\omega_0^1(\gamma)$
poids initial après collision			$\omega_{0+}^1(\gamma) = 0$
distance parcourue depuis l'évènement précédent	-	L_0	L_1
section efficace macroscopique rencontrée	-	Σ_0^0	Σ_0^1
correction de poids avant collision	$\frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)}$	$e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0}$	$\frac{\Sigma_1^1}{\Sigma_0^1} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$
correction de poids après collision			$\frac{N_1^i}{N_0^i} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$
poids perturbé avant collision	$\omega_0^0(\gamma) \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)}$	$\omega_0^0(\gamma) \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0}$	$\omega_0^1(\gamma) \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0} \frac{\Sigma_1^1}{\Sigma_0^1} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$
poids perturbé après collision			$\omega_{0+}^1(\gamma) \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} e^{-(\Sigma_1^0 - \Sigma_0^0)L_0} \frac{N_1^i}{N_0^i} e^{-(\Sigma_1^1 - \Sigma_0^1)L_1}$

TABLEAU 2.1 : Application de l'échantillonnage corrélé à un exemple de trace. Le calcul des corrections de poids appliquées à la particule est détaillé dans ce tableau.

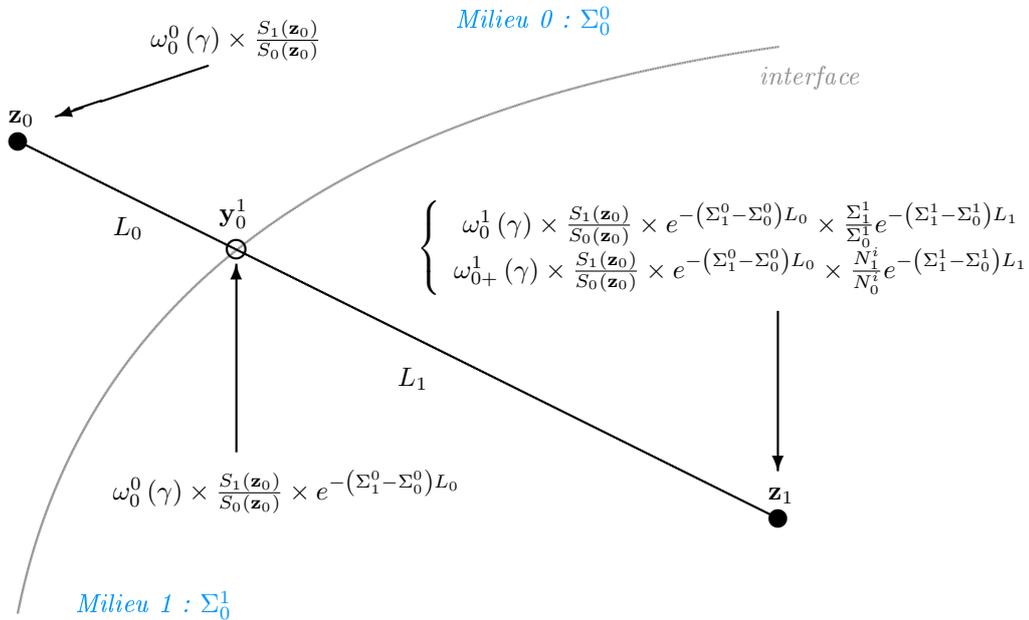


FIGURE 2.1 : Application de l'échantillonnage corrélé à un exemple de trace. Suite à la perturbation, le poids de la particule évolue depuis son lieu de naissance (pour tenir compte de la variation de la densité de source) jusqu'à sa mort (suite à la collision au point \mathbf{z}_1), en passant par la traversée de l'interface entre les milieux 1 et 2.

temps et de ressources qu'une nouvelle simulation Monte Carlo, ce qui la rend d'autant plus intéressante. Par exemple, les références [He2010] et [Su2010] montrent que l'utilisation de l'échantillonnage corrélé appliquée à la perturbation de la concentration isotopique permet d'améliorer jusqu'à deux ordres de grandeur la figure de mérite⁷.

Néanmoins, contrairement à ce qui a été fait pour l'estimation de la moyenne, on ne peut établir ni l'expression ni le comportement général de l'erreur statistique. En effet, dans le cas où l'amplitude de la perturbation est faible, la variance du résultat perturbé est proche de celle du calcul initial [Dejo1982]. Elle tend cependant à se dégrader rapidement lorsque l'on augmente l'amplitude de la perturbation, même si, dans certain cas, il peut arriver qu'elle s'améliore⁸. Pour des perturbations trop importantes, la simulation du problème initial reflète peu le comportement des particules dans le système final. Il se peut alors que la distribution des processus statistiques mis en jeu ait une variance infinie, ce qui interdit l'application du théorème central-limite [Dejo1982, Rief1984]. Concrètement, cela se traduit par une sous-estimation de l'erreur statistique et de son intervalle de confiance associé⁹. Il est donc important de ne pas "trop" perturber les paramètres de la simulation. Malheureusement, il est impossible de définir, dans le cas général, un seuil au delà duquel ce phénomène apparaît. Toutefois, l'expérience nous montre qu'une variation des paramètres de l'ordre de 10 à 20 % peut être considéré comme suffisamment faible pour que cela ne se produise pas (voir les résultats des parties III et IV).

On remarquera que ces considérations s'inscrivent dans la problématique plus générale de la quantification des incertitudes statistiques en Monte Carlo qui visent à intégrer l'ensemble des sources d'erreur possible affectant les résultats d'une simulation, comme par exemple les incertitudes sur les données nucléaires, les températures des compositions, leur densité, ...

Enfin, dans le cas où l'on cherche à estimer la variation d'une réponse entre un milieu initial et un milieu perturbé, soit $\delta R = R_1 - R_0$, et lorsque l'amplitude de la perturbation est infinitésimale¹⁰, il en va tout autrement. Si la réponse différentielle est estimée à l'aide de deux simulations Monte Carlo indépendantes, celle-ci devient faible comparée aux erreurs statistiques des réponses ($E_\varepsilon[\delta R] \ll \text{Var}_\varepsilon[R]$), ce qui rend l'incertitude relative divergente (voir l'Annexe A, ou [Dejo1982, Rief1984]). Mais si la réponse différentielle est obtenue par échantillonnage corrélé, on montre [Dejo1982] que l'incertitude statistique est du second ordre par rapport à la perturbation, ce qui permet d'obtenir une incertitude statistique relative finie. La méthode des échantillons corrélés a donc un net avantage pour ce type de calcul [He2010]. Ce fut à l'origine le principal intérêt de cette méthode et c'est pourquoi elle a été intégrée dans beaucoup de codes Monte Carlo, tels que TRIPOLI-4.

7. On notera tout de même que les cas d'études présentés dans les références [He2010] et [Su2010] ne sont pas représentatifs de l'objet ambitieux de la thèse qui consiste non seulement à traiter des perturbations dont l'amplitude est de trois ordres de grandeur supérieurs à celles de ces références (voir page 115), mais également à transmettre ces incertitudes entre les différents pas de temps d'une étude en évolution.

8. Cet effet contre intuitif sera discuté ultérieurement (Part. III)

9. Cela est dû au fait que l'estimation est réalisée à partir d'un nombre fini de résultats

10. C'est-à-dire faible au regard des erreurs statistiques des différentes réponses

Références

- [Bern1974] W. BERNNAT, “Monte Carlo technique for local perturbation in multiplying systems”, *Proceedings of the NEACRT meeting of a Monte Carlo study group, ANL-75-2*, p. 261-280, juil 1974.
- [Dejo1982] G. DEJONGHE, *Études d’effets différentiels par la méthode de Monte Carlo dans le cadre de l’équation du transport. Applications aux calculs de protection et de neutronique*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1982.
- [Favo2002] J. A. FAVORITE, “An alternative implementation of the differential operator (Taylor series) perturbation method for Monte Carlo criticality problems”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 142, p. 327-341, nov 2002.
- [Favo2009] J. A. FAVORITE, “On the accuracy of the differential operator Monte Carlo perturbation method for eigenvalue problems”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 101, p. 460-462, nov 2009.
- [Hall1980] M. C. HALL, *Monte Carlo perturbation theory in neutron transport calculations*. Thèse de doctorat, University of London, 1980.
- [Hall1982] M. C. HALL, “Cross-section adjustment with Monte Carlo sensitivities : application to the Winfrit iron benchmark”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 81, p. 423-431, 1982.
- [He2010] T. HE ET B. SU, “On using correlated sampling to simulate small changes in system response by MCNP”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 37, p. 34-42, jan 2010.
- [Naga2005] Y. NAGAYA ET T. MORI, “Impact of perturbed source on the effective multiplication factor in Monte Carlo perturbation calculations”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 42, p. 428-441, mai 2005.
- [Naga2011] Y. NAGAYA ET T. MORI, “Calculation of effective delayed neutron fraction with Monte Carlo perturbation techniques”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 38, p. 254-260, fév-mar 2011.
- [Naka1978] M. NAKAGAWA ET T. ASAOKA, “Improvement of correlated sampling Monte Carlo methods for reactivity calculations”, *Nuclear Science and Technology*, vol. 5, p. 400-410, juin 1978.
- [Olho1962] J. E. OLHOEFT, “The doppler effect for a non-uniform temperature distribution in reactor fuel elements”, rapport technique, WCAP-2048, Westinghouse Electric Corporation, Atomic Power Division, Pittsburgh, 1962.
- [Rief1984] H. RIEF, “Generalized Monte Carlo perturbation algorithms for correlated sampling and a second-order Taylor series approach”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 11, no. 9, p. 455-476, 1984.
- [Rief2002] H. RIEF, “Stochastic perturbation analysis applied to neutral particle transport”, *Advances in Nuclear Science and Technology*, vol. 23, p. 69-140, 2002.
- [Span1969] J. SPANIER ET E. M. GELBARD, *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1969.
- [Su2010] B. SU ET T. HE, “Enhanced correlated sampling by source biasing for pin diversion analysis”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 102, p. 220-221, juin 2010.
- [Taka1970] H. TAKAHASHI, “Monte Carlo method for geometrical perturbation and its application to the pulsed fast reactor”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 41, p. 259-270, 1970.

Les codes de calcul Monte Carlo évoluant

L'objectif final de ce travail est d'exploiter la méthode perturbative des échantillons corrélés dans les calculs Monte Carlo en évolution en vue de les accélérer. Les précédents chapitres ont permis de définir clairement le fonctionnement des simulations Monte Carlo et celui de la méthode des échantillons corrélés. Ce chapitre sera donc dédié à la présentation du couplage du transport Monte Carlo avec les codes d'évolution déterministe, ce qui permettra d'expliquer, au chapitre suivant, comment ce type de code peut être accéléré par la méthode des échantillons corrélés.

3.1 Couplage des simulations Monte Carlo et des calculs d'évolution

Depuis quelques années, les codes dits "Monte Carlo évoluant" connaissent un certain essor grâce à l'augmentation constante de la puissance de calcul et des capacités de stockage de données des ordinateurs. Ces codes couplent la simulation du transport des particules par la méthode Monte Carlo et le calcul de l'évolution des compositions sous flux par une méthode déterministe (de type Runge Kutta ou exponentielle de matrice). L'utilisation successive de ces deux méthodes permet de résoudre le système d'équations différentielles couplées que sont l'équation de Boltzmann linéaire à l'état stationnaire (Eq. 3.1) et les équations de Bateman (Eq. 3.2) :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \phi(P) + \Sigma_t(P) \phi(P) = \iint_{0,4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S(P), \quad (3.1)$$

$$\frac{dN^i}{dt}(\vec{r}, t) = \sum_{j \neq i} \tau_{j \rightarrow i}(\vec{r}, t) N^j(\vec{r}, t) + \sum_{j \neq i} \lambda_{j \rightarrow i} N^j(\vec{r}, t) - \tau_d^i(\vec{r}, t) N^i(\vec{r}, t) - \lambda_i N^i(\vec{r}, t), \quad (3.2)$$

où

- $P = (\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ est un point de l'espace des phases,
- $\phi(P)$ est le flux neutronique au point P (en $cm^{-2}.s^{-1}.eV^{-1}.sr^{-1}$),
- $\Sigma_t(P)$ est la section efficace macroscopique totale du matériau au point P (en cm^{-1}),
- $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) dE d\vec{\Omega}$ est la probabilité pour un neutron situé au point \vec{r} et ayant subi une collision à l'énergie E' dans la direction $\vec{\Omega}'$ d'en ressortir dans un intervalle d'énergie dE centré en E et dans un angle solide $d\vec{\Omega}$ autour de $\vec{\Omega}$,
- $S(P)$ est la densité de sources de particules¹ (en $cm^{-3}.s^{-1}.eV^{-1}.sr^{-1}$)

et

- $N^i(\vec{r}, t)$ est la concentration de l'isotope i au point P et à l'instant t (en nombre d'atome par $10^{-24}cm^3$),
- $\tau_{j \rightarrow i}(\vec{r}, t)$ est le taux de réaction microscopique d'alimentation de l'isotope j vers l'isotope i :
 $\tau_{j \rightarrow i}(\vec{r}, t) = \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \sigma_{j \rightarrow i}(E, \vec{\Omega}) \phi(P, t) dE d\vec{\Omega}$ (en s^{-1}),
- $\tau_d^i(\vec{r}, t)$ est le taux de réaction de disparition microscopique de l'isotope i :
 $\tau_d^i(\vec{r}, t) = \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \sigma_d^i(E, \vec{\Omega}) \phi(P, t) dE d\vec{\Omega}$ (en s^{-1}),

1. fixée par l'utilisateur dans un calcul de protection ou les sources de fissions dans un calcul critique

- $\sigma_{j \rightarrow i}(E, \vec{\Omega})$ est la section efficace microscopique d'alimentation de l'isotope j vers l'isotope i (en b),
- $\sigma_d^i(E, \vec{\Omega})$ est la section efficace microscopique de disparition de l'isotope i (en b),
- $\lambda_{j \rightarrow i}$ est la constante de décroissance radioactive de j vers i (en s^{-1}),
- λ_i est la constante de décroissance radioactive de i (en s^{-1}).

La résolution de l'équation (3.1) par la méthode Monte Carlo permet de calculer les taux de réaction du ou des volume(s) évoluant considéré(s). Ces taux sont ensuite normalisés à la puissance du système ou au niveau de flux spécifié par l'utilisateur, puis transmis au solveur d'évolution. Ce dernier résout alors les équations (3.2) sur un pas de temps donné et renvoie les nouvelles concentrations isotopiques pour chacune des régions évoluant au code Monte Carlo. On peut ainsi répéter ce procédé pour le calcul du pas de temps suivant.

3.2 Présentation de TRIPOLI-4 évoluant

TRIPOLI-4 évoluant est un code de calcul Monte Carlo évoluant qui a été entièrement développé au sein du SERMA. Il repose sur le code Monte Carlo TRIPOLI-4 pour la partie transport, et sur le solveur d'évolution MENDEL pour la partie évolution isotopique et son utilisation se fait à travers de scripts prédéfinis écrits en C++ ou de manière interactive à l'aide de l'interpréteur CINT du logiciel ROOT. De plus, il met à profit les nombreuses fonctionnalités de ROOT pour le traitement et la visualisation des résultats.

Le code de transport TRIPOLI-4 ayant déjà été présenté au chapitre 1, nous commencerons dans cette section par présenter le fonctionnement du solveur MENDEL. Nous verrons ensuite les hypothèses de modélisation qui ont été faites dans TRIPOLI-4 évoluant pour résoudre le système d'équations 3.1 et 3.2. Enfin, nous présenterons les schémas d'intégration temporel disponibles dans TRIPOLI-4 évoluant.

3.2.1 Le solveur d'évolution MENDEL

Le solveur d'évolution MENDEL, commun aux projets APOLLO3 et TRIPOLI-4 évoluant, a pour but de déterminer l'évolution temporelle des concentrations isotopiques de chaque milieu évoluant. On désigne par milieu évoluant un sous-ensemble du système (c'est-à-dire un volume ou une union de volumes) pour lequel la composition est supposée homogène et évolue par désintégration isotopique ou par irradiation neutronique. Et lorsqu'un tel milieu est irradié, on suppose également que le flux de particules irradiantes y est homogène.

Dans un milieu évoluant donné, l'évolution des concentrations isotopiques au cours du temps est obtenue par la résolution des équations de Bateman (Eq. 3.2). Celles-ci expriment la variation des concentrations en fonction du temps sous l'effet des réactions neutroniques et des décroissances radioactives. Et comme nous supposons que les conditions initiales sont parfaitement connues, l'évolution des concentrations isotopiques peut être entièrement résolue à partir du calcul des taux de réaction.

3.2.1.1 Hypothèses sur la dépendance en temps des taux de réaction

En réalité, dans les équations de Bateman (Eq. 3.2), les taux de réaction (et le flux neutronique) sont aussi dépendants du temps. Le calcul de l'évolution des concentrations isotopiques nécessite donc de connaître l'évolution temporelle des taux de réaction. Or, dans notre cas, ces grandeurs sont fournies par le code de transport Monte Carlo qui les estime à partir, entre autres, des concentrations isotopiques. La résolution des équations de Bateman nécessite donc une modélisation de l'évolution temporelle des taux de réaction indépendante de l'évolution des concentrations isotopiques.

Pour cela, l'utilisateur doit fournir à MENDEL un découpage temporel prédéfini sur lequel il devra fournir, au début de chaque pas, la valeur des taux de réaction². Ensuite, pour chaque pas de temps, MENDEL effectue une extrapolation de ces taux de réaction sur la durée du pas par une fonction polynomiale d'ordre n , ce qui lui permet de calculer l'évolution des concentrations sur ce pas. Les nouvelles concentrations sont alors disponibles pour le calcul des taux de réaction au début du pas de temps suivant.

2. Dans notre cas, c'est le rôle du code de transport TRIPOLI-4

Remarque :

La modélisation des taux de réaction en polynôme d'ordre n nécessite de connaître les taux de réaction au début du pas de temps courant ainsi que ceux des n pas précédents. Or, dans le cas où le nombre de milieux évoluant ou le nombre d'isotopes évoluant est important, la connaissance de cet historique a un impact non-négligeable sur l'espace mémoire nécessaire au calcul. En général, les codes d'évolution déterministe se limitent à l'ordre 2. Mais, comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, dans TRIPOLI-4 évoluant les taux de réaction sont toujours considérés comme constants sur chaque pas de temps (c'est-à-dire que l'on impose $n = 0$). Néanmoins, nous verrons aussi que différents schémas d'intégration temporelle sont disponibles pour modéliser autrement la variation du flux et des taux de réaction sur chaque pas de temps.

De plus, on remarque que la qualité de l'approximation des taux de réaction en polynômes d'ordre n dépend fortement de la finesse du découpage temporel. En cas de modification brutale des taux de réaction, cette modélisation s'éloigne de la réalité physique. La réduction de la taille des pas de temps est alors la seule option envisageable.

3.2.1.2 Méthodes de résolution

Deux approches, l'une analytique, l'autre numérique, sont implémentées dans MENDEL pour résoudre les équations de Bateman.

La première consiste à déterminer les solutions exactes des équations de Bateman de façon analytique. Cette approche est très performante mais n'est réalisable que dans certains cas. En notant les équations de Bateman sous forme matricielle :

$$\frac{d}{dt}N(P, t) = A(P) N(P, t), \quad (3.3)$$

où

- $N(P, t)$ est le vecteur isotopique, dont la $i^{\text{ème}}$ composante vaut $N^i(P, t)$,
- $A(P)$ est la matrice d'évolution, dont l'élément de la $i^{\text{ème}}$ ligne et $j^{\text{ème}}$ colonne vaut :
 $A_{ij}(P) = \tau_{j \rightarrow i}(P) + \lambda_{j \rightarrow i}$ si $i \neq j$ et $A_{ij}(P) = -\tau_d^i(P) - \lambda_i$ dans le cas contraire,

on montre que cette approche n'est possible que lorsque $A(P)$ est trigonalisable. Typiquement cette approche est utilisée dans les problèmes de refroidissement pur où l'on peut toujours trouver un ordonnancement des isotopes du milieu évoluant de sorte que les concentrations des isotopes pères soient calculées avant celles de leurs fils.

La seconde approche consiste à calculer des solutions approchées à partir des conditions initiales à l'aide d'une méthode numérique. Cette approche a été implémentée dans MENDEL en utilisant la méthode d'intégration de Runge-Kutta d'ordre 4.

3.2.1.3 Données nécessaires au fonctionnement du solveur

Outre les taux de réaction, les concentrations isotopiques initiales et le découpage temporel, il faut fournir à MENDEL les différents composants de la matrice d'évolution qui correspondent aux données de filiations existant entre l'ensemble des isotopes (c'est-à-dire les différentes constantes de décroissance radioactive et la liste, par isotope, des réactions d'alimentation et de disparition). L'ensemble de ces données est appelé chaîne de filiation, ou encore chaîne d'évolution, et est transmise à MENDEL au moyen d'un fichier rempli par l'utilisateur.

Remarque :

Lors de tous les calculs qui seront présentés dans ces travaux, une unique chaîne d'évolution contenant 160 isotopes a été utilisée. Celle-ci provient du code de calcul déterministe APOLLO2 et à été construite pour optimiser le temps de calcul en évolution tout en assurant une bonne précision sur l'estimation des grandeurs physiques les plus importantes (criticalité, empoisonnement, toxicité, ...). Ainsi, cette chaîne prend en compte 99,9 % de l'anti-réactivité des produits de fission dans les réacteurs à eau légère et modélise aussi les produits de fission importants des réacteurs à neutrons rapides. Et pour améliorer la précision des calculs, elle se passe totalement de l'utilisation de pseudo-produits de fission³. De plus, cette chaîne traite correctement la cinétique

3. Ce sont des éléments fictifs que l'on ajoute pour tenir compte des produits de fission non représentés explicitement dans la chaîne d'évolution

d’empoisonnement et permet d’estimer précisément le k_{eff} après un refroidissement long⁴.

3.2.2 Hypothèses physiques et modélisation de TRIPOLI-4 évoluant

Pour résoudre le système d’équations 3.1 et 3.2, plusieurs hypothèses de modélisations sont nécessaires et nous présentons ici celles qui ont été choisies dans TRIPOLI-4 évoluant.

3.2.2.1 Calcul des taux de réaction

Le transport se fait de façon ponctuelle en énergie, avec ou sans utilisation des tables de probabilité, et peut fournir les taux de réactions selon différents niveaux d’approximations. Le meilleur niveau d’approximation est obtenu par un calcul ponctuel des taux de réactions pour chacun des isotopes présents dans la chaîne d’évolution et dans chacune des compositions évoluant par TRIPOLI-4. Cela permet d’accroître la précision du calcul, mais le nombre de scores à calculer par TRIPOLI-4 peut conduire à des temps de calculs prohibitifs liés à l’encaissement d’un très grand nombre de scores⁵. Une autre stratégie consiste à déléguer l’estimation des taux de réaction, en totalité ou en partie, à MENDEL qui les reconstruit à partir des flux multigroupes calculés ponctuellement par TRIPOLI-4 et des sections efficaces microscopiques multigroupes correspondantes (GENDF). Moyennant cette approximation multigroupe (Eq. 3.4), le calcul peut être considérablement accéléré. Ces taux de réactions multigroupes sont calculés selon l’équation suivante :

$$\tau_r^i(P) = \int_0^\infty \sigma_r^i(E) \phi(P) dE \sim \sum_{g=1}^G \left(\sigma_{r,g}^i \int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(P) dE \right), \quad (3.4)$$

où

- $\tau_r^i(P)$ est le taux de réaction microscopique de l’interaction r sur l’isotope i (en $b.cm^{-2}.s^{-1}.sr^{-1}$),
- $\sigma_r^i(E)$ est la section efficace microscopique de la réaction r de l’isotope i (en b),
- $\phi(P)$ est le flux neutronique au point P (en $cm^{-2}.s^{-1}.eV^{-1}.sr^{-1}$),
- G est le nombre de groupe en énergie,
- $\sigma_{r,g}^i$ est la section efficace microscopique multigroupe de la réaction r de l’isotope i et du groupe g , pondérée par une fonction f arbitrairement choisie, soit :

$$\sigma_{r,g}^i = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} f(E) \sigma_r^i(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g+1}} f(E) dE}.$$

La qualité des sections efficaces microscopiques multigroupes dépendent donc du choix de la fonction f , mais aussi de la finesse du maillage énergétique. Les fichiers GENDF utilisés dans ces travaux ont été produits sur un maillage énergétique à 11514 groupes et avec une fonction de pondération uniforme (c’est-à-dire que $\forall E, f(E) = 1$). En pratique, avec ces fichiers GENDF, on constate que l’approximation 3.4 n’induit pas d’erreurs significatives dans les études impliquant du combustible REP (l’erreur induite par cette approximation sur l’estimation de l’évolution des concentrations isotopiques reste inférieure à leur erreur statistique), sauf pour les taux de réaction de l’isotope ^{238}U . En effet, les sections efficaces neutroniques de ce noyau possèdent de nombreuses résonances dans les domaines non-résolu et épithermique. Celles-ci sont difficilement reproductibles à partir de sections efficaces multigroupes à 11514 groupes, d’autant plus que les calculs effectués à partir des sections multigroupes ne peuvent utiliser la représentation des sections efficaces par tables de probabilité. De ce fait, pour d’obtenir un bon compromis entre la précision des résultats et le temps de calcul, les simulations incluant du combustible REP calculent généralement les taux de réactions de ^{238}U à partir des sections efficaces ponctuelles en énergie et ceux des autres noyaux à partir des fichiers GENDF. Toutefois, pour les études n’incluant pas ce type de combustible, l’approximation multigroupe peut aussi avoir un impact sur la concentration d’autres isotopes. Cela ne sera pas traité ici car on verra dans la partie IV que seuls les combustibles REP seront étudiés ici.

4. De l’ordre de 25 ans par exemple

5. Par exemple, dans le premier cas test où il n’y a que 6 régions évoluant, les taux de réaction calculés par TRIPOLI-4 représentent 2406 scores.

3.2.2.2 Discrétisation en espace et en temps

Si toutes les grandeurs d'intérêt varient de manière continue en espace et en temps, dans les simulations les taux de réaction et le flux sont considérés uniformes en espace, dans chacun des milieux évoluant, et constants en temps. Il faut donc discrétiser suffisamment finement l'espace et le temps pour ne pas avoir d'erreurs systématiques trop importantes, sans toutefois pénaliser la simulation par un temps de calcul trop important. En effet, le temps de calcul d'une simulation Monte Carlo dépend du nombre de scores à calculer. Or celui-ci est proportionnel au nombre de milieux évoluant. De plus, le nombre d'appel au code Monte Carlo est quant à lui proportionnel au nombre de pas de temps. La finesse de la discrétisation de l'espace et du temps est donc directement liée au temps de calcul.

De plus, la discrétisation temporelle peut être exprimée soit en temps (en s), soit en taux d'irradiation ou taux de combustion (en MWj/t : Mégawatts jours par tonne de métal lourd initial).

3.2.3 Schémas temporels définis dans les scripts d'évolution

Comme les équations de Bateman sont d'ordre 1 en temps, on utilise une approximation discrète de la dérivée temporelle. Pour cela, des schémas temporels, un d'ordre 1 et deux d'ordre 2⁶, sont implémentés dans TRIPOLI-4 évoluant. Les flux et les taux de réaction y sont considérés constants, mais ils sont recalculés, dans les schémas d'ordre 2, après une première évolution. Cela permet de vérifier si la discrétisation utilisée est suffisamment fine. Bien entendu, l'utilisateur est libre d'utiliser le schéma qu'il souhaite, et comme les scripts implémentant ces méthodes sont modifiables, il peut aussi définir et exploiter son propre schéma.

La méthode d'Euler explicite est le premier schéma temporel disponible dans TRIPOLI-4 évoluant. Il est utilisable à travers un script de lancement ROOT et est aujourd'hui le schéma le plus fréquemment utilisé. Ce schéma d'ordre 1 calcule à chaque pas en temps les flux et/ou les taux de réactions avec TRIPOLI-4 puis transmet ces résultats à MENDEL qui effectue un calcul d'évolution pour obtenir la liste des concentrations isotopiques à la fin du pas de temps. Cette méthode peut être résumée par l'algorithme 3.1.

Concernant les schémas d'ordre 2, deux méthodes sont disponibles par défaut dans TRIPOLI-4 évoluant. Le premier, dit "du point milieu", est basé sur l'hypothèse que les flux et taux de réactions au milieu du pas de temps sont plus représentatifs que ceux calculés au début du pas par la méthode d'Euler explicite. Cette méthode découpe alors chaque pas de temps en 2 et effectue une première évolution jusqu'au milieu du pas. Un nouveau calcul de transport est alors effectué à partir des concentrations du milieu de l'intervalle temporel, puis les flux et taux de réactions sont transmis au solveur d'évolution qui finalise le calcul en utilisant les concentrations isotopiques en début du pas. L'algorithme de ce schéma (Alg. 3.2) est présenté en page 42.

Le second schéma, dit "de la moyenne", réalise la moyenne entre une évolution basée sur les flux et taux du début du pas en temps et une évolution calculée à partir des flux et taux de la fin du pas en temps. La première évolution est identique à celle effectuée par la méthode d'Euler explicite et la seconde se base sur les résultats du premier calcul pour estimer les flux et taux de réactions à la fin du pas de temps. Cette méthode peut s'écrire selon l'algorithme 3.3, présenté en page 42.

Ces deux schémas d'ordre 2 sont plus précis que la méthode d'Euler explicite ce qui leur permet d'utiliser une discrétisation temporelle moins fine. Il nécessite en contre partie deux calculs de transport à chaque pas de temps. Ils sont alors souvent utilisés pour vérifier que la discrétisation en temps du schéma d'Euler explicite soit suffisamment fine.

Remarque :

Les algorithmes des trois schémas fournis avec TRIPOLI-4 évoluant sont présentés sur la page 42. Mais par soucis de lisibilité, la variable d'espace a été omise. Ainsi, $\{N^i\}_{(t)}$ représente l'ensemble des concentrations isotopiques de chacune des compositions à l'instant t , tout comme $\{\phi, \tau\}_{(t+\delta t)}$ représente l'ensemble des flux et

6. Un schéma d'ordre n est une méthode numérique permettant la résolution d'équations différentielles en approximant la ou les dérivées de l'équation par un développement de Taylor à l'ordre n . Si ce développement permet à chaque pas de temps de trouver la solution à partir des valeurs des pas de temps précédents, alors le schéma sera dit "explicite". Dans le cas contraire, il sera dit "implicite".

Algorithme 3.1 La méthode d'Euler explicite (ordre 1).

ENTRÉE : $\{N^i\}_{(t=0)}$, T , δt ▷ Etat initial, découpage temporel

procédure EULER EXPLICITE($0, T, \delta t$)

pour $t = 0$ **jusqu'à** T **faire**

$\{\phi, \tau\}_{(t)} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t)} \right]$ ▷ Transport

$\{N^i\}_{(t+\delta t)} \leftarrow \text{MENDEL} \left[\{N^i\}_{(t)}, \{\phi, \tau\}_{(t)}, \delta t \right]$ ▷ Evolution

$t \leftarrow t + \delta t$

fin pour

fin procédure

SORTIE : $\forall t \in [0; T], \{N^i\}_{(t)}$ ▷ Etat à chaque pas de temps

Algorithme 3.2 La méthode du point milieu (ordre 2).

ENTRÉE : $\{N^i\}_{(t=0)}$, T , δt

procédure POINT MILIEU($0, T, \delta t$)

pour $t = 0$ **jusqu'à** T **faire**

$\{\phi, \tau\}_{(t)} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t)} \right]$ ▷ Transport initial

$\{N^i\}_{(t+\delta t/2)} \leftarrow \text{MENDEL} \left[\{N^i\}_{(t)}, \{\phi, \tau\}_{(t)}, \frac{\delta t}{2} \right]$ ▷ Evolution sur la moitié du pas

$\{\phi, \tau\}_{(t+\delta t/2)} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t+\delta t/2)} \right]$ ▷ Nouveau transport basé sur l'évolution précédente

$\{N^i\}_{(t+\delta t)} \leftarrow \text{MENDEL} \left[\{N^i\}_{(t)}, \{\phi, \tau\}_{(t+\delta t/2)}, \delta t \right]$ ▷ Utilisation du transport à mi-chemin

$t \leftarrow t + \delta t$

fin pour

fin procédure

SORTIE : $\forall t \in [0; T], \{N^i\}_{(t)}$

Algorithme 3.3 La méthode de la moyenne (ordre 2).

ENTRÉE : $\{N^i\}_{(t=0)}$, T , δt

procédure MOYENNE($0, T, \delta t$)

pour $t = 0$ **jusqu'à** T **faire**

$\{\phi, \tau\}_{(t)} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t)} \right]$ ▷ Transport initial

$\{N^i\}_{(t+\delta t)}^f \leftarrow \text{MENDEL} \left[\{N^i\}_{(t)}, \{\phi, \tau\}_{(t)}, \delta t \right]$ ▷ Première évolution

$\{\phi, \tau\}_{(t+\delta t)} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t+\delta t)}^f \right]$ ▷ Nouveau transport basé sur l'évolution précédente

$\{N^i\}_{(t+\delta t)}^b \leftarrow \text{MENDEL} \left[\{N^i\}_{(t)}, \{\phi, \tau\}_{(t+\delta t)}, \delta t \right]$ ▷ Seconde évolution

$\{N^i\}_{(t+\delta t)} \leftarrow \frac{1}{2} \left(\{N^i\}_{(t+\delta t)}^f + \{N^i\}_{(t+\delta t)}^b \right)$ ▷ Moyenne des résultats d'évolution

$t \leftarrow t + \delta t$

fin pour

fin procédure

SORTIE : $\forall t \in [0; T], \{N^i\}_{(t)}$

taux de réaction à l'instant $t + \delta t$ sur tout l'espace des phases. Pour la même raison, l'intervalle de temps δt semble constant d'un pas à l'autre, alors qu'il ne l'est pas car le découpage temporel n'est pas nécessairement uniforme.

3.3 Estimation des erreurs systématiques et statistiques

3.3.1 Identification et correction des erreurs systématiques

L'ensemble des hypothèses de modélisation faites jusqu'ici ne permet pas d'obtenir un résultat avec une barre d'erreur statistique comme dans une simulation Monte Carlo classique. En effet, comme le solveur d'évolution utilise une méthode déterministe, il n'exploite que les valeurs moyennes des taux de réaction et ne renvoie qu'une valeur de concentration pour chaque isotope de chaque milieu évoluant. Le solveur d'évolution ne permet donc pas de propager les erreurs statistiques.

En revanche, ces hypothèses génèrent différentes erreurs systématiques dues aux discrétisations en espace, en temps et en énergie et au nombre fini de particules simulées. Chacune d'entre elles est à l'origine d'erreurs systématiques qui peuvent être identifiées :

- **Le maillage spatial**

Les compositions isotopiques, tout comme la quasi-totalité des scores calculés, varient continûment en espace, mais ils sont supposés uniformes sur chacune des compositions. Il faut donc que le maillage spatial soit suffisamment fin pour que l'erreur systématique générée par cette hypothèse soit négligeable.

- **Le maillage temporel**

Entre chaque pas du maillage temporel, tous les scores varient continûment, mais on fait l'hypothèse que le pas de temps est suffisamment fin pour que les scores puissent y être considérés comme constants. Afin de limiter l'erreur systématique due à cette hypothèse, des algorithmes d'ordre 2 en temps peuvent être utilisés. Mais leurs succès sont toujours discutables puisqu'ils dérivent des schémas de calcul déterministes et que leur utilisation dans le cadre de calcul stochastique n'a pas d'assise théorique. D'ailleurs, certains calculs utilisant des méthodes de type point milieu ont présenté de très fortes erreurs systématiques [Dufe2009].

- **Le maillage énergétique**

Les taux de réaction construits à partir d'un flux multigroupe sont biaisés à cause de l'utilisation des sections efficaces microscopiques multigroupes

- **Simulation d'un nombre de particules fini**

L'estimation des flux et taux de réactions se fait en simulant un nombre fini de particules. La variance des résultats est donc non-nulle. Et comme les équations de Bateman ne sont pas linéaires, l'estimation des concentrations isotopiques à partir des moyennes des flux et des taux de réaction est biaisée.

Dans la limite où la finesse des différents maillages est infiniment petite et le nombre de particules simulées infiniment grand, les résultats des calculs Monte Carlo évoluant restent non-biaisés. Mais la finitude de ces valeurs induit en revanche des biais qui se propagent de pas en pas dont l'impact reste difficile à mesurer. Et bien que des études récentes ont pu aboutir à la correction du biais dû au nombre de particules fini [Dumo2009, Dumo2011, Brun2011, Brun2012], le traitement des autres sources d'erreurs fait toujours l'objet de travaux de recherche.

3.3.2 Propagation des erreurs statistiques

A chaque pas de temps, le calcul de transport fournit les flux et/ou taux de réactions avec leurs erreurs statistiques. Comme celles-ci ne sont pas propagées lors du calcul d'évolution, la plupart des codes Monte Carlo évoluant ne peut fournir une estimation de l'incertitude sur les différentes grandeurs calculées. Et si l'on peut faire raisonnablement l'hypothèse que les concentrations isotopiques sont parfaitement connues lors de l'initialisation, cela n'est plus vrai pour les pas de temps suivants. L'erreur sur ces données n'étant généralement pas prise en compte, leurs impacts ne peuvent pas être estimés. Or cet effet peut s'avérer être non-négligeable après un certain nombre d'itérations [Take1999, Garc2008].

La prise en compte de ces erreurs est néanmoins possible en utilisant des méthodes perturbatives pour calculer les coefficients de sensibilités des différentes sources d'erreurs [Ivan1998, Take1999, Ivan2005, Tohj2006, Shim2007, Garc2008, Hoog2008, Shim2008, Shim2011], ou en s'appuyant sur le théorème central-limite et en découplant la simulation Monte Carlo évoluant en plusieurs simulations indépendantes [Tohj2006, Brun2012].

Cette dernière méthode a été développée dans TRIPOLI-4 évoluant pour estimer correctement l'incertitude sur le calcul de l'inventaire isotopique à chaque pas de temps. Nommée "brute force" ou des répliques indépendantes, cette méthode consiste en réalité à généraliser le principe de la méthode Monte Carlo à l'ensemble du couplage Monte Carlo évoluant. Lors de son utilisation, les différentes simulations indépendantes ont alors le même jeu de données en entrée mais leurs générateurs de nombres aléatoires sont initialisés avec une graine unique. Ainsi, toutes les grandeurs calculées, telles que la concentration de chaque isotope dans chaque composition évoluant, sont fournies avec une erreur statistique tout au long de l'irradiation, sans approximation supplémentaire. Les résultats obtenus sont alors de meilleure qualité car chacune des grandeurs calculées est associée à une erreur statistique et donc à un intervalle de confiance.

Enfin, on peut remarquer que cette méthode pourrait être généralisée en fournissant à chaque simulation un jeu de donnée unique dont les paramètres seraient échantillonnés selon leur incertitude, pour mesurer l'effet de toutes les hypothèses de calcul. Cela permettrait par exemple de tenir compte de l'incertitude sur les données nucléaires [Roch2011].

Références

- [Brun2011] E. BRUN, E. DUMONTEIL et F. MALVAGI, “Systematic uncertainty due to statistics in Monte Carlo burnup codes : Application to a simple benchmark with TRIPOLI-4-D”, *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, p. 879-885, 2011.
- [Brun2012] E. BRUN ET E. DUMONTEIL, “Guide d’utilisation de TRIPOLI-4 Evoluant Version 1.1”, rapport technique, CEA Saclay, Référence DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD/RT/12-5307/A, 2012.
- [Dufe2009] J. DUFEK ET J. E. HOOGENBOOM, “Numerical stability of existing Monte Carlo burnup codes in cycle calculations of critical reactors”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 162, p. 307-311, 2009
- [Dumo2009] E. DUMONTEIL et C. M. DIOP, “Unbiased minimum variance estimator of a matrix exponential function. Application to Boltzmann/Bateman coupled equations solving”, *International Conference on Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics*, 2009.
- [Dumo2011] E. DUMONTEIL et C. M. DIOP, “Biases and statistical errors in Monte Carlo burnup calculations : An unbiased stochastic scheme to solve Boltzmann/Bateman coupled equations”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, p. 165-170, fév 2011.
- [Garc2008] N. GARCÍA-HERRANZ, O. CABELLOS, J. SANZ, J. JUAN ET J. C. KUIJPER, “Propagation of statistical and nuclear data uncertainties in Monte Carlo burn-up calculations”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 35, p. 714-730, avr 2008.
- [Hoog2008] J. E. HOOGENBOOM, “Uncertainty propagation in Monte Carlo burn-up calculations - State of the art report”, rapport technique, DNC102/08, 2008.
- [Ivan1998] E. A. IVANOV, “Method of estimating the sensitivity of a calculated nuclide vector to deviations in initial data”, rapport technique, IAEA report INDC(CCP)-418, déc 1998.
- [Ivan2005] E. A. IVANOV, “Error propagation in Monte Carlo burn-up calculations”, *International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, 2005.
- [Roch2011] D. ROCHMAN, A. J. KONING, S. C. VAN DER MARCK, A. HOGENBIRK ET C. M. SCIOLLA, “Nuclear data uncertainty propagation : Perturbation vs. Monte Carlo”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 38, p. 942-952, mai 2011.
- [Shim2007] H. J. SHIM, H. J. PARK ET C. H. KIM, “Error propagation in Monte Carlo depletion analysis”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 96, p. 582-584, 2007.
- [Shim2008] H. J. SHIM, H. J. PARK, H. G. JOO, Y. IL KIM ET C. H. KIM, “Uncertainty propagation in Monte Carlo depletion analysis”, *International Conference on the Physics of Reactors*, 2008.
- [Shim2011] H. J. SHIM, H. J. PARK ET C. H. KIM, “Uncertainty propagation in Monte Carlo depletion analysis”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, p. 196-208, 2011.
- [Take1999] T. TAKEDA, N. HIROKAWA ET T. NODA, “Estimation of error propagation in Monte Carlo burnup calculations”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 36, p. 738-745, sep 1999.
- [Tohj2006] M. TOHJOH, T. ENDO, M. WATANABE ET A. YAMAMOTO, “Effect of error propagation of nuclide number densities on Monte Carlo burn-up calculations”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 33, p. 1424-1436, 2006.

Accélération des calculs en évolution avec l'échantillonnage corrélé

4.1 Présentation de l'algorithme

L'apparition des codes Monte Carlo évoluant a permis d'introduire tous les avantages de la méthode Monte Carlo dans les calculs en évolution (peu d'hypothèses de modélisation, traitement des géométries complexes, ...), mais aussi son principal inconvénient : le temps de calcul. En effet, la principale contrainte de ces codes réside dans l'utilisation répétée du code Monte Carlo (à chaque phase de transport) qui engendre un coût considérable en terme d'utilisation des ressources informatiques.

Pour ne pas freiner l'utilisation de ce type de codes, on propose dans ces travaux de mettre en œuvre une alternative originale qui consiste à considérer que les transports successifs n'induisent que des perturbations sur les concentrations. Il serait donc possible d'utiliser une technique perturbative, telle que l'échantillonnage corrélé, pour remplacer toutes les séquences de transport (coûteuses en temps) au prix de la sauvegarde des traces du premier et unique transport Monte Carlo. Ceci engendre quelques contraintes sur l'utilisation du code Monte Carlo évoluant, mais permet d'améliorer sensiblement le temps de calcul. Par exemple, les références [Mori2002, Mori2003] montrent que l'utilisation d'une technique de réduction de variance (appelée "pseudo-scattering") associée à l'échantillonnage corrélé permet, dans certains cas, de diminuer jusqu'à un facteur 100 le temps de calcul du k_{eff} d'un assemblage combustible durant quelques dizaines de GWj/t ¹. On peut donc espérer améliorer la figure de mérite d'une simulation Monte Carlo évoluant en la construisant intégralement à partir d'un unique transport Monte Carlo perturbé avec une méthode telle que l'échantillonnage corrélé.

La suite de ce chapitre présente les détails de la mise en œuvre et les contraintes de cette technique dans TRIPOLI-4 évoluant.

4.2 Couplage avec la plateforme d'évolution de TRIPOLI-4

4.2.1 Introduction d'une méthode perturbative dans les schémas d'évolution

Comme cela a été expliqué au début de ce chapitre, on souhaite remplacer les différents calculs de transport par des perturbations en concentration de la première et unique simulation Monte Carlo. Mais comme les paramètres des perturbations dépendent des concentrations isotopiques (qui ne peuvent être connus au moment de la simulation²), il faut sauvegarder les données de la première simulation et les exploiter dans la suite de l'évolution. Pour cela, TRIPOLI-4 est doté d'un module lui permettant d'enregistrer les traces au format ROOT³, format dans lequel les scripts d'évolution sont eux aussi développés. Il semble donc intéressant d'exploiter ce format d'externalisation des traces pour faciliter l'implémentation de cette nouvelle méthode au sein des scripts

1. Il n'y a pas de considérations sur la figure de mérite dans ces références.
2. Car ce sont les grandeurs que l'on cherche à estimer!
3. Les détails de cette "externalisation" seront exposés à la fin de ce chapitre.

d'évolution. De plus, cette nouvelle méthode de perturbation des calculs en évolution est indépendante du schéma temporel utilisé car, dans tous les schémas, elle consiste à remplacer l'ensemble des phases de transport par une perturbation en concentration du jeu de traces initial. Nous nous concentrerons donc uniquement sur l'intégration de cette méthode au sein du schéma "Euler explicite", dont l'algorithme est donné par l'Alg. 4.1.

4.2.2 Sélection de la méthode perturbative

Il reste à présent à définir la technique perturbative à utiliser. Pour ne pas introduire d'approximations supplémentaires dans les calculs perturbés, on a choisi d'implémenter la méthode des échantillons corrélés au sein de ce schéma innovant. Cette méthode a l'avantage de fournir un résultat correct (au sens où les résultats sont non biaisés, c'est-à-dire toujours vrais en moyenne), mais en contrepartie elle possède une contrainte sur son utilisation. Il faut que tous les événements observables dans la situation perturbée aient lieu lors de la simulation initiale (voir Chap. 2). Cela signifie qu'au cours d'une évolution, on ne peut pas modifier la géométrie du système entre deux pas en temps perturbés, ni introduire de nouveaux isotopes. Si dans beaucoup d'études la première condition est vérifiée (la géométrie n'est pas modifiée), c'est la seconde condition qui peut s'avérer problématique. En effet, durant la première phase de l'évolution des produits de fissions et de désintégration apparaissent. Ainsi, l'enregistrement des traces de la simulation au premier pas de temps ne permet pas de calculer par échantillonnage corrélé les grandeurs d'intérêt aux pas de temps suivants (car des biais apparaîtraient dans le calcul). La principale restriction de cette méthode est donc l'impossibilité de démarrer les perturbations tant que, d'un pas perturbé à un autre, des éléments sont produits.

Par conséquent, on est amené à modifier l'algorithme du schéma perturbé pour tenir compte de ces contraintes. L'utilisateur de ce schéma doit alors indiquer, en plus du découpage temporel, à quel moment le schéma perturbé doit démarrer, c'est-à-dire à quel moment l'ensemble des isotopes de la chaîne d'évolution est apparu dans l'ensemble des milieux évoluant. De plus, comme nous le verrons dans les chapitres dévolus aux études (Part. IV), l'introduction de l'échantillonnage corrélé induit une augmentation de la variance des résultats au fur et à mesure de l'évolution. Cela est dû à la non-représentativité des traces enregistrées lorsque les perturbations sont trop fortes. On introduit alors dans le schéma perturbé la possibilité de régénérer des traces à intervalles réguliers pour limiter la dégradation de la variance. Au final, on exécute un schéma temporel perturbé en indiquant deux paramètres supplémentaires (que l'on cherchera à optimiser dans la partie IV)

1. T_i le temps (ou le taux d'irradiation) à partir duquel les phases de transport seront remplacées par la perturbation d'un jeu de traces
2. ΔT_p l'intervalle de temps (ou de taux d'irradiation) durant lequel un jeu de traces peut être utilisé

La donnée de ces deux paramètres permet d'implémenter un algorithme générique introduisant la méthode des échantillons corrélés au sein d'un schéma temporel quelconque. Dans cet algorithme, schématisé par l'Alg. 4.2, le calcul est initialisé en utilisant un schéma non-perturbé jusqu'au temps T_i . A l'issue de cette première phase, tous les isotopes de la chaîne d'évolution sont apparus dans les différents milieux évoluant. Un transport TRIPOLI-4 génère alors un jeu de traces qui sera perturbé pendant l'intervalle de temps ΔT_p pour remplacer les différents transports Monte Carlo de cet intervalle. A la fin de ce dernier, c'est-à-dire au temps $T_i + \Delta T_p$, un nouveau jeu de traces est produit par TRIPOLI-4 et sera perturbé pendant le même intervalle de temps ΔT_p . On recommence ainsi jusqu'à la fin de l'évolution⁴.

Les gains obtenus par ce schéma perturbé dépendent des paramètres d'entrée définis par l'utilisateur (T_i et ΔT_p). Plusieurs études seront présentées dans la partie IV afin d'optimiser la valeur de ces paramètres pour obtenir un gain maximum.

Remarque :

De même que pour l'intervalle de temps δt séparant deux pas du maillage temporel, l'intervalle ΔT_p n'est pas nécessairement constant durant l'évolution. L'utilisateur est libre de le faire évoluer entre deux phases d'utilisation des perturbations, mais cela n'est pas indiqué sur l'Alg. 4.2 par soucis de lisibilité.

4. Bien sûr, si la fin de l'évolution est atteinte avant la fin d'un intervalle ΔT_p sur lequel on perturbe un jeu de traces, le calcul est stoppé. Le schéma perturbé n'est pas employé au delà de la durée de l'évolution indiquée par l'utilisateur. Cela n'est pas indiqué sur l'Alg. 4.2 par soucis de lisibilité, mais est bien respecté en pratique.

Algorithme 4.1 Remplacement des séquences successives de transports par des perturbations en concentration du jeu de traces initial.

ENTRÉE : $\{N^i\}_{(t=0)}$, T , δt
 $\{\gamma_{(t=0)}\} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t=0)} \right]$ ▷ Création des traces
procédure EULER EXPLICITE PERTURBÉ(0, T , δt , $\{\gamma_{(t=0)}\}$)

pour $t = 0$ **jusqu'à** T **faire**
 $\{\phi, \tau\}_{(t)} \leftarrow \text{PERTURBATION} \left[\{\gamma_{(t=0)}\}, \{N^i\}_{(t)} \right]$ ▷ Remplacement du transport
 $\{N^i\}_{(t+\delta t)} \leftarrow \text{MENDEL} \left[\{N^i\}_{(t)}, \{\phi, \tau\}_{(t)}, \delta t \right]$
 $t \leftarrow t + \delta t$
fin pour
fin procédure
SORTIE : $\forall t \in [0; T], \{N^i\}_{(t)}$

Algorithme 4.2 Prise en compte de l'apparition des isotopes et de la dégradation des erreurs statistiques dans le remplacement des phases de transport par des perturbations.

ENTRÉE : $\{N^i\}_{(t=0)}$, T , δt , $T_i < T$, ΔT_p
 $t \leftarrow 0$
procédure <SCHÉMA TEMPOREL>(0, T_i , δt) ▷ Initialisation sans perturbation
fin procédure
 $t \leftarrow T_i$
▷ Début de l'évolution perturbée
tant que $t < T$ **faire**
 $\{\gamma_{(t)}\} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N^i\}_{(t)} \right]$ ▷ Création de traces tous les ΔT_p
procédure <SCHÉMA PERTURBÉ>(t, $t + \Delta T_p$, δt , $\{\gamma_{(t)}\}$)

fin procédure
 $t \leftarrow t + \Delta T_p$
fin tant que
SORTIE : $\forall t \in [0; T], \{N^i\}_{(t)}$

Avant de présenter plus en détail l'implémentation de ce nouveau schéma, on peut remarquer que la contrainte de l'échantillonnage corrélé peut s'avérer être extrêmement forte dans certaines études. En effet, si au cours de l'évolution des isotopes apparaissent à chaque pas en temps, l'utilisateur ne peut jamais démarrer les perturbations. Il faut alors envisager d'utiliser autrement la méthode des échantillons corrélés. Mais avant de résoudre ce problème, il vaut mieux d'abord maîtriser l'impact de cette méthode de perturbation dans les calculs en évolution. Cela permettra de trouver une solution à cette contrainte qui soit adaptée à la méthode des échantillons corrélés. Dans la suite de ces travaux, on considèrera donc que l'ensemble des isotopes apparaît au début de l'évolution ou que le schéma perturbé est applicable sur une large durée de l'évolution. Une fois que les premières études auront été analysées, on cherchera à mettre en place une alternative permettant d'utiliser l'échantillonnage corrélé même lorsque des isotopes apparaissent (voir Part. IV, Chap. 8).

4.3 Développement d'une librairie de post-traitement : TRIPOLI-4 ROOT-Tools

4.3.1 Présentation du projet

A mon arrivée en thèse, un outil de post-traitement des données générées par TRIPOLI-4 avait déjà été développé (sous ROOT) suite à l'externalisation des traces au format ROOT de TRIPOLI-4. Cet outil avait pour objectif principal de post-traiter les différents résultats obtenus avec TRIPOLI-4 pour accroître les possibilités d'études des utilisateurs en simplifiant la manipulation d'outils poussés d'analyse et de visualisation des résultats. Ce projet, appelé TRIPOLI-4-ROOT-Tools, constituait donc une base idéale pour développer tous les outils nécessaires à l'implémentation du schéma perturbatif dans les scripts d'évolution. Néanmoins, une refonte totale du code source était requise pour offrir l'ensemble des fonctionnalités et des performances suffisantes aux calculs en évolution. Le contenu des traces a lui aussi été enrichi et désormais, pour chaque événement simulé, le fichier de trace stocke les informations suivantes :

1. Le type de l'évènement (naissance, collision, franchissement d'interface, ..)
2. Le lieu de l'évènement l'espace des phases (c'est-à-dire les coordonnées spatio-temporelles et l'énergie de l'évènement)
3. Les poids avant et après collision (si l'évènement est une collision)
4. Le noyau choqué (si l'évènement est une collision)
5. Les noms et indices des volumes et compositions où se trouve l'évènement

De plus, les événements d'une même particule sont regroupés et associés aux numéros de la particule et du cycle dans lequel elle a été simulée. Et lorsqu'une particule est issue d'une autre (par fission ou par splitting par exemple), le numéro de la particule "mère" est associée à celui de la "fille". Enfin, pour normaliser correctement les scores, quelques informations relatives aux paramètres de simulation (nombre de cycles, nombre de particules par cycles, ...) sont aussi intégrées au fichier de traces.

4.3.2 Architecture du projet

La partie principale du projet ROOT-Tools regroupe un ensemble de bibliothèques qui ont été compilées pour fonctionner avec ROOT. En réalité, ROOT est plus qu'un framework puisqu'il est interfacé avec l'interpréteur C++ CINT pour que chacune de ses composantes puisse être utilisée dans des scripts exécutés par CINT. Ces différents composants (près d'une centaine) sont compilés dans des bibliothèques partagées que CINT charge au gré des besoins de l'utilisateur. Les composants de ROOT-Tools ont été développés de la même façon pour être disponibles facilement dans des scripts ROOT, et donc dans ceux de l'évolution.

La partie principale du projet a donc été séparée en 6 bibliothèques dont je vais présenter les fonctionnalités majeures.

libCoreTools

A l'instar de la bibliothèque libCore de ROOT, libCoreTools contient tous les éléments de base utilisés par les autres bibliothèques. Elle permet ainsi de faciliter leur développement en proposant des outils pour la gestion de la mémoire, le traitement des erreurs, l'analyse d'arguments, ...

libTracks

C'est le cœur du projet ROOT-Tools puisque cette partie est dédiée à la lecture, l'enregistrement et le traitement des traces. On y trouve, bien entendu, la structure des traces telle qu'elle est définie dans TRIPOLI-4, mais aussi deux classes majeures utilisées respectivement pour la lecture et l'enregistrement des traces. Celles-ci sont paramétrables par des filtres⁵ et peuvent gérer la mémoire en transférant les données entre la mémoire vive et le disque dur.

libNuclearData

Comme certaines fonctionnalités nécessitent un accès aux données nucléaires (calculs de taux de réactions, perturbation par échantillonnage corrélé, ...) et que ces données peuvent être volumineuses, une librairie leur est consacrée. Celle-ci a pour but de lire et de calculer de façon optimale les sections efficaces. Pour l'instant, seul certains fichiers au format ACE peuvent être lus, mais une interface générique a été développée pour que chaque utilisateur puisse manipuler ses propres données nucléaires au sein de ROOT-Tools. Cela nous a été utile pour exploiter les données nucléaires de TRIPOLI-4 au sein du ROOT-Tools durant les calculs en évolution.

libGeomTracks

Cette librairie permet de stocker toutes les informations liées à la géométrie (liste des noms et rangs de chaque volumes et de chaque composition, liste des isotopes présents dans chaque composition, ...).

libPostTreat

Cette librairie est l'une des parties fondamentales du projet ROOT-Tools puisqu'elle est dédiée au calcul des grandeurs physiques (flux, taux de réactions, calcul de dose, ...). On y trouve les classes d'estimateur du flux (collision, trace), de réponses neutroniques (flux, taux de réactions microscopique et macroscopique, ...), de perturbation (échantillons corrélés), de découpage (énergétique, temporel), Ces classes ont pour but de calculer les mêmes scores que ceux définis dans TRIPOLI-4⁶ à partir des traces au format ROOT ou des fichiers de sortie XML. Ces scores peuvent être sauvegardés dans des TTree⁷ et être analysés pour obtenir plus d'information sur la statistique des scores (facteur d'auto-corrélation, variance de la variance, fit de Pareto, ...).

libSimulation

Enfin, comme il peut arriver que l'on ait besoin de valider un modèle théorique (comme celui de la partie III), une dernière librairie a été développée. Elle permet d'effectuer un transport simplifié et de générer des traces pour différents opérateurs de transport et de collision.

Pour que toutes ces fonctionnalités soient facilement accessibles, une documentation (quasi-complète) des sources peut être générée avec le logiciel doxygen. Cette aide résume l'utilité et le fonctionnement des différentes classes disponibles et propose quelques exemples pour les plus utilisées d'entre-elles. Enfin, pour les utilisateurs qui ne développent pas du tout en C++, une interface graphique leur est proposée. Développée elle aussi à partir des bibliothèques ROOT, elle permet notamment de visualiser le mouvement des particules au sein de la géométrie et d'automatiser l'analyse et la visualisation des scores.

5. Par exemple pour lire ou écrire uniquement les traces passant par certains volumes de la géométrie

6. Tous les scores ne sont pas encore disponibles

7. C'est la principale structure de stockage et d'analyse des données dans ROOT, qui est aussi utilisée par TRIPOLI-4 évoluant

Références

- [Mori2002] M. MORIWAKI ET M. AOYAMA, “Improvement of Monte Carlo lattice burnup calculation performance with the correlated sampling method”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 39, p. 587-596, juin 2002.
- [Mori2003] M. MORIWAKI, “Multi-assembly analysis with an advanced correlated sampling method”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 40, p. 905-917, nov 2003.

Troisième partie

ÉTUDE THÉORIQUE DE LA MÉTHODE

Table des matières de la partie III

5	Présentation du modèle théorique	57
5.1	Enjeux	57
5.2	Description du système et hypothèses de calcul	57
5.3	Réponse, estimateur et résolution théorique	57
5.4	Notations	58
6	Modèle à 1 isotope	59
6.1	Positionnement du problème	59
6.2	Calcul théorique du score moyen et de sa variance	59
6.2.1	Résolution du problème initial	60
6.2.2	Résolution du problème perturbé	61
6.2.3	Domaine de validité	62
6.3	Simulations et validation	62
6.3.1	Résultats de simulations et validation	63
6.3.2	Analyse du domaine de validité \mathcal{D}_1	64
6.4	Bilan du modèle à 1 isotope	67
	Références	68
7	Modèle à N isotopes	69
7.1	Calcul du score moyen et de sa variance	69
7.1.1	Résolution du problème initial	70
7.1.2	Résolution du problème perturbé	70
7.1.3	Domaine de validité	71
7.2	Simulations et validation	72
7.2.1	Cas particulier : $N = 2$	72
7.2.2	Résultats de simulations pour le cas $N = 2$	72
7.3	Extension au traitement ponctuel de l'énergie et au transport en milieux hétérogènes	73
7.4	Bilan du modèle théorique	76

Présentation du modèle théorique

5.1 Enjeux

Afin de bien comprendre le fonctionnement de l'échantillonnage corrélé appliqué aux perturbations sur les concentrations, nous nous proposons d'étudier cette méthode de manière théorique sur le cas simple de la perturbation en concentration d'un milieu infini homogène. Le but est d'appréhender théoriquement ses possibilités et ses limites, c'est-à-dire d'avoir de premiers éléments quantitatifs sur les plages possibles de perturbation en concentration sur lesquelles la variance n'est pas trop dégradée. On verra que si l'échantillonnage corrélé ne présente pas de biais, il peut aussi s'avérer plus précis que la simulation Monte Carlo elle-même, dans le cas de faibles perturbations (voir Chap. 2). Pour des perturbations importantes, la simulation du problème initial reflète peu le comportement des particules dans le système perturbé, ce qui se traduira par une augmentation de la variance des scores perturbés et limitera nécessairement l'amplitude des perturbations accessibles. Comme le calcul théorique de cette contrainte n'est pas possible en général, on chercha à établir les formules pour la moyenne et la variance d'un score dans le cas simplifié présenté ci-dessous afin d'estimer un ordre de grandeur de l'amplitude "acceptable" des perturbations. Ces résultats serviront de base théorique à laquelle se référer pour comprendre et résoudre les éventuels problèmes que l'on rencontrera dans des cas réalistes.

5.2 Description du système et hypothèses de calcul

Soit un volume infini, homogène et isotrope noté \mathcal{M}_N . Il est constitué de N isotopes ($N \in \mathbb{N}^*$) que l'on numérote de 1 à N . Afin de simplifier les calculs, on se limitera à une étude mono-cinétique du problème et on ne considèrera que deux interactions : la diffusion élastique et la capture radiative. Ainsi, notre système est caractérisé par les concentrations et les sections efficaces de diffusion et d'absorption de chacun des isotopes. Concernant l'implémentation algorithmique de ce modèle, les différentes bibliothèques du ROOT-Tools ont été utilisées pour la fabrication des données nucléaires fictives, la propagation des neutrons et le calcul des scores (ces derniers seront présentés à la fin de ce chapitre).

5.3 Réponse, estimateur et résolution théorique

Toujours dans le but de simplifier nos calculs, on cherchera à estimer le flux total produit par un neutron¹ à l'aide de l'estimateur collision. On notera R_N la réponse obtenue et σ_N^2 sa variance.

Le choix de cet estimateur permet de ne pas tenir compte des directions de propagations, ni des lieux de collision, ce qui allège la résolution théorique. Comme notre système est composé d'un volume infini, aucune traversée d'interface ni aucune fuite ou condition limite ne sera prise en compte et l'ensemble des traces neutroniques sera encaissé. Les seules grandeurs associées aux traces neutroniques nécessaires à la résolution théorique de notre problème sont les distances parcourues entre chaque collision, la liste des isotopes rencontrés et le poids des neutrons avant chaque collision.

1. On ne tiendra pas compte d'une éventuelle variation de la source.

5.4 Notations

On adopte dans cette partie les notations suivantes pour le milieu \mathcal{M}_N et on ajoute un astérisque aux grandeurs du système perturbé (\mathcal{M}_N^* , N_i^* , Σ_r^{i*} , ...)

- N^i la concentration initiale de l'isotope i ,
- η_i le rapport des concentrations perturbée et initiale de l'isotope i ($\eta_i \equiv N^{i*}/N^i$),
- Σ_r^i et σ_r^i les sections efficaces macroscopique et microscopique de l'interaction² r sur l'isotope i ($\Sigma_r^i = N^i \sigma_r^i$),
- Σ_r la section efficace macroscopique de l'interaction r du milieu ($\Sigma_r = \sum_{i=1}^N \Sigma_r^i$),
- α le rapport des sections efficaces macroscopiques totales du milieux perturbé et du milieu initial ($\alpha \equiv \Sigma_t^*/\Sigma_t$),
- q_i la probabilité d'interaction avec l'isotope i ($q_i \equiv \Sigma_t^i/\Sigma_t$),
- p_i la probabilité de survie à une interaction avec l'isotope i ($p_i \equiv \sigma_s^i/\sigma_t^i = 1 - \sigma_a^i/\sigma_t^i$ avec $p_i \in [0; 1[$),
- p la probabilité de survie à une interaction dans le milieu ($p = \sum_{i=1}^N q_i p_i$, avec $p \in [0; 1[$),
- ω_N^k le poids du neutron à sa $k^{\text{ème}}$ collision dans le milieu \mathcal{M}_N ,
- κ_N^k la correction de poids due à la méthode des échantillons corrélés à la $k^{\text{ème}}$ collision d'un neutron dans le milieu \mathcal{M}_N ($\omega_N^{k,cs} = \kappa_N^k \omega_N^k$),
- \bar{R}_N la réponse moyenne recherchée (c'est-à-dire le flux total créé par un neutron),
- σ_N l'écart type de la réponse.

Remarque :

L'erreur statistique obtenue par la simulation de N_γ particules vaut $\sigma_N/\sqrt{N_\gamma}$.

2. $r = s$ pour la diffusion, $r = a$ pour l'absorption et $r = t$ pour l'interaction totale.

Modèle à 1 isotope

6.1 Positionnement du problème

Nous commencerons par étudier le cas $N = 1$ isotope, ce qui permettra d’appréhender les caractéristiques du problème dans le cas le plus simple possible. Cela fournira également une base pour la compréhension des résultats à $N > 1$ isotopes. Ce cas a déjà été abordé (en totalité ou en partie) dans la littérature [Dejo1982, Rief1984], mais en tant que perturbation de la densité d’un milieu à plusieurs isotopes. En effet, on montre (voir l’Annexe B) que, dans ce modèle, on peut considérer que la perturbation de la densité d’un matériau multi-isotopique est équivalente à la perturbation de la concentration d’un unique isotope ayant les caractéristiques moyennes du milieu, c’est-à-dire dont la concentration et les sections efficaces macroscopiques partielles sont respectivement égales à la somme des concentrations et des sections efficaces macroscopiques partielles de chaque isotope. C’est pour cette raison que les résultats obtenus dans ce chapitre dépendront de la variable α définie précédemment. Dans notre cas, α correspond au rapport des concentrations perturbée et initiale de notre unique isotope, tandis que dans le cas où l’on considère une perturbation en densité d’un milieu multi-isotopique, cette variable est égale au rapport des densités. On aura donc une formulation de nos résultats compatible à celle de la littérature, tout en gardant des expressions proches de celles établies au prochain chapitre, où l’on traitera des perturbations en concentrations de N isotopes.

6.2 Calcul théorique du score moyen et de sa variance

Soit une trace $\hat{\gamma}_m = \{\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_m\}$ décrivant le mouvement d’un neutron ayant parcouru en m collisions ($m \in \mathbb{N}^*$) la distance cumulée :

$$\gamma_m = \sum_{k=0}^{m-1} \|x_{k+1} - x_k\| = \sum_{k=0}^{m-1} l_k.$$

La probabilité que le neutron ait effectué ces m collisions selon la distance cumulée γ_m est :

$$p(\hat{\gamma}_m) = \underbrace{(\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m}}_{\text{probabilité de parcourir } \gamma_m \text{ en } m \text{ chocs}} \underbrace{p^{m-1} (1-p)}_{\text{probabilité de faire exactement } m \text{ chocs}}$$

C’est aussi la probabilité “d’observer” la trace $\hat{\gamma}_m$ car nos observations ne dépendent ni de l’énergie, ni de la direction de propagation, ni des lieux de collision. La contribution au score de cette trace vaut :

$$R_1(\hat{\gamma}_m) = \sum_{k=1}^m \frac{\omega_1^k(\hat{\gamma}_m)}{\Sigma_t(\mathbf{z}_k)} = \frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_1^k,$$

ce qui permet de calculer le score moyen produit par un neutron :

$$\begin{aligned}\bar{R}_1 &= \sum R_1(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_1^k \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p),\end{aligned}$$

ainsi que le moment d'ordre 2 :

$$\begin{aligned}\bar{R}_1^2 &= \sum R_1^2(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_1^k \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p),\end{aligned}$$

et donc la variance :

$$\sigma_1^2 = \bar{R}_1^2 - \bar{R}_1^2. \quad (6.1)$$

Remarque :

Pour simplifier les calculs, on décompose \bar{R}_1 et \bar{R}_1^2 en série :

$$\begin{aligned}\bar{R}_1 &= \sum_{m=1}^{\infty} \bar{R}_{m1}, \\ \bar{R}_1^2 &= \sum_{m=1}^{\infty} \bar{R}_{m1}^2,\end{aligned}$$

avec

$$\begin{cases} \bar{R}_{m1} = \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_1^k \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ \bar{R}_{m1}^2 = \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_1^k \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \end{cases}.$$

Cela permet de discuter de l'existence des intégrales \bar{R}_{m1} et \bar{R}_{m1}^2 avant d'analyser la convergence des séries de terme général \bar{R}_{m1} et \bar{R}_{m1}^2 .

6.2.1 Résolution du problème initial

On considère que la simulation initiale, ou non-perturbée, est effectuée sans technique de réduction de variance. Les poids des neutrons sont donc tous égaux à 1 et la contribution au score d'une trace $\hat{\gamma}_m$ vaut :

$$R_1(\hat{\gamma}_m) = \frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_1^k = \frac{m}{\Sigma_t}.$$

On peut alors facilement calculer le score moyen (voir le détail des calculs en Annexe B) :

$$\bar{R}_1 = \frac{1}{\Sigma_a}. \quad (6.2)$$

De même, on montre que la variance de ce score est égale à :

$$\sigma_1^2 = p \bar{R}_1^2. \quad (6.3)$$

Remarque :

- Cette variance (Eq. 6.1 et 6.3) est celle du processus physique, et non celle du score issu de la simulation Monte Carlo. Cette dernière vaut σ_1^2/N_γ , où N_γ est le nombre de particules simulées.
- On ne trouve aucune condition d'existence ou de convergence dans le calcul de la variance σ_1^2 .
- Le calcul du score moyen était prévisible. En effet, en faisant un bilan neutronique sur le volume, on peut écrire que les sources (c'est-à-dire 1 neutron) sont égales aux pertes par absorption (c'est-à-dire au taux de réaction par absorption $\Sigma_a \phi$, soit $\Sigma_a \bar{R}_1$). Ce bilan permet de retrouver l'équation 6.2, ce qui la valide.

6.2.2 Résolution du problème perturbé

On considère maintenant une variation de la concentration de notre isotope, mais sans modification de la source initiale. Pour toute trace $\hat{\gamma}_m$, on a alors :

$$\forall k \in \mathbb{N}, \omega_1^{k,cs} \equiv \kappa_1^k \omega_1^k = \kappa_1^k.$$

D'après l'équation 2.4, comme il n'y a aucune interface dans la géométrie du problème, les corrections apportées par l'échantillonnage corrélé valent :

$$\kappa_1^k(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} \prod_{0 \leq n \leq k}^{collisions} \left\{ \frac{X_t^{iso(n)*}(\mathbf{z}_{n+1})}{X_t^{iso(n)}(\mathbf{z}_{n+1})} e^{-(\Sigma_t^*(\mathbf{z}_{n+1}) - \Sigma_t(\mathbf{z}_{n+1})) \|x_{n+1} - x_n\|} \right\}.$$

Or, on ne considère aucune perturbation de la source

$$\forall \mathbf{z}_0 \in \varepsilon, \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} = 1,$$

et le transport est mono-cinétique

$$\forall \mathbf{z}_n \in \varepsilon, \Sigma_t(\mathbf{z}_{n+1}) = \Sigma_t,$$

les corrections de poids peuvent donc s'écrire plus simplement

$$\forall k \in \mathbb{N}, \kappa_1^k = \prod_{0 \leq n \leq k}^{collisions} \left\{ \frac{X_t^{iso(n)*}}{X_t^{iso(n)}} \right\} e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \sum_{n=0}^{k-1} l_n},$$

ou encore

$$\forall k \in \mathbb{N}, \kappa_1^k = \alpha^k e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_k}, \quad (6.4)$$

car comme il n'y a qu'un seul isotope, les quantités Σ_t^*/Σ_t et N^{1*}/N^1 valent toutes les deux α . Dans tous les cas, on a donc

$$\frac{X_t^{iso(n)*}}{X_t^{iso(n)}} = \alpha.$$

On montre (voir le détail des calculs en Annexe B) que le score moyen et sa variance valent :

$$\overline{R}_1^{cs} = \frac{1}{\Sigma_a^*} = \overline{R}_1^*, \quad (6.5)$$

$$\sigma_1^{cs2} = \begin{cases} \left[\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right] \overline{R}_1^{*2} & \text{pour } \alpha \in \mathcal{D}_1, \\ +\infty & \text{pour } \alpha \notin \mathcal{D}_1 \end{cases}, \quad (6.6)$$

avec ¹

$$\varepsilon \equiv \frac{\alpha^2}{2\alpha - 1} = \frac{N^{1*2}}{N^1(2N^{1*} - N^1)}.$$

On retrouve bien l'un des résultats annoncés au chapitre 2, le score perturbé converge vers le bon résultat quelle que soit l'amplitude de la perturbation. Mais la distribution du score perturbé est trop "plate" lorsque l'on perturbe trop le système, c'est-à-dire lorsque $\alpha \leq \frac{1}{2}$ ou $p\varepsilon \geq 1$. La variance du processus perturbé est alors infinie. Pour cette raison, on définit un domaine, appelé "domaine de validité de la méthode des échantillons corrélés" et noté \mathcal{D}_1 , dans lequel la variance reste finie et où l'on peut donc appliquer le théorème central-limite.

1. ε n'a aucune signification physique. Il s'agit seulement d'une notation introduite par l'auteur de la référence [Dejo1982] pour simplifier l'expression des résultats perturbés.

6.2.3 Domaine de validité

On a montré que l'on pouvait définir un domaine pour α sur lequel la variance du score reste finie, c'est-à-dire un domaine qui correspond à une perturbation "acceptable" de la concentration de l'isotope 1. Ce domaine est issu de conditions d'existence de $\overline{R_{m1}^{2-cs}}$ et de convergence de $\sum \overline{R_{m1}^{2-cs}}$ (voir l'Annexe B) :

$$\begin{cases} \alpha > \frac{1}{2} \\ p\varepsilon < 1 \end{cases}, \quad (6.7)$$

est noté \mathcal{D}_1 et est appelé domaine de validité. On montre aussi qu'il peut s'écrire en fonction des caractéristiques du milieu initial sans dépendre de l'amplitude de la perturbation :

$$\mathcal{D}_1 = \begin{cases} \left] \frac{1}{2}; +\infty[& \text{pour } p = 0 \\ \left] \frac{1-\sqrt{1-p}}{p}; \frac{1+\sqrt{1-p}}{p} [& \text{pour } p \neq 0 \end{cases} \quad (6.8)$$

Ce domaine se traduit par une forte contrainte sur l'utilisation de la méthode des échantillons corrélés : lorsque la perturbation est trop importante, la variance diverge. Les résultats fournis par la méthode des échantillons corrélés ne seront donc plus sommables en dehors de \mathcal{D}_1 , ce qui empêche l'application du théorème central-limite. Ce domaine de validité est représenté sur la figure 6.1 (en bleu) en fonction de α , le rapport des sections efficaces totales (qui vaut ici η_1 car il n'y a qu'un seul isotope), sur l'intervalle $[0; 5]$ et de p , la probabilité de non-absorption du milieu, sur l'intervalle $[0; 1[$.

On constate sur cette figure que pour $\alpha = 1$ (et ce quelle que soit la valeur de p) on se trouve toujours dans le domaine de validité. On retrouve ici l'un des résultats de la section 6.2.1, à savoir que la variance du problème non-perturbé est toujours bornée. Par contre, pour le problème perturbé, on observe une forte dissymétrie en fonction des caractéristiques du milieu et du sens de la perturbation.

Tout d'abord, lorsque le milieu est plus diffusant qu'absorbant, c'est-à-dire lorsque p est proche de 1, le domaine de validité est plus restreint que dans le cas contraire. Plus p augmente et plus les deux bornes de ce domaine se rapprochent de l'état initial $\alpha = 1$. L'intervalle vaut $\left] \frac{1}{2}; +\infty[$ pour $p = 0$ et tend vers l'ensemble vide lorsque p tend vers 1. Le domaine de perturbation "acceptable" de la concentration de l'isotope est donc plus large lorsque celui-ci est plus absorbant que diffusant.

De plus, lorsque l'on augmente la concentration de l'isotope 1, la variance reste bornée sur un large domaine. Dans le cas contraire, la variance devient rapidement infinie. Par exemple, pour p proche de 0, $\alpha = 5$ se trouve au sein du domaine \mathcal{D}_1 tandis que $\alpha = \frac{1}{2}$ ne l'est pas. On peut donc perturber la concentration de l'isotope en la multipliant par 5 tout en restant dans \mathcal{D}_1 , mais si elle est divisée par 2 la perturbation n'appartient plus à \mathcal{D}_1 . Le domaine de perturbation acceptable est donc plus important lorsqu'il s'agit d'augmenter la concentration de l'isotope plutôt que lorsqu'il s'agit de la diminuer. En particulier, quelle que soit la valeur de p , on ne peut jamais diviser la concentration de l'isotope par 2 sans sortir du domaine \mathcal{D}_1 .

Mais avant de discuter plus en détail du domaine de validité, on analyse dans la section suivante les résultats de simulations et on les compare aux valeurs théoriques. Cela permettra de valider le modèle théorique et de mieux comprendre le comportement de l'échantillonnage corrélé lors d'une simulation, et plus particulièrement en fonction du nombre de particules simulées (vis à vis des valeurs asymptotiques que sont les résultats théoriques).

6.3 Simulations et validation

Le premier objectif de cette section est de comparer le flux simulé avec l'estimateur collision, ainsi que sa variance, aux formules théoriques afin d'analyser le comportement des résultats de simulations lorsque ceux-ci ne coïncident pas avec les valeurs théoriques. Pour cela, on a simulé la propagation de 100 cycles de 100 neutrons dans un milieu constitué d'un seul isotope, dont on a perturbé la concentration. Mais comme chaque simulation ne donne qu'une seule estimation de la variance, on a reproduit n fois cette expérience pour estimer l'erreur (statistique) faite sur cette estimation. Enfin, on a fait varier n entre 10^2 et 10^4 afin d'analyser le comportement de l'erreur statistique perturbé σ_1^{cs} au bord et en dehors du domaine de validité \mathcal{D}_1 en fonction du nombre de particules simulées.

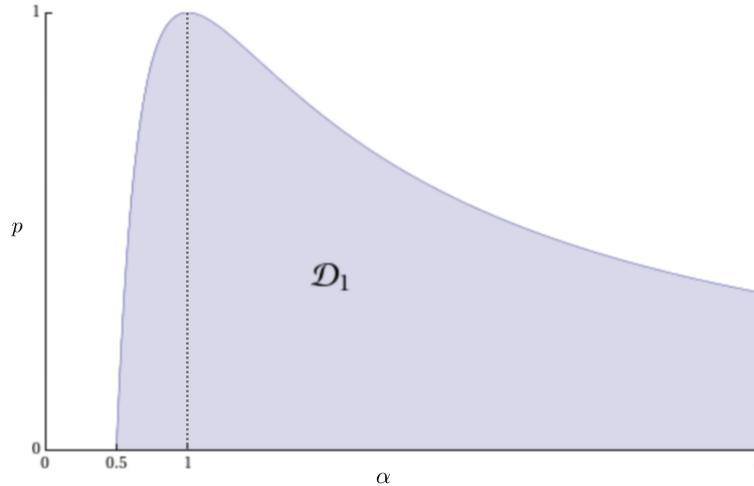


FIGURE 6.1 : Représentation du domaine de validité \mathcal{D}_1 . Le domaine \mathcal{D}_1 (en bleu) est illustré en fonction du rapport des sections efficaces α et de la probabilité de non-absorption p du milieu. Toutes les valeurs correspondant à $\alpha = 1$, c'est-à-dire aux simulations sans perturbation, sont affichées en pointillés.

6.3.1 Résultats de simulations et validation

Ces calculs ont été réalisés pour une grande variété d'isotopes, c'est-à-dire pour différentes valeurs de p (de 0,01 à 0,99 par pas de 0,01), et sur un large intervalle en perturbation, c'est-à-dire pour différentes valeurs de α (de 0,1 à 4 par pas de 0,05).

Avant d'analyser le comportement des résultats, on souhaite d'abord les comparer à notre modèle théorique. Pour cela, on a affiché sur la figure 6.2 l'écart mesuré entre les résultats théoriques et ceux des simulations (pour $n = 10^2$) en fonction de α et de p , selon les formules suivantes :

$$\Delta(R) = \left| \frac{\overline{R}_{1,th}^{cs} - \overline{R}_{1,simu}^{cs}}{\overline{R}_{1,th}^{cs}} \right| \times 100, \quad (6.9)$$

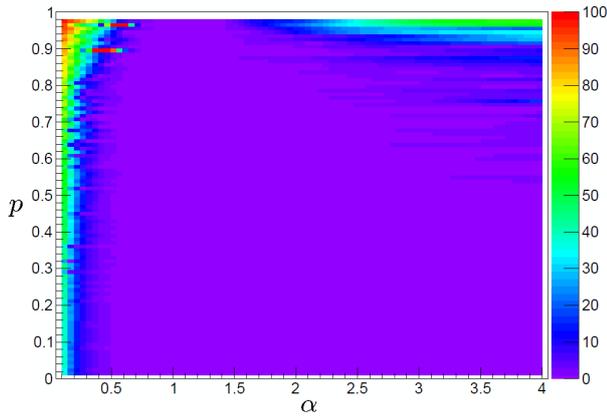
$$\Delta\left(\frac{\sigma}{R}\right) = \left| \frac{\sigma_{1,th}^{cs}/\overline{R}_{1,th}^{cs} - \sigma_{1,simu}^{cs}/\overline{R}_{1,simu}^{cs}}{\sigma_{1,th}^{cs}/\overline{R}_{1,th}^{cs}} \right| \times 100, \quad (6.10)$$

où

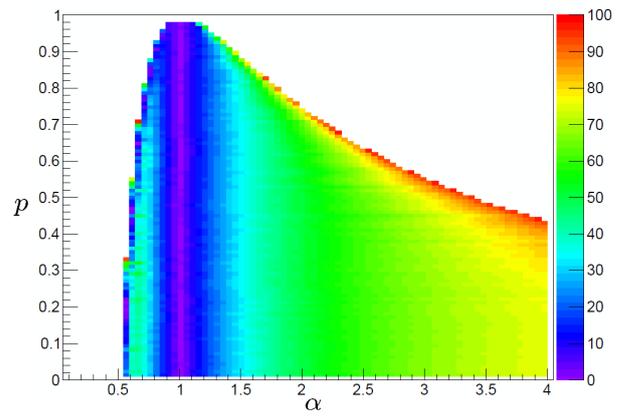
- $\overline{R}_{1,th}^{cs}$ est la moyenne théorique (Eq. 6.5),
- $\sigma_{1,th}^{cs}$ est l'erreur statistique théorique (Eq. 6.6),
- $\overline{R}_{1,simu}^{cs}$ est la moyenne obtenue par les n simulations de 100 cycles de 100 neutrons,
- $\sigma_{1,simu}^{cs}$ est l'erreur statistique obtenue par n simulations de 100 cycles de 100 neutrons.

Globalement, on peut constater une bonne adéquation entre la formule théorique et les résultats de simulations pour la moyenne du flux (Fig. 6.2a), excepté pour les faibles valeurs de α en dehors du domaine de validité \mathcal{D}_1 . Théoriquement, la moyenne du score perturbé devrait être juste quelle que soit l'amplitude des perturbations, mais en pratique on constate que celle-ci ne l'est plus lorsqu'on s'éloigne trop du domaine de validité. Cela peut s'expliquer en comprenant que la simulation Monte Carlo ne donne qu'une estimation de la moyenne entachée par une barre d'erreur variant comme $\sigma_1^{cs}/\sqrt{N_\gamma}$. Donc quand l'estimation de σ_1^{cs} elle-même diverge, on trouve un écart sur la moyenne entre valeur théorique et simulée.

Concernant l'écart type relatif (Fig. 6.2b), on constate que les résultats de simulations sont corrects lorsque l'amplitude de la perturbation reste inférieure à quelques dizaines de pourcents. Dans le cas contraire, plus les perturbations sont importantes et plus les résultats de simulations s'éloignent du modèle théorique, surtout pour les valeurs de α supérieures à 1. De même que pour la moyenne, un raisonnement sur les moments d'ordre supérieurs (variance de la variance) pourrait expliquer les écarts dans le cas de la variance.



(A) Écart entre le flux théorique moyen et celui issu des simulations (Eq. 6.9) en fonction de α et de p . La limite du domaine \mathcal{D}_1 (en noir) y est superposée.



(B) Écart entre l'erreur statistique relative théorique et celle issue des simulations (Eq. 6.10) en fonction de α et de p sur le domaine de validité \mathcal{D}_1

FIGURE 6.2 : Écart (en %) entre la théorie et les simulations. L'écart est mesuré pour l'estimation de la moyenne (Fig. 6.2a) et de l'erreur statistique relative (Fig. 6.2b). Ces données ont été réalisées avec $\Sigma_t^1 = 1$.

Ce comportement est encore plus visible sur la figure 6.3, où l'on a affiché, en fonction de α , les résultats des simulations de deux isotopes, l'un diffusant ($p = 0,8$, Fig. 6.3a et 6.3b), l'autre absorbant ($p = 0,4$, Fig. 6.3c et 6.3d), pour $n = 10^2$ (en bleu) et $n = 10^4$ (en rouge). Le domaine de validité \mathcal{D}_1 (en vert) et son conjugué $\overline{\mathcal{D}}_1$ (en orange) y sont indiqués sur l'axe des abscisses. On constate clairement que la moyenne et son erreur statistique sont correctement estimées en absence de perturbation (c'est-à-dire pour $\alpha = 1$) ou lorsque celle-ci est de l'ordre de quelques dizaines de pourcents, mais ces grandeurs sont sous estimées lorsque la concentration perturbée devient trop faible ou trop importante (typiquement pour $\alpha < \frac{1}{2}$ ou $\alpha > 2$). Et même si une augmentation du nombre de particules tend à faire disparaître cet effet, les résultats ne sont jamais représentatifs de ce qu'ils devraient être sur l'ensemble du domaine.

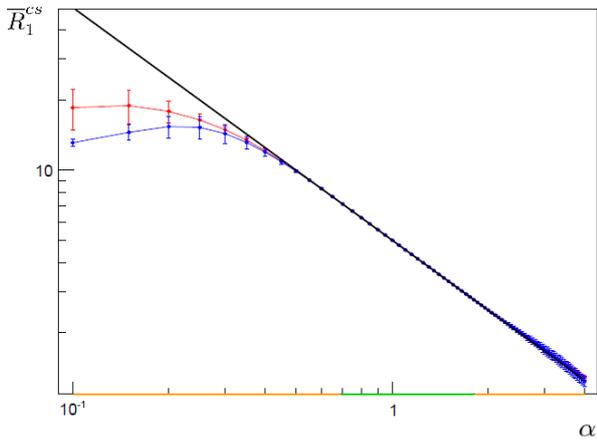
Au final, on constate que l'on dégrade principalement la moyenne lorsque α est inférieur à 1 et l'erreur statistique dans le cas contraire, et que l'utilisation de l'échantillonnage corrélé fournit des résultats corrects, à la fois pour le flux moyen et sa variance, tout en restant au sein du domaine de validité, pour des perturbations en concentration de l'ordre de 20%.

6.3.2 Analyse du domaine de validité \mathcal{D}_1

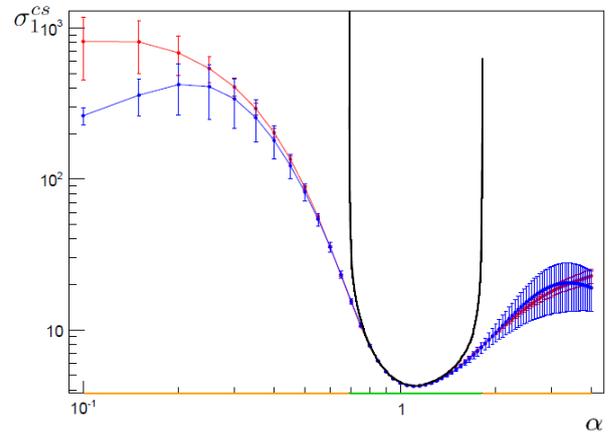
Toutes les caractéristiques de l'échantillonnage corrélé annoncées au chapitre 2 se retrouvent sur les figures 6.2 et 6.3. La moyenne perturbée est non biaisée et la dégradation de l'erreur statistique reste modérée lors de perturbations faibles. En effet, autour de $\alpha = 1$ l'écart type perturbé varie lentement à l'intérieur de \mathcal{D}_1 , mais elle évolue rapidement dès que α s'approche des bords du domaine de validité. On peut voir sur la figure 6.4, où sont affichées les erreurs statistiques relatives issues du modèle théorique et des simulations en fonction de α et de p , que cet effet est valable pour tous les isotopes et que le domaine \mathcal{D}_1 est d'autant plus important que l'isotope est absorbant. Pour des perturbations de l'ordre de quelque dizaines de pourcents, la moyenne et la variance du score sont donc correctement estimées, et l'erreur statistique perturbée reste proche de celle non-perturbée.

Remarque :

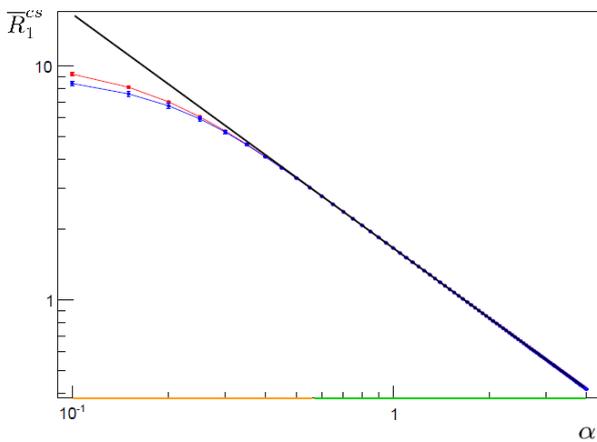
On a constaté lors de nos simulations que l'erreur statistique perturbée est inférieure à celle de la simulation initiale sur un petit domaine au-dessus de $\alpha = 1$. On peut en effet montrer (voir l'Annexe B) qu'il existe toujours au moins un intervalle, compris dans $[1; +\infty[$, sur lequel la variance perturbée est bien inférieure à la variance de la simulation initiale utilisée pour la perturbation. Si ce résultat n'est pas intuitif, il faut cependant comprendre qu'il n'est vrai que pour l'erreur statistique absolue et n'est pas valable pour l'erreur statistique



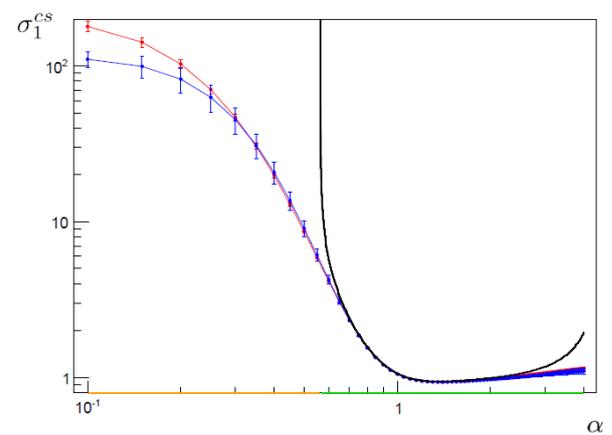
(A) Flux moyen produit par un neutron en fonction de α pour $p = 0,8$ (en échelle logarithmique)



(B) Erreur statistique sur le flux produit par un neutron en fonction de α pour $p = 0,8$ (en échelle logarithmique)

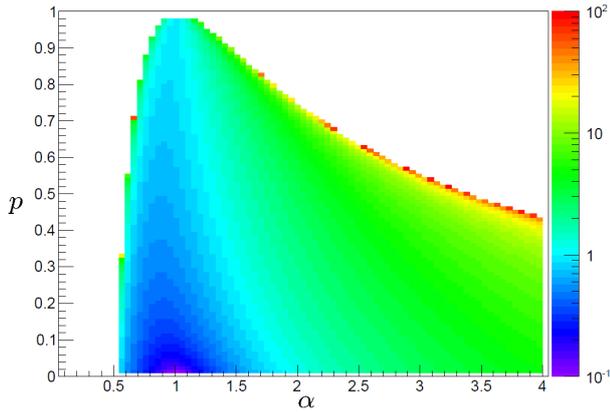


(C) Flux moyen produit par un neutron en fonction de α pour $p = 0,4$ (en échelle logarithmique)

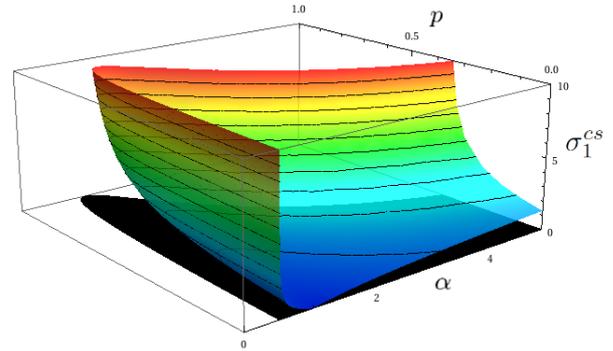


(D) Erreur statistique sur le flux produit par un neutron en fonction de α pour $p = 0,4$ (en échelle logarithmique)

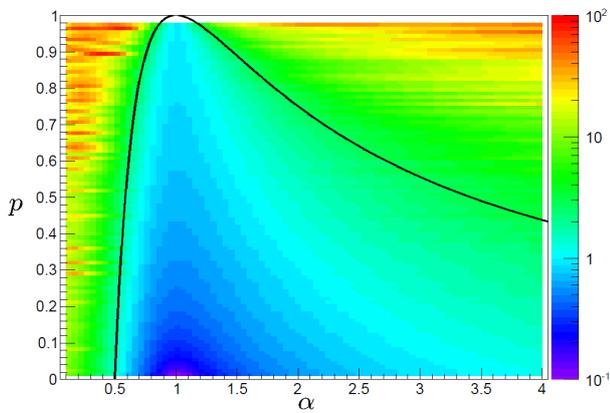
FIGURE 6.3 : Résultats de simulation Monte Carlo et valeurs théoriques pour deux isotopes. L'estimation du flux neutronique et de son erreur statistique associée sont affichées en fonction de α , pour $\Sigma_t^1 = 1$, $p \in \{0,4; 0,8\}$ et $n = 10^2$ (en bleu) ou $n = 10^4$ (en rouge). Les valeurs théoriques (en noir), ainsi que le domaine de validité \mathcal{D}_1 (en vert) et son conjugué $\overline{\mathcal{D}}_1$ (en orange) y sont superposés.



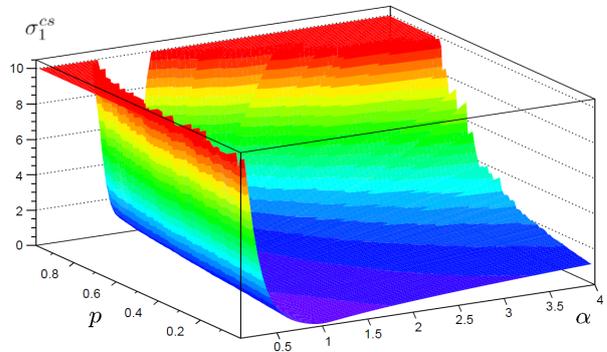
(A) Erreur statistique relative théorique en fonction de α et de p (en échelle logarithmique)



(B) Erreur statistique relative théorique en 3D (l'ombre indique le domaine \mathcal{D}_1)



(C) Erreur statistique relative moyenne en fonction de α et de p (en échelle logarithmique). La limite du domaine \mathcal{D}_1 (en noir) y est superposée.



(D) Erreur statistique relative moyenne en 3D

FIGURE 6.4 : Erreur statistique relative - théorique et simulée - sur le flux neutronique. Ces données ont été réalisées avec $\Sigma_t^1 = 1$.

relative. De même, la variance d'une nouvelle simulation qui serait obtenue dans les conditions de la perturbation est toujours moindre que la variance perturbée.

6.4 Bilan du modèle à 1 isotope

On a montré dans ce chapitre comment l'on pouvait utiliser l'échantillonnage corrélé sur un modèle de transport mono-cinétique des neutrons dans un milieu mono-isotopique, homogène, isotrope et infini. On y a reconstruit théoriquement le flux total produit par un neutron suite à une perturbation en concentration ainsi que sa variance et on a montré que les résultats issus des simulations coïncident parfaitement avec les résultats théoriques lorsque l'amplitude des perturbations reste inférieure à quelques dizaines de pourcents. Mais pour des perturbations plus importantes, le modèle montre qu'il existe une limite au-delà de laquelle la variance devient infinie. Les résultats obtenus avec la méthode des échantillons corrélés ne sont alors plus en accord avec les résultats théoriques. On a donc défini un domaine dit "de validité" sur lequel les résultats perturbés ont une variance finie. Ce domaine notamment dépend de la probabilité de non-absorption de l'isotope, et on a montré qu'il est plus étendu lorsque l'isotope est absorbant. De plus, ce domaine est plus vaste lorsque la perturbation agit en augmentant la concentration de l'isotope. Néanmoins, pour des amplitudes de perturbation intermédiaires, c'est-à-dire au-delà de quelques dizaines de pourcents à l'intérieur du domaine de validité, la variance est systématiquement sous-estimée (bien que la moyenne reste quant à elle correcte). On constate donc que pour obtenir des résultats sans biais tout en ayant une dégradation modérée de la variance, il faut limiter les perturbations de la concentration à environ 20%.

Toutefois, on peut voir dans la référence [Rief1984] que l'utilisation de l'échantillonnage corrélé avec la technique de réduction de variance appelée "pseudo-scattering" dans la simulation initiale permet d'élargir, autant que souhaité, le domaine de validité. On retrouve aussi cette association dans les références [Mori2002] et [Mori2003]. Mais l'utilisation excessive du pseudo-scattering dégrade fortement les performances de la simulation initiale. Le gain obtenu sur la variance des résultats perturbée est alors rapidement dépassé par la perte en temps de calcul. De plus, cette technique n'est pas adaptée à toutes les études. Il est parfois très compliqué de la mettre en œuvre. L'association de cette technique de réduction de variance avec l'échantillonnage corrélé ne rentre donc pas dans le cadre de ces travaux.

Enfin, on note que l'auteur de [Dejo1982] a traité la perturbation en densité du transport mono-cinétique d'un neutron ayant fait un nombre précis de collisions dans un milieu homogène, isotrope et infini. Ensuite, l'auteur de la référence [Rief1984] a généralisé ce calcul en sommant sur tous les nombres de collisions possibles, ce qui lui a permis de connaître le flux total dû à la propagation d'un neutron, mais en ne traitant toujours que la perturbation de la densité du milieu. Les travaux présentés dans ce chapitre ont permis de retrouver les résultats de ces références mais en posant les bases d'un calcul de la perturbation des concentrations isotopiques d'un milieu à $N \geq 1$ isotopes, qui fera l'objet du prochain chapitre.

Références

- [Dejo1982] G. DEJONGHE, *Études d'effets différentiels par la méthode de Monte Carlo dans le cadre de l'équation du transport. Applications aux calculs de protection et de neutronique*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1982.
- [Mori2002] M. MORIWAKI ET M. AOYAMA, "Improvement of Monte Carlo lattice burnup calculation performance with the correlated sampling method", *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 39, p. 587-596, juin 2002.
- [Mori2003] M. MORIWAKI, "Multi-assembly analysis with an advanced correlated sampling method", *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 40, p. 905-917, nov 2003.
- [Rief1984] H. RIEF, "Generalized Monte Carlo perturbation algorithms for correlated sampling and a second-order Taylor series approach", *Annals of Nuclear Energy*, vol. 11, no. 9, p. 455-476, 1984.

Modèle à N isotopes

7.1 Calcul du score moyen et de sa variance

On considère maintenant que notre volume est constitué de N isotopes ($N \in \mathbb{N}^*$) que l'on numérote de 1 à N . Soit une trace $\hat{\gamma}_m = \{\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_1 [iso(1)], \dots, \mathbf{z}_m [iso(m)]\}$ décrivant le mouvement d'un neutron source dans ce volume. Le long de sa trajectoire, ce neutron a rencontré la suite des isotopes $\{iso(i)\}_{1 \leq i \leq m}$, avec $\forall i \in \llbracket 1; m \rrbracket$, $iso(i) \in \llbracket 1; N \rrbracket$. La probabilité que ce neutron ait effectué m collisions selon la distance cumulée γ_m en rencontrant cette suite d'isotopes vaut :

$$p(\hat{\gamma}_m) = \underbrace{(\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m}}_{\substack{\text{probabilité de} \\ \text{parcourir } \gamma_m \\ \text{en } m \text{ chocs}}} \underbrace{\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)}}_{\substack{\text{probabilité de} \\ \text{diffuser sur} \\ \{iso(i)\}_{1 \leq i < m}}} \underbrace{q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)})}_{\substack{\text{probabilité de} \\ \text{se faire absorber} \\ \text{par iso}(m)}$$

De même que dans le chapitre précédent, c'est aussi la probabilité "d'observer" la trace $\hat{\gamma}_m$ car nos observations ne dépendent ni de l'énergie, ni de la direction de propagation. La contribution au score de cette trace vaut donc :

$$R_N(\hat{\gamma}_m) = \sum_{k=1}^m \frac{\omega_N^k(\hat{\gamma}_m)}{\Sigma_t(\mathbf{z}_i)} = \frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_N^k,$$

ce qui permet de calculer le score moyen produit par un neutron ¹ :

$$\begin{aligned} \bar{R}_N &= \sum R_N(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_N^k \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}), \end{aligned}$$

ainsi que le moment d'ordre 2 :

$$\begin{aligned} \bar{R}_N^2 &= \sum R_N^2(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_N^k \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}), \end{aligned}$$

et donc la variance :

$$\sigma_N^2 = \bar{R}_N^2 - \bar{R}_N^2. \quad (7.1)$$

1. Pour simplifier l'expression des moments, on a réduit $\sum_{iso(1)=1}^N \sum_{iso(2)=1}^N \dots \sum_{iso(m)=1}^N$ en $\left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right]$

Remarque :

De même que pour le cas $N = 1$, afin de simplifier les calculs on décompose \overline{R}_N et \overline{R}_N^2 en série :

$$\begin{aligned}\overline{R}_N &= \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{mN}, \\ \overline{R}_N^2 &= \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{mN}^2,\end{aligned}$$

avec

$$\begin{cases} \overline{R}_{mN} = \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_N^k \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ \overline{R}_{mN}^2 = \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_N^k \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \end{cases}$$

Cela nous permet de discuter de l'existence des intégrales \overline{R}_{mN} et \overline{R}_{mN}^2 avant d'analyser la convergence des séries de terme général \overline{R}_{mN} et \overline{R}_{mN}^2 .

7.1.1 Résolution du problème initial

On considère toujours que la simulation initiale est effectuée sans technique de réduction de variance. Les poids des neutrons sont donc tous égaux à 1 et la contribution au score d'une trace $\hat{\gamma}_m$ vaut :

$$R_N(\hat{\gamma}_m) = \frac{1}{\Sigma_t} \sum_{k=1}^m \omega_N^k = \frac{m}{\Sigma_t}.$$

On peut alors facilement calculer le score moyen (voir le détail des calculs en Annexe B) :

$$\overline{R}_N = \frac{1}{\Sigma_a}. \quad (7.2)$$

De même, on montre que la variance est égale à :

$$\sigma_N^2 = p \overline{R}_N^2. \quad (7.3)$$

On constate que la moyenne et la variance non-perturbées ont la même expression que celles du modèle à 1 isotope (Eq. 6.2 et 60 page 60).

Remarque :

Encore une fois, il n'y a aucune condition d'existence ou de convergence dans le cas du problème non-perturbé et l'équation 7.2 est validable en effectuant un bilan neutronique (voir la page 60).

7.1.2 Résolution du problème perturbé

On considère maintenant une variation de la concentration de tous les isotopes, mais sans modification de la source initiale. Pour toute trace $\hat{\gamma}_m$, on a alors :

$$\forall k \in \mathbb{N}, \omega_N^{k,cs} \equiv \kappa_N^k \omega_N^k = \kappa_N^k.$$

D'après l'équation 2.4, comme il n'y a aucune interface dans la géométrie du problème, les corrections apportées par l'échantillonnage corrélé valent :

$$\kappa_N^k(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} \prod_{0 \leq n \leq k}^{collisions} \left\{ \frac{X_t^{iso(n)*}(\mathbf{z}_{n+1})}{X_t^{iso(n)}(\mathbf{z}_{n+1})} e^{-(\Sigma_t^*(\mathbf{z}_{n+1}) - \Sigma_t(\mathbf{z}_{n+1})) \|x_{n+1} - x_n\|} \right\}.$$

Or, on ne considère aucune perturbation de la source

$$\forall \mathbf{z}_0 \in \varepsilon, \frac{S_1(\mathbf{z}_0)}{S_0(\mathbf{z}_0)} = 1,$$

et le transport est mono-cinétique

$$\forall \mathbf{z}_n \in \varepsilon, X_t^{iso(n)}(\mathbf{z}_{n+1}) = X_t^{iso(n)},$$

les corrections de poids peuvent donc s'écrire plus simplement

$$\forall k \in \mathbb{N}, \kappa_N^k = \prod_{0 \leq n \leq k}^{\text{collisions}} \left\{ \frac{X_t^{iso(n)*}}{X_t^{iso(n)}} \right\} e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \sum_{n=0}^{k-1} l_n}.$$

Or, $X_t^{iso(n)}$ vaut Σ_t si $n = k$ et s'il s'agit de la correction avant la collision, ou $N^{iso(n)}$ sinon. Comme dans cette partie on ne s'intéresse qu'au poids avant collision, pour tout n strictement inférieur à k , $X_t^{iso(n)*}/X_t^{iso(n)}$ est égal à $N^{iso(n)*}/N^{iso(n)}$, c'est-à-dire $\eta_{iso(n)}$, et $X_t^{iso(k)*}/X_t^{iso(k)}$ est égal à Σ_t^*/Σ_t , c'est-à-dire α . L'expression précédente de la correction de poids s'écrit donc

$$\kappa_N^0 = 1 \quad \text{et} \quad \forall k \in \mathbb{N}^*, \kappa_N^k = \left[\prod_{n=1}^{k-1} \eta_{iso(n)} \right] \alpha e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_k} \quad (7.4)$$

On peut alors calculer le score moyen (voir le détail des calculs en Annexe B) :

$$\overline{R}_N^{cs} = \frac{1}{\Sigma_a^*} = \overline{R}_N^* \quad (7.5)$$

Mais pour la calcul de la variance, on introduit d'abord un nouveau terme, noté a , à partir de la relation suivante² :

$$\sum_{k=1}^N \eta_k^2 q_k p_k = a \alpha^2 p$$

Cela nous permet d'alléger un peu l'expression de la variance perturbée :

$$\sigma_N^{cs2} = \begin{cases} \left[\frac{\varepsilon(1+2ap-p^*)(1-p^*)}{1-ap\varepsilon} - 1 \right] \overline{R}_N^{*2} & \text{pour } \alpha \in \mathcal{D}_N \\ +\infty & \text{pour } \alpha \notin \mathcal{D}_N \end{cases} \quad (7.6)$$

Cette expression est similaire et compatible à celle obtenue dans le cas à $N = 1$ isotope (voir Eq. 6.6 page 61). Et là encore, le score perturbé converge vers le bon résultat quelle que soit l'amplitude de la perturbation, mais lorsque $\alpha \leq \frac{1}{2}$ ou $ap\varepsilon \geq 1$, la variance du processus perturbée est infinie. On définit alors un domaine de validité, noté \mathcal{D}_N , dans lequel la variance reste finie et où l'on peut donc appliquer le théorème central-limite.

7.1.3 Domaine de validité

On a montré que l'on pouvait définir un domaine sur lequel la variance du score reste finie, c'est-à-dire un domaine qui correspond à une perturbation "acceptable" de la concentration de l'isotope 1. Ce domaine est issu de conditions d'existence de \overline{R}_{mN}^{cs2} et de convergence de $\sum R_{mN}^{cs2}$ (voir l'Annexe B) :

$$\begin{cases} \alpha > \frac{1}{2} \\ ap\varepsilon < 1 \end{cases} . \quad (7.7)$$

Il est noté \mathcal{D}_N et est appelé domaine de validité de la méthode des échantillons corrélés. On montre aussi qu'il peut s'écrire en fonction des caractéristiques du milieu initial et de a :

$$\mathcal{D}_N = \begin{cases} \left] \frac{1}{2}; +\infty \right[& \text{si } ap = 0 \\ \left] \frac{1-\sqrt{1-ap}}{ap}; \frac{1+\sqrt{1-ap}}{ap} \right[& \text{si } ap \neq 0 \end{cases} \quad (7.8)$$

Mais cette expression n'est pas satisfaisante car, contrairement à \mathcal{D}_1 , \mathcal{D}_N dépend des perturbations au travers du terme a . En pratique, on préférera donc vérifier les conditions 7.7 pour savoir si les perturbations sont trop importantes ou non.

2. Tout comme ε , a n'a aucune signification physique. Il s'agit seulement d'une notation servant à simplifier l'expression des résultats perturbés.

7.2 Simulations et validation

7.2.1 Cas particulier : $N = 2$

On montre (voir l'Annexe B) que dans le cas où $N = 2$ la condition 7.7 est équivalente à :

$$\eta_2 \in]\eta_2^-(\eta_1); \eta_2^+(\eta_1)[\quad \text{si} \quad \eta_1 \in]\eta_1^-; \eta_1^+[,$$

avec

$$\begin{aligned} \eta_1^- &= \frac{1 - \sqrt{1 - p_1 - \frac{q_2 p_1}{q_1} \left(1 - \frac{1}{p_2}\right)}}{p_1}, \\ \eta_1^+ &= \frac{1 + \sqrt{1 - p_1 - \frac{q_2 p_1}{q_1} \left(1 - \frac{1}{p_2}\right)}}{p_1}, \\ \eta_2^-(\eta_1) &= \frac{1 - \sqrt{1 - p_2 - \frac{q_1 p_2}{q_2} (\eta_1^2 p_1 - 2\eta_1 + 1)}}{p_2}, \\ \eta_2^+(\eta_1) &= \frac{1 + \sqrt{1 - p_2 - \frac{q_1 p_2}{q_2} (\eta_1^2 p_1 - 2\eta_1 + 1)}}{p_2}. \end{aligned}$$

Le domaine de validité \mathcal{D}_2 issu de ces conditions est illustré sur la figure 7.1 pour un mélange d'un isotope absorbant ($\sigma_t^1 = 2$, $p_1 = 0,4$) et d'un isotope diffusant ($\sigma_t^2 = 5$, $p_2 = 0,8$)³. On y voit clairement que le domaine sur lequel on peut perturber l'isotope 1 est plus important que celui de l'isotope 2. Tout comme dans le cas $N = 1$, on constate que plus la probabilité de non-absorption d'un isotope est faible, plus l'intervalle sur lequel on peut perturber sa concentration est grand (voir Fig. 7.2). De plus, la probabilité d'interaction sur l'isotope i a aussi une influence sur le domaine de validité. On voit sur la figure 7.3 que lorsque l'on diminue q_1 , on augmente l'intervalle sur lequel on peut perturber l'isotope 1 tout en diminuant l'intervalle de l'autre isotope (car on augmente dans le même temps la probabilité d'interaction de l'isotope 2)⁴. Au final, on observe que plus la probabilité d'effectuer une diffusion sur un isotope est faible, plus il est possible de le perturber.

Néanmoins, quelles que soient les valeurs des sections efficaces d'un isotope, le domaine sur lequel on peut le perturber dépend toujours de la perturbation appliquée à l'autre isotope. Par exemple, on voit sur la figure 7.1 que si l'on perturbe la concentration de l'isotope 2 en la multipliant par 2, alors le domaine sur lequel on peut perturber l'isotope 1 diminue (par rapport à l'absence de perturbation sur l'isotope 2). Et si la concentration de cet isotope est multipliée par 3, alors quelle que soit l'amplitude de la perturbation appliquée à la concentration de l'isotope 1 le calcul se situe en dehors du domaine de validité. On montre ici ce résultat pour $N = 2$, mais il ne dépend pas du nombre d'isotopes dans la composition. Lorsque l'on perturbe fortement un seul isotope du milieu, la variance du résultat perturbé peut devenir infinie. Il n'est pas possible de compenser sa dégradation en sélectionnant des valeurs particulières de concentrations pour les autres isotopes. Par conséquent, il ne faut pas trop s'éloigner de l'état initial pour s'assurer de rester à l'intérieur du domaine de validité.

7.2.2 Résultats de simulations pour le cas $N = 2$

Pour confirmer cette analyse, on effectue $n = 10^2$ simulations (avec $N^1 = 1$, $\sigma_t^1 = 2$, $p_1 = 0,4$, $N^2 = 1$, $\sigma_t^2 = 5$, $p_2 = 0,8$, η_1 variant de 0,1 à 5 par pas de 0,05 et η_2 de 0,1 à 3 par pas de 0,05) dont on peut voir les résultats sur la figure 7.4, page 75. Et de la même façon qu'au chapitre précédent, avant d'analyser ces résultats, on s'assure qu'ils sont corrects vis-à-vis des valeurs théoriques. Pour cela, on a tracé sur les figures 7.4e et 7.4f l'écart entre les résultats de simulations et les valeurs théoriques (voir Eq. 6.9 et 6.10). Tout comme dans le cas à 1 isotope, on constate une très bonne adéquation entre la formule théorique du flux moyen et les valeurs simulées, excepté pour les faibles valeurs de concentrations qui sont loin du domaine de validité \mathcal{D}_2 . Et en ce qui concerne l'écart type relatif, les résultats de simulations sont là aussi corrects seulement lorsque l'ampleur de la

3. Pour les conclusions qui vont suivre, modifier la concentration d'un isotope est strictement identique à modifier sa section efficace (microscopique) totale. Les concentrations initiales des deux isotopes sont donc fixées à 1 : $N_1 = N_2 = 1$.

4. On rappelle que $\sum_{i=1}^N q_i = 1$.

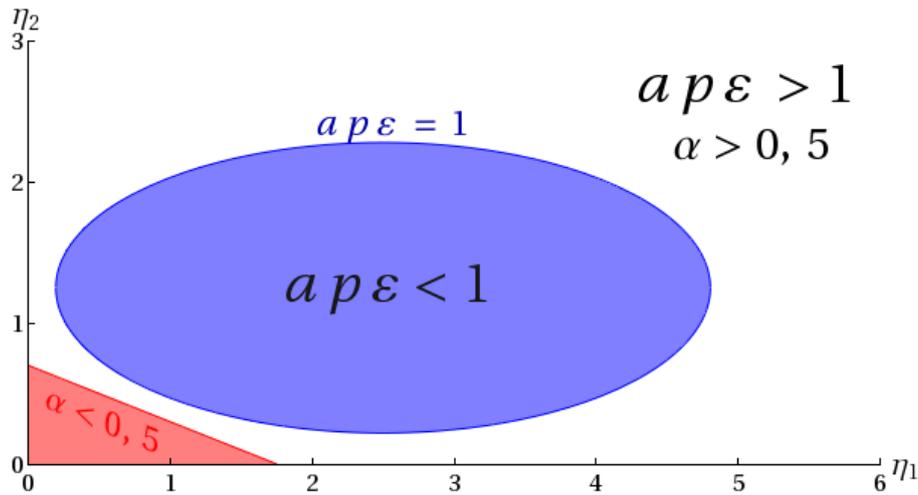


FIGURE 7.1 : Représentation du domaine de validité \mathcal{D}_2 . Le domaine \mathcal{D}_2 (en bleu) est illustré en fonction de la variation de concentration de l'isotope 1, η_1 , et de celle de l'isotope 2, η_2 , et avec $p_1 < p_2$. Les domaines qui ne respectent pas les conditions 7.7 sont aussi illustrés (en rouge et en blanc).

perturbation reste inférieure à quelques dizaines de pourcents. Dans le cas contraire, plus les perturbations sont importantes et plus les résultats de simulations s'éloignent du modèle théorique. Néanmoins, en comparant les figures 6.2b (page 64) et 7.4f (page 75), on constate que l'introduction d'un second isotope dans le milieu (\mathcal{M}_1) semble améliorer la précision du calcul. Dans le cas à 1 isotope, une perturbation de la concentration de l'ordre de 50% engendrait 30% d'erreurs sur l'estimation de l'erreur statistique relative, tandis que pour une même perturbation dans le cas à 2 isotopes, on obtient une erreur d'environ 10%. Mais tout comme dans le chapitre précédent, on constate que le domaine de validité est plus vaste lorsque la perturbation agit en augmentant la concentration des isotopes.

7.3 Extension au traitement ponctuel de l'énergie et au transport en milieux hétérogènes

L'ensemble des calculs réalisés dans cette étude ont nécessité des hypothèses fortes (le transport mono-cinétique en milieu infini) loin de la réalité physique du transport des neutrons dans la matière. Dans le cadre de ces hypothèses, il est cependant possible d'appréhender le comportement de la méthode des échantillons corrélés durant les simulations Monte Carlo ayant une configuration plus réaliste. Sans effectuer de nouveaux calculs théoriques ou de nouvelles simulations, on cherche à présent à relaxer certaines hypothèses pour élargir la portée des résultats de ce chapitre dans le cas de milieux hétérogènes et d'une décomposition énergétique des sections.

Tout d'abord, on ajoute au modèle un découpage énergétique quelconque tel que dans chaque groupe les sections efficaces de chaque isotope soient constantes : on se place ainsi dans le cadre de l'approximation multigroupe. Au sein de chaque intervalle en énergie, on peut donc considérer que le transport des particules est similaire au transport mono-cinétique effectué jusqu'ici, à ceci près que la source de neutrons arrivant dans ce groupe est distribuée selon la densité de source initiale fixée par l'utilisateur et la densité de probabilité d'arrivée des neutrons depuis un autre groupe (par diffusion). De plus, lors de chaque collision, le neutron peut soit être diffusé, soit être absorbé. Dans le premier cas, après la diffusion le neutron peut éventuellement quitter le groupe. Il est alors perdu du point de vue de ce groupe. Cette diffusion vers un autre groupe en énergie peut alors être assimilée à une forme d'absorption. La probabilité d'absorption du neutron correspond alors au produit de la probabilité d'effectuer une absorption réelle et de la probabilité d'effectuer une diffusion vers un autre groupe en énergie. Le score obtenu dans ce groupe est donc égal à celui calculé précédemment (Eq. 7.2 et 7.3), où la probabilité p tient compte des diffusions vers les autres groupes en énergie, multiplié par l'intégrale de la densité de sources. Ce dernier terme, bien que difficile à calculer théoriquement, n'est qu'un terme multiplicatif et il ne

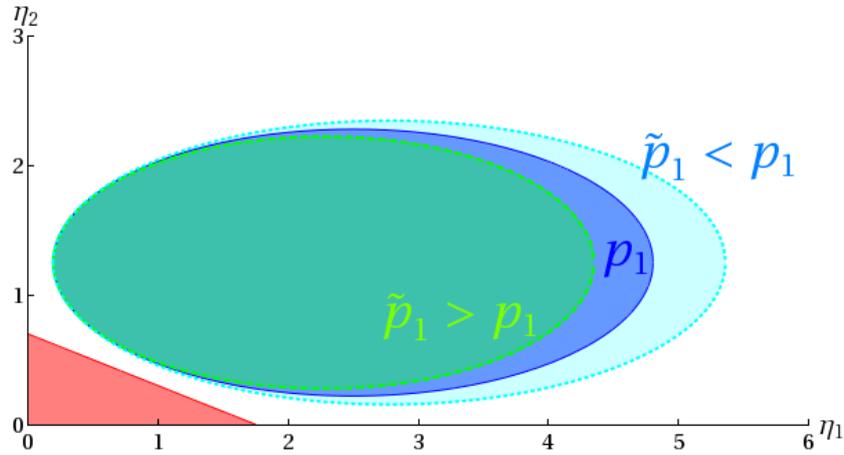


FIGURE 7.2 : Influence de la probabilité de non-absorption d'un isotope sur \mathcal{D}_2 . Le domaine \mathcal{D}_2 est illustré en fonction de la variation de concentration de l'isotope 1, η_1 , et de celle de l'isotope 2, η_2 , pour une valeur de p_1 donnée (en bleu) et deux autres, une plus faible (en cyan) et une plus forte (en vert).

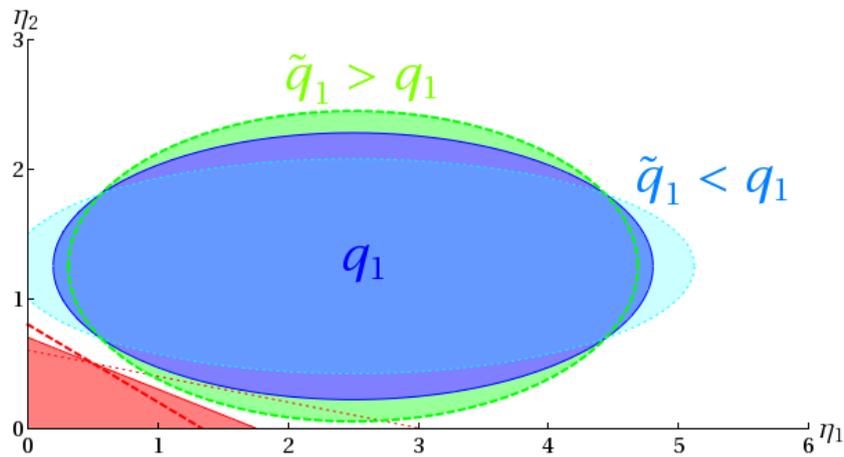
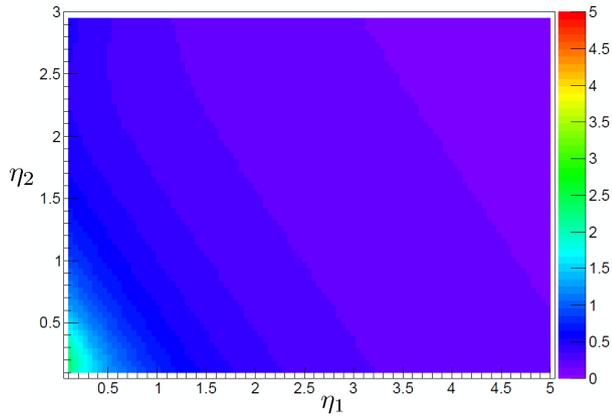
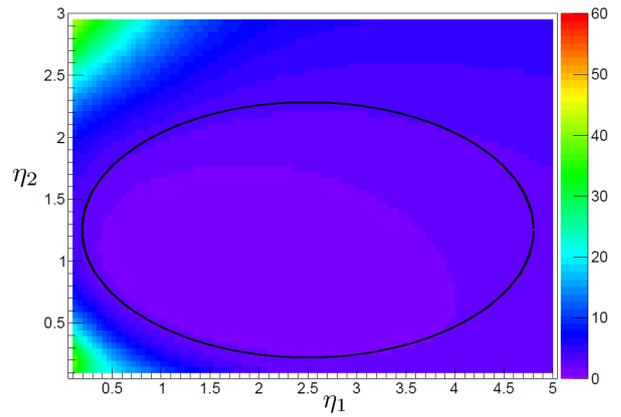


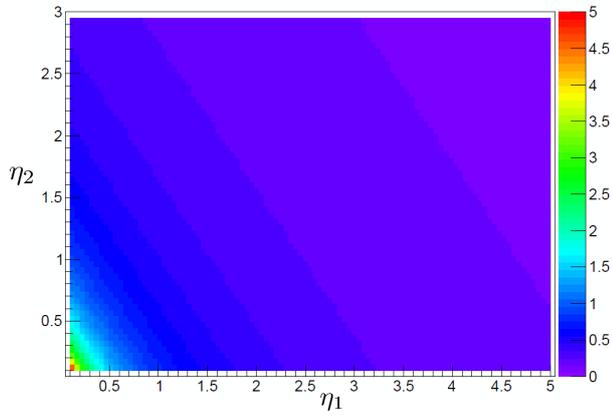
FIGURE 7.3 : Influence de la probabilité d'interaction avec un isotope sur \mathcal{D}_2 . Le domaine de validité \mathcal{D}_2 est illustré en fonction de la variation de concentration de l'isotope 1, η_1 , et de celle de l'isotope 2, η_2 , pour une valeur de q_1 donnée (en bleu) et deux autres, une plus faible (en cyan) et une plus forte (en vert).



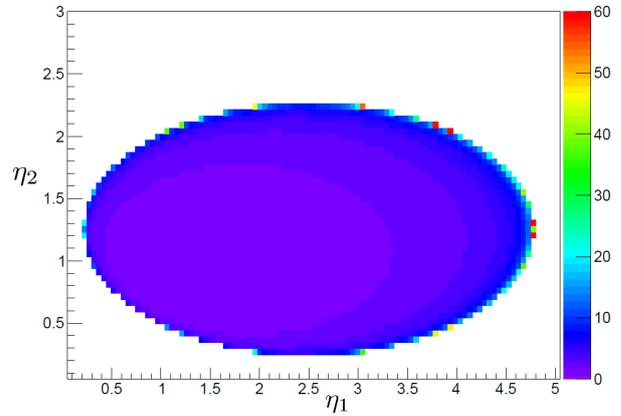
(A) Le flux moyen issu des simulations en fonction du rapport des concentrations perturbée et initiale des deux isotopes



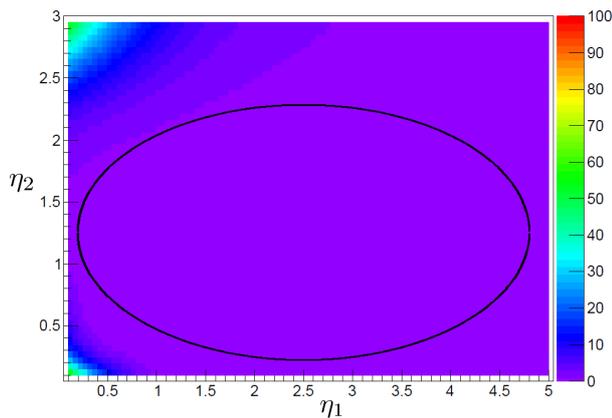
(B) Erreur statistique relative issue des simulations en fonction du rapport des concentrations perturbée et initiale des deux isotopes. La limite du domaine \mathcal{D}_2 (en noir) y est superposée.



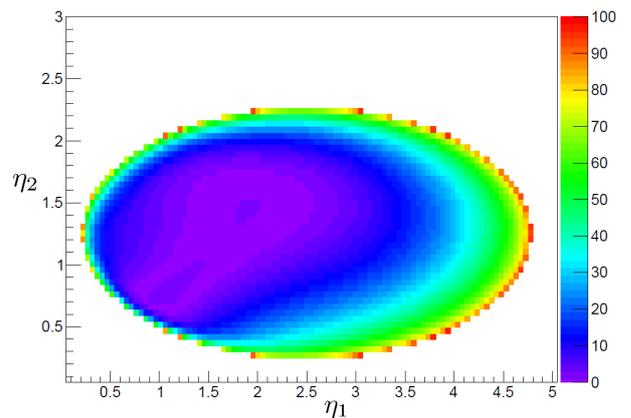
(C) Le flux moyen théorique (Eq. 7.5) en fonction du rapport des concentrations perturbée et initiale des deux isotopes



(D) Erreur statistique relative théorique (Eq. 7.6) en fonction du rapport des concentrations perturbée et initiale des deux isotopes sur le domaine de validité \mathcal{D}_2



(E) Écart entre le flux théorique moyen et celui des simulations (Eq. 6.9, p. 63) en fonction du rapport des concentrations perturbée et initiale des deux isotopes. La limite du domaine \mathcal{D}_2 (en noir) y est superposée.



(F) Écart entre l'erreur statistique relative théorique et celle issue des simulations (Eq. 6.10, p. 63) en fonction du rapport des concentrations perturbée et initiale des deux isotopes sur le domaine de validité \mathcal{D}_2

FIGURE 7.4 : Résultats de simulations et valeurs théoriques. Les résultats de simulations sont obtenus pour $N^1 = 1$, $\sigma_t^1 = 2$, $p_1 = 0,4$, $N^2 = 1$, $\sigma_t^2 = 5$, $p_2 = 0,8$, et les flux sont indiqués en *u.a.* (unité arbitraire).

modifie en rien l'expression des résultats.

Le calcul des scores perturbés peut être lui aussi effectué de façon similaire. En tenant compte des probabilités de diffusion vers les autres groupes en énergie, ainsi que des densités de sources perturbées⁵, il est possible d'imaginer que l'expression des scores perturbés soit comparable à celles établies précédemment (Eq. 7.5 et 7.6, p. 71).

Enfin, l'hypothèse multigroupe peut elle aussi être relaxée. En effet, si le découpage énergétique est suffisamment fin, l'hypothèse de sections efficaces constantes dans chaque groupe en énergie est réaliste et le transport des particules peut alors être considéré comme ponctuel en énergie. Dans une telle situation, la probabilité de diffusion des neutrons vers les autres groupes du découpage énergétique tend vers 1, si bien que la probabilité de non-absorption du milieu (qui tient compte des différentes probabilités de fuite) tend vers 0. Le comportement de l'échantillonnage corrélé est alors comparable au cas précédent avec

$$\forall i \in \llbracket 1; N \rrbracket, p_i = 0.$$

Sous cette condition, l'expression du domaine de validité se simplifie. En effet, la seconde condition de l'équation 7.7 est toujours vraie car $p = 0$. Il reste donc une seule condition à vérifier : $\alpha > \frac{1}{2}$. Cette condition stipule que dans chaque groupe en énergie la section efficace macroscopique totale perturbée doit au moins être égale à la moitié de l'initiale, c'est-à-dire :

$$\forall E, \Sigma_t^*(E) > \frac{\Sigma_t(E)}{2}.$$

On rappelle que cette condition provient des termes en exponentielle du calcul de la variance. Ces termes, au nombre de deux, sont issus de la correction de poids de l'échantillonnage corrélé (en $e^{-2(\Sigma_t^* - \Sigma_t)l}$, où l est la distance parcourue jusqu'au premier choc⁶) et de la probabilité de transport (en $e^{-\Sigma_t l}$). Le produit de ces deux termes (en $e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)l}$, c'est-à-dire $e^{-(2\alpha-1)\Sigma_t l}$) n'est sommable que si l'exposant est toujours positif. C'est cette condition qui implique $\alpha > \frac{1}{2}$.

Toutefois, si l'on considère le transport des neutrons dans un milieu homogène non-infini, la distance séparant deux points de collision est nécessairement bornée. La condition précédente, $\alpha > \frac{1}{2}$, n'est alors plus nécessaire au calcul de la variance car l'intégrale sur toutes les distances de propagation possibles (ayant le terme en $e^{-(2\alpha-1)\Sigma_t l}$) s'effectue sur un segment de longueur fini. La première condition du système 7.7 n'apparaîtra donc pas.

En revanche, la variance sera tout de même très fortement dégradée et, par conséquent, pour limiter l'amplitude des perturbations il est possible de s'assurer que la condition $\alpha > \frac{1}{2}$ soit toujours satisfaite.

7.4 Bilan du modèle théorique

On a défini au début de cette partie un modèle théorique (milieu infini, transport mono-cinétique, ...) sur lequel on pouvait prédire des résultats de simulations analogues. On a ainsi pu calculer le flux et la variance associés à la propagation d'un neutron. De plus, on a calculé ces mêmes grandeurs pour des simulations utilisant la méthode des échantillons corrélés appliquée à la perturbation des concentrations isotopiques. On a alors utilisé les différents modules du projet ROOT-Tools pour simuler le transport de neutrons dans les conditions du modèle afin de comparer nos formules théoriques à des résultats de simulations.

Ce modèle a montré l'existence d'une limite à la perturbation des concentrations au-delà de laquelle la variance sur le flux perturbé est infinie. L'ensemble des perturbations situées à l'intérieur de ces limites a donc été nommé domaine de validité de la méthode des échantillons corrélés. Les résultats obtenus par l'échantillonnage corrélé de toute perturbation située en dehors de ce domaine ne sont donc pas fiables. Mais pour des perturbations situées à l'intérieur du domaine de validité, on a vérifié que le comportement des résultats perturbés suit ce qui a été annoncé au chapitre 2. Cette étude du domaine a montré que si l'estimation du flux moyen est toujours correcte, il n'en va pas de même pour la variance. La qualité de l'estimation de l'erreur statistique décroît avec l'augmentation de la perturbation. Mais pour des perturbations faibles, c'est-à-dire de quelques dizaines

5. La densité de sources apparaît dans la correction de poids de l'échantillonnage corrélé comme un terme multiplicatif qui n'affecte donc pas l'expression des scores.

6. Comme $p = 0$, les neutrons n'effectuent qu'une seule collision dans chaque groupe.

de pourcents, la moyenne du flux et son erreur statistique sont correctement estimées, et l'erreur statistique perturbée reste proche de celle du calcul initial. On a donc retrouvé dans ce modèle toutes les caractéristiques de la méthode des échantillons corrélés. Enfin, on a pu constater que les limites du domaine de validité dépendent des caractéristiques de l'isotope et du sens de la perturbation. Le domaine de validité est plus étendu lorsque les isotopes perturbés sont plus absorbants que diffusants et lorsque la perturbation agit dans le sens d'une augmentation de leur concentration.

En conclusion, l'utilisation de l'échantillonnage corrélé pour des perturbations en densité ou en concentration de l'ordre de 20% à 30% permet d'obtenir une moyenne et une variance correctes (mais on gardera en tête l'ordre de grandeur $\Sigma_t^* > \frac{1}{2}\Sigma_t$ pour les perturbations acceptables, ainsi que l'existence d'un domaine de validité au-delà duquel la variance théorique diverge). Enfin, on a montré que plus un isotope est absorbant, plus il est possible de le perturber, ce qui augmente pour ces isotopes l'amplitude des perturbations acceptables.

Quatrième partie

ÉTUDE PRATIQUE DE LA MÉTHODE

Table des matières de la partie IV

8	Optimisations informatiques et physiques du schéma de perturbation	83
8.1	Procédures de validation et de mesure des performances	83
8.1.1	Liste des grandeurs à analyser	83
8.1.2	Procédure de validation	84
8.1.3	La figure de mérite, un critère unique de qualification	85
8.1.4	Matériel utilisé pour la mise en œuvre	85
8.2	Description du premier cas test : la cellule de combustible UOX	85
8.3	Résultats de l'évolution avec la méthode "classique"	86
8.3.1	Évolution de quelques concentrations isotopiques	88
8.3.2	Facteur de multiplication effectif	88
8.3.3	Temps de calcul	89
8.4	Résultats des calculs perturbés	90
8.4.1	Rappel de l'algorithme et définition des paramètres du schéma de calcul perturbé	90
8.4.2	Évolution des concentrations isotopiques	92
8.4.3	Impact sur le temps de calcul	94
8.4.4	Démarrage retardé des perturbations	95
8.5	Méthodes d'accélération de la construction des sections efficaces	95
8.5.1	Profilage du code et optimisation du temps de calcul	98
8.5.2	Unification des compositions	98
8.5.3	Généralisation de la méthode d'accélération à l'exploitation de la persistance des données	99
8.6	Vers des schémas de réduction de variance	102
8.6.1	Procédure d'optimisation des concentrations isotopiques du jeu de traces	103
8.6.2	Validation des résultats	103
8.6.3	Dégradation de la variance	105
8.6.4	Mesure des performances	106
8.7	Impact du découpage temporel sur la figure de mérite	106
	Références	111
9	Application à l'étude d'un assemblage en début de cycle	113
9.1	L'assemblage de combustibles UOX	113
9.1.1	Description du cas test	113
9.1.2	Définition des paramètres temporels	114
9.2	Résultats de l'évolution avec la méthode "classique"	115
9.2.1	Évolution de quelques concentrations isotopiques	115
9.2.2	Le spectre énergétique	116
9.2.3	Facteur de multiplication effectif	116
9.2.4	Temps de calcul	116
9.3	Validation et mesure des performances	119

9.3.1	Validation des résultats	119
9.3.2	Efficacité de la technique de réduction de variance	119
9.3.3	Mesure des performances	123
	Références	130

Optimisations informatiques et physiques du schéma de perturbation

La compréhension théorique des caractéristiques et des potentialités de la méthode des échantillons corrélés appliquée à la perturbation des concentrations isotopiques permet de présenter à présent les résultats de la maquette numérique selon l'algorithme 4.2 présenté au chapitre 4 (page 49). Pour ce faire, on présentera dans ce chapitre les différentes grandeurs physiques qui serviront à la validation et aux mesures de performances, ainsi que le premier cas test sur lesquels cet algorithme sera employé, à savoir une cellule de type REP. Les résultats numériques sur la cellule permettant la validation et la qualification de la méthode seront aussi présentés dans ce chapitre. Mais nous verrons que le schéma de perturbation tel qu'il est défini pour l'instant ne permet pas toujours d'employer l'échantillonnage corrélé dans les calculs en évolution. On cherchera donc à travers cette première étude à perfectionner le schéma de perturbation. Une fois que ce dernier sera optimisé, il sera appliqué dans le chapitre suivant pour la mesure de performances à l'étude d'un assemblage REP en début de cycle, qui représente un cas plus complexe et plus représentatif des calculs réalisés par les utilisateurs de TRIPOLI-4 évoluant.

8.1 Procédures de validation et de mesure des performances

8.1.1 Liste des grandeurs à analyser

Les codes Monte Carlo évoluant tel que TRIPOLI-4 évoluant sont souvent exploités pour des études de type sûreté/criticité de configurations physiques 3D hétérogènes avec des effets de spectre importants, délicates à calculer à l'aide de codes déterministes (comme lors de l'irradiation en réacteur, l'entreposage et le transport des combustibles usés, leur traitement, ...). L'objectif de ces calculs est de connaître l'évolution temporelle de toutes les grandeurs influentes intervenant dans la démonstration de la sûreté des installations, mais aussi dans l'optimisation de l'exploitation du combustible sur l'ensemble de son cycle de vie. Parmi ces grandeurs, on trouve la puissance locale dégagée par chaque milieu évoluant, le facteur de multiplication effectif, ainsi que les concentrations isotopiques d'un certain nombre d'isotopes sélectionnés pour leur implication dans la réactivité des matériaux irradiés. La connaissance précise de la concentration de ces isotopes dans les combustibles usés permet, entre autres, d'optimiser les dimensions des installations d'entreposage.

Par exemple, lors de l'irradiation neutronique d'un combustible UOX (constitué d'un mélange d'oxyde d'uranium enrichi en ^{235}U) ou d'un combustible MOX (constitué d'un mélange d'oxyde d'uranium et de plutonium), il se forme dans les réacteurs à eau sous pression (REP) des produits de fission issus de la fission ou de réactions neutroniques¹ de certains noyaux lourds comme les actinides majeurs (uranium et plutonium) et les actinides mineurs (neptunium, américium et curium). Les actinides non-fissiles et les produits de fission apparus pendant la combustion en réacteur réduisent la réactivité du combustible car la plupart d'entre eux présentent des sections efficaces de capture neutronique très élevées, entraînant ainsi un important empoisonnement du

1. Telles que la capture radiative ou des réactions du type $(n; 2n)$ par exemple.

combustible. Le tableau 8.1 présente les principaux isotopes intervenant dans la réactivité des combustibles UOX.

ACTINIDES MAJEURS
uranium (235 et 238), plutonium (239, 240, 241 et 242)
ACTINIDES MINEURS
uranium (236), neptunium (237), plutonium (238), américium (241 et 243)
PRODUITS DE FISSION
molybdène (95), technétium (99), ruthénium (101), rhodium (103), argent (109), xénon (135), césium (133), néodyme (143, 145), samarium (147, 149, 150, 151 et 152), europium (153), gadolinium (155)

TABLEAU 8.1 : Liste des isotopes de référence du combustible UOX. Elle est constituée de 11 actinides (6 majeurs et 5 mineurs) et de 16 produits de fission.

Les cas étudiés dans ces travaux traitent tous de l'évolution de combustibles UOX utilisés dans les REP à travers un couplage par le flux (entre le code de transport TRIPOLI-4 et le solveur d'évolution MENDEL). Pour valider l'utilisation de l'échantillonnage corrélé dans les calculs en évolution, on analysera donc les estimations (perturbées) des différentes grandeurs influentes en terme de sûreté/criticité (c'est-à-dire le facteur de multiplication effectif, la distribution de puissance et le flux volumique) et de bilan de matière (c'est-à-dire les concentrations isotopiques des noyaux du tableau 8.1).

8.1.2 Procédure de validation

Contrairement aux cas d'étude de la partie III, les résultats présentés dans cette partie ne peuvent être obtenus théoriquement. Il faut donc définir une procédure de validation du schéma de perturbation. L'objectif de cette procédure est de s'assurer que les estimations perturbées de chaque grandeur d'intérêt définies précédemment soient compatibles avec celles issues d'un calcul sans perturbation. On réalise donc systématiquement deux calculs dans les mêmes conditions, l'un avec les perturbations et l'autre sans, où chacun de ces calculs est composé de plusieurs simulations indépendantes, et on compare les distributions des résultats issus de ces deux calculs. Pour cela, on mesure généralement l'écart relatif (en pourcentage) de chaque grandeur (notée R) des moyennes des distributions perturbée et non-perturbée, selon la formule

$$e[R] = \frac{|\overline{R}_{ref} - \overline{R}_{cs}|}{\overline{R}_{ref}} \times 100, \quad (8.1)$$

où

- \overline{R}_{ref} est la moyenne de la grandeur R estimée par le calcul de référence,
- \overline{R}_{cs} est la moyenne de la grandeur R estimée par le calcul utilisant l'échantillonnage corrélé.

Mais si cette mesure est très souvent utilisée pour comparer deux résultats, elle n'est pas suffisante pour connaître la compatibilité des deux distributions. En effet, l'équation. 8.1 ne tient pas compte de la variance des distributions. Or, quel que soit l'écart entre les moyennes, si les erreurs statistiques des deux distributions sont bien inférieures à cet écart alors les distributions ne peuvent pas être compatibles. Il faut donc tenir compte de la moyenne et de la variance des deux distributions. Pour cela, on choisit de réaliser un test de Student sur chacune des distributions des grandeurs d'intérêt. Et ce test est réalisable car on peut raisonnablement considérer que toutes les grandeurs à analyser sont distribuées selon une distribution normale.

Pour chaque grandeur R , la quantité

$$t[R] = \frac{\overline{R}_{ref} - \overline{R}_{cs}}{\sqrt{\sigma_{ref}^2[R] + \sigma_{cs}^2[R]}},$$

où

- $\sigma_{ref}^2[R]$ est la variance de la grandeur R estimée par le calcul de référence,

- $\sigma_{cs}^2 [R]$ est la variance de la grandeur R estimée par le calcul de utilisant l'échantillonnage corrélé,

suit une loi de Student (avec $2N_s - 2$ degré de liberté, où N_s est le nombre de simulateurs indépendants de chaque calcul). Cette quantité, appelée paramètre t de la grandeur R , est à comparer à la valeur critique, ou quantile, de la distribution de Student, que l'on notera t_c . Cette valeur critique (théorique) est obtenue à partir du nombre de degré de liberté du paramètre t et du niveau de confiance que l'on souhaite obtenir sur le test. Si le paramètre t (en valeur absolue) est inférieur au quantile, alors on pourra considérer que les distributions initiale (R_{ref}) et perturbée (R_{cs}) sont compatibles. Le cas contraire indiquera qu'il existe une erreur systématique (dite biais) entre les deux schémas de calcul, qui devra alors être discutée/comprise. Cette procédure est appelée test-t de Student et sera appliquée à l'ensemble des grandeurs d'intérêt de tous les schémas utilisant les perturbations. Afin d'être sûr de la qualité des résultats de ce test, on fixe la probabilité de succès à 99,9 %.

Pour résumer, la loi de Student permet de se prononcer sur la compatibilité entre deux distributions en affirmant que si $t[R] \geq t_c$ alors les deux distributions sont très certainement incompatibles (à 0,1 % près) et si $t[R] < t_c$ alors les deux distributions sont compatibles. Quelques valeurs de quantiles à 99,9 % sont indiquées sur le tableau 8.2.

Le nombre de simulateurs indépendants	10	50	100	200	500	1000
Le nombre de degré de liberté	18	98	198	398	998	1998
Le quantile t_c à 99,9 %	3,610	3,175	3,132	3,111	3,098	3,094

TABLEAU 8.2 : Valeurs des quantiles à 99,9 % en fonction du nombre de simulateurs indépendants.

8.1.3 La figure de mérite, un critère unique de qualification

Concernant la mesure des performances, la puissance locale tout comme les concentrations isotopiques (même celle des isotopes les plus abondants) sont difficilement utilisables. En effet, comme l'irradiation des compositions n'est pas uniforme, la variance sur l'estimation de ces grandeurs est susceptible de varier brutalement d'un milieu évoluant à un autre, tandis que le temps de simulation reste commun à l'ensemble des scores. On ne peut donc pas construire la FOM et le Gain (Eq. 1.14 et 1.15, page 18) à partir de l'estimation de la distribution de puissance ou des concentrations isotopiques, car cela ne fournit qu'une information "locale" sur l'état d'avancement de la simulation. Il vaut mieux construire ces grandeurs à partir de scores "macroscopiques" qui ne dépendent pas d'un point de l'espace des phases. C'est pourquoi la mesure des performances se fera à partir des différentes estimations de facteur de multiplication effectif k_{eff} .

Néanmoins, si les codes Monte Carlo évoluant sont souvent utilisés pour le calcul de k_{eff} , ils servent aussi à effectuer des bilans matière. Une fois que le schéma de perturbation sera optimisé, on cherchera tout de même à obtenir de meilleures performances sur le calcul des concentrations isotopiques. Par conséquent on cherchera dans ce chapitre à optimiser le schéma de perturbation à l'aide uniquement du k_{eff} , mais le calcul "en situation réelle" de l'assemblage REP du prochain chapitre permettra de présenter des résultats sur la mesure de la figure de mérite de l'ensemble des grandeurs d'intérêts.

8.1.4 Matériel utilisé pour la mise en œuvre

L'ensemble des calculs présentés dans ces travaux a été effectué sur la même machine afin de ne pas tenir compte de l'effet du matériel sur les temps d'exécution. Celle-ci est composée d'un processeur Intel® Xeon® L5640 ayant 6 cœurs hyper-threadés à 2,26 GHz et dispose de 24 Go de mémoire vive (RAM).

8.2 Description du premier cas test : la cellule de combustible UOX

Le cas test utilisé pour optimiser le schéma de perturbation fait partie de la bibliothèque de validation de TRIPOLI-4 évoluant et représente une cellule REP dans un milieu infini (Fig. 8.1). Cette cellule est composée d'une pastille combustible UOX (enrichie à 4,9 %), de rayon 0,407 cm et de hauteur 20 cm (avec condition de réflexions aux deux extrémités, il n'y a donc pas de dépendance axiale du flux), qui est enveloppée par une gaine

Isotopes	1H	^{10}B	^{11}B	^{16}O	^{91}Zr	^{235}U	^{238}U
Modérateur	0,04577	$4,5754 \cdot 10^{-6}$	$1,8302 \cdot 10^{-5}$	0,022885	0,0010492	-	-
Gaine	-	-	-	-	0,038629	-	-
Combustible	-	-	-	0,045810	-	0,001136	0,021769

TABLEAU 8.3 : Liste des concentrations isotopiques des matériaux de la cellule de combustible UOX. Le modérateur est constitué d'eau borée, la gaine ne contient que du zirconium et le combustible d'oxyde d'uranium. (Les valeurs indiquées sont en nombre d'atomes par $10^{-24} cm^3$)

en Zirconium d'épaisseur $0,07 cm$. Le tout est modéré par de l'eau borée autour de la gaine et est maintenu à une température de $300 K$. Une liste précise des concentrations isotopiques est donnée dans le tableau 8.3. Afin de modéliser un réseau infini de cellules, on applique également des conditions de réflexions sur les quatre faces de la cellule.

Concernant le nombre de particules simulées, on utilise 100 simulateurs indépendants qui propagent 20 cycles de 500 particules chacun (soit 10^6 neutrons au total). La distribution des particules au premier cycle est définie sur l'ensemble du combustible de façon uniforme et isotrope en espace, et selon un spectre de Watt en énergie. Bien que cette distribution atteigne rapidement son état d'équilibre, elle évolue d'un cycle à l'autre car les calculs sont effectués en mode criticité. On jette alors les 10 premiers cycles de chaque transport pour être sûr que la distribution soit convergée lorsque l'on commence à encaisser les scores. Le nombre de particules simulées pour l'encaissement des scores est suffisant pour obtenir des variances correctes sur tous les scores (par exemple, les différents facteurs de multiplication effectif sont estimés à environ une centaine de *pcm* près) et pour observer clairement les effets des perturbations. Enfin, le calcul des scores est effectué sur un maillage énergétique fin (à 11514 groupes) pour fournir au solveur d'évolution des taux de réactions ou des flux précis. Enfin, durant toute l'évolution, le niveau de flux est normalisé de façon à maintenir une puissance totale constante de $3140 W^2$.

La pastille de combustible est découpée en 6 couronnes, que l'on identifiera par la suite par un numéro (de l'intérieur vers l'extérieur) de 1 à 6. Ce découpage spatial permet de mieux modéliser la distribution de particules et donc la variation spatiale des concentrations isotopiques. Et comme le flux croît rapidement sur les bords de la pastille, l'appauvrissement du combustible est plus rapide sur la surface du combustible. Cet effet de peau entraîne une dépendance radiale des concentrations isotopiques, qui est alors modélisée par six couronnes de plus en plus fines de l'intérieur vers l'extérieur. Leurs volumes respectifs représentent 5%, 5%, 10%, 10%, 30% et 40% du volume total de la pastille. Pour l'instant, tous les calculs utiliseront ce découpage pour vérifier d'éventuels effets de l'échantillonnage corrélé liés à cet effet de peau. La cellule à 1 couronne sera utilisée quant à elle dans le prochain chapitre.

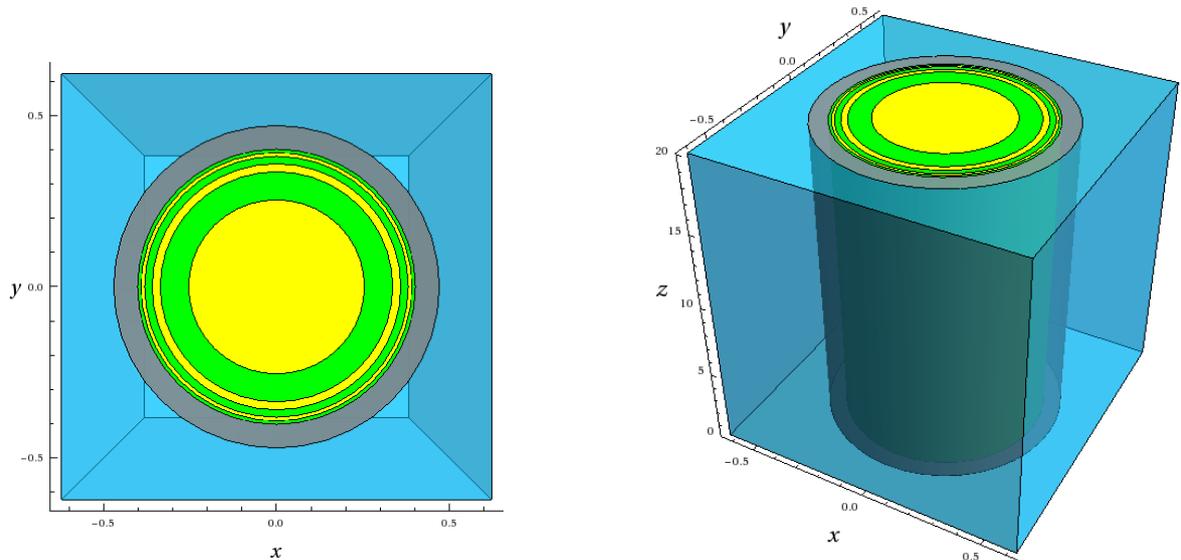
L'évolution des cellules se fera a priori sur $60 GWj/t$ d'irradiation à partir de l'estimation du flux³. Le découpage temporel est uniforme, avec un pas de $5 GWj/t$, sauf pour les premiers pas d'irradiation, afin de modéliser correctement l'apparition de tous les actinides et des produits de fission (à cause notamment de leurs impacts sur le facteur de multiplication effectif). Entre les deux premiers pas, on en ajoute donc deux autres à 0,1 et 1 GWj/t d'irradiation. Mais le découpage temporel n'est pas vraiment un paramètre libre, comme cela sera expliqué durant la suite de ce chapitre. Plus de détails sur ce découpage seront donnés par la suite lorsqu'il sera modifié.

8.3 Résultats de l'évolution avec la méthode "classique"

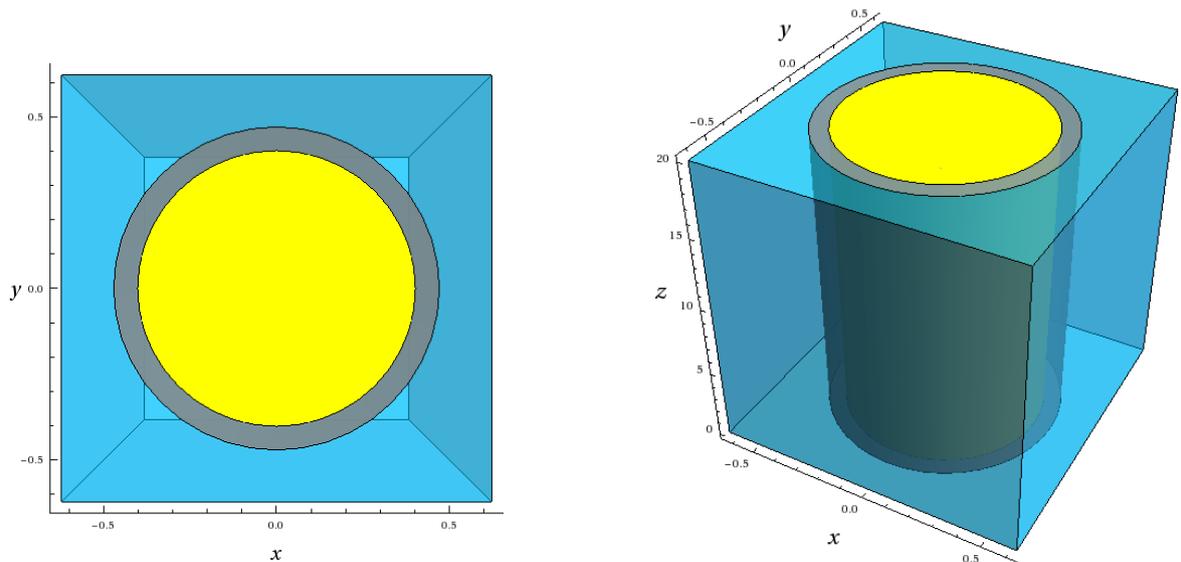
Ce chapitre vise à optimiser (d'un point de vue physique et informatique) le schéma de perturbation, en se donnant pour cas test l'évolution de la cellule UOX. Mais avant d'analyser les résultats fournis par l'algorithme de perturbation des calculs en évolution (défini au chapitre 4), on commencera par présenter les résultats obtenus avec le calcul de référence effectué par TRIPOLI-4 évoluant "standard" (notamment pour justifier le choix de certains paramètres, comme le découpage temporel par exemple). On détaillera ensuite les résultats du

2. Puissance équivalente à celle d'un EPR.

3. Avec l'estimateur collision.



(A) Schéma de la cellule à 6 couronnes



(B) Schéma de la cellule à 1 couronne



(c) Liste des matériaux

FIGURE 8.1 : Représentations de la cellule UOX à 1 et 6 couronne(s). Les dimensions de l'enveloppe parallélépipédique contenant le modérateur sont : $1,26 \times 1,26 \times 20$, la gaine a un rayon externe de 0,477 et une épaisseur de 0,07 (toutes les valeurs sont indiquées en *cm*). Le rayon de la cellule vaut 0,407 et les couronnes (de l'intérieur vers l'extérieur) ont pour épaisseur : $\{ 0,2574090 - 0,0831112 - 0,0235112 - 0,0220822 - 0,0105804 - 0,0103055 \}$.

calcul perturbé dans le but d'optimiser les performances du schéma de perturbation d'un point de vue physique (modification des paramètres de l'algorithme impactant les grandeurs physiques) et informatique (modification du code source du programme permettant d'accélérer la simulation). L'optimisation de la figure de mérite est déléguée à l'étude de l'assemblage REP du chapitre suivant.

Dans cette section, seuls certains résultats du calcul de référence de la cellule de combustible UOX seront présentés. On se restreint volontairement à l'analyse de quelques phénomènes physiques importants qui justifient le choix de la modélisation de la cellule, et plus particulièrement du maillage spatio-temporel.

8.3.1 Évolution de quelques concentrations isotopiques

On montre sur la figure 8.2 l'évolution des principaux isotopes de l'uranium et du plutonium⁴ dans les couronnes interne et externe de la cellule. Les deux graphes illustrent bien la variation radiale de la consommation de l'uranium et de la production du plutonium. Par exemple⁵, la concentration isotopique de l'uranium-235 vaut $1,136.10^{-3}$ dans les deux couronnes au début du calcul, mais à 60 GWj/t elle vaut $1,90356.10^{-4}$ ($\pm 0,113464\%$) dans la couronne interne et $1,50936.10^{-4}$ ($\pm 0,251003\%$) dans la couronne externe. Cet isotope est donc plus consommé sur le bord de la cellule. Et concernant le plutonium-239 (qui n'était pas présent au début du calcul), sa concentration à 60 GWj/t vaut $1,74602.10^{-4}$ ($\pm 0,18373\%$) dans la couronne interne et $4,01392.10^{-4}$ ($\pm 0,374097\%$) dans la couronne externe. La fabrication du plutonium est donc plus importante dans la couche externe de la cellule. Les résultats obtenus justifient bien le maillage radial de la cellule.

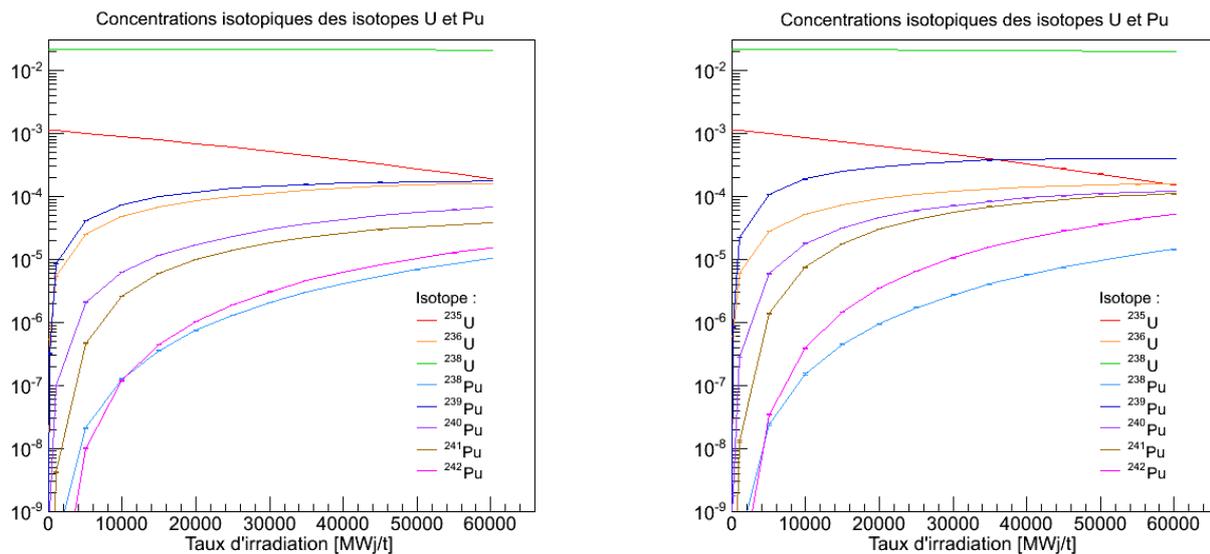


FIGURE 8.2 : Évolution de la concentration isotopique des principaux isotopes de l'uranium et du plutonium dans les couronnes interne (à gauche) et externe (à droite) de la cellule de combustible UOX. Les concentrations isotopiques sont indiquées en nombre d'atomes par 10^{-24}cm^3 (avec leur barre d'erreur à 1σ).

8.3.2 Facteur de multiplication effectif

Comme on peut le voir sur le tableau 8.4 (ainsi que sur la figure 8.3 page 89), le facteur de multiplication effectif de la cellule de combustible UOX évolue rapidement au tout début de l'irradiation. L'apparition des produits de fission, et plus particulièrement du xénon-135 qui est un poison neutronique, fait fortement chuter la réactivité de la cellule. Mais ces éléments sont rapidement saturés, et leur effet sur le facteur de multiplication neutronique disparaît dès que leur concentration est stabilisée. Ce dernier décroît alors plus lentement à cause

4. C'est-à-dire ceux du tableau 8.1, page 84.

5. Les concentrations de ce paragraphe sont indiquées, comme partout dans ce document, en nombre d'atome par 10^{-24}cm^3 .

de l'appauvrissement du combustible en matériaux fissiles. On utilise par conséquent un découpage fin au début de l'évolution.

Estimateur	k_{eff}^{step}		k_{eff}^{corde}		$k_{eff}^{collision}$	
	Moyenne	Écart type (en pcm)	Moyenne	Écart type (en pcm)	Moyenne	Écart type (en pcm)
Taux d'irradiation (en GWj/t)						
0	1,32763	96	1,32676	105	1,32745	87
1	1,27395	93	1,27323	148	1,27317	88
10	1,18815	107	1,18572	135	1,18772	100
20	1,11086	103	1,11020	134	1,11111	103
30	1,03964	100	1,04016	126	1,04001	94
40	0,977444	117	0,976507	140	0,976627	119
50	0,918564	110	0,916080	132	0,91904	104
60	0,871217	118	0,871344	146	0,871678	108

TABLEAU 8.4 : Estimations du k_{eff} par un calcul non-perturbé sur la cellule de combustible UOX.

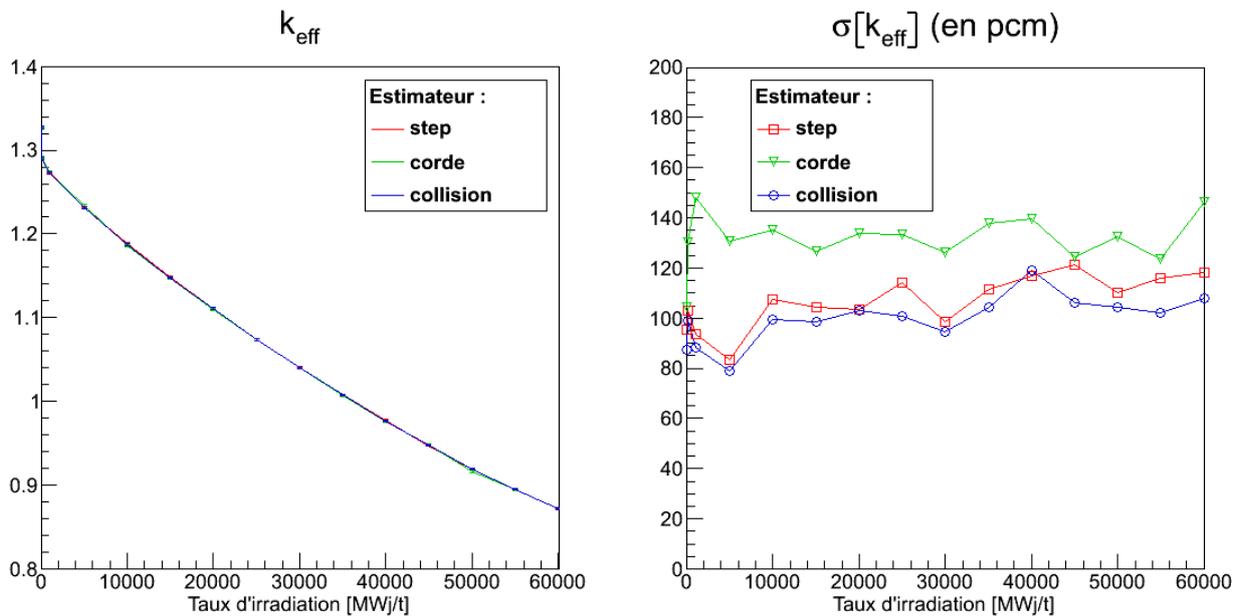


FIGURE 8.3 : Évolution du facteur de multiplication effectif d'une cellule de combustible UOX. Les trois estimations du k_{eff} sont affichées à gauche avec leur erreur statistique (à 1σ) et leur écart type relatif est indiqué à droite (en pcm).

8.3.3 Temps de calcul

On constate sur la figure 8.4, page 90, que le temps de calcul moyen de chaque phase de transport se situe en 80 et 90 secondes, excepté pour le temps du premier pas qui vaut seulement 19 secondes. Cette différence de temps entre le premier calcul Monte Carlo et les autres est dû au nombre d'isotopes présents dans les compositions évoluant. Celles-ci ne contiennent que 5 isotopes au premier pas de l'évolution, mais dès le second calcul de transport toutes les couronnes de la cellule contiennent au moins 140 isotopes. L'impact de la présence des produits de fission sur les temps de calcul n'est donc pas négligeable. L'utilisation d'une chaîne d'évolution précise, qui contient un grand nombre de noyaux comme celle utilisée dans le cas présent, entraîne un ralentissement notable des phases de transport car au sein du code beaucoup de méthodes nécessitent un calcul de sections efficaces macroscopiques, qui se font en parcourant les sections efficaces microscopiques de chaque

noyau⁶.

De plus, on remarque que le temps des simulations Monte Carlo n'est pas constant durant le reste de l'évolution. Il augmente dans un premier temps, jusqu'à 90 secondes par pas, puis il diminue progressivement jusqu'à atteindre 80 secondes au dernier pas de l'évolution. Ceci est dû à la combinaison de deux effets. Le premier correspond à l'apparition progressive de tous les isotopes de la chaîne d'évolution dans les différents milieux évoluant. C'est le même effet qui explique la différence de temps de calcul entre les deux premiers pas. Mais il s'estompe rapidement car dès le deuxième pas la quasi-totalité des isotopes est apparue. Le second effet correspond à la durée de vie moyenne des neutrons. L'évolution des concentrations isotopiques modifie les sections efficaces macroscopiques d'absorption et donc la probabilité d'absorption des particules. Lorsque le combustible s'appauvrit, le nombre de collision moyen des particules diminue, ce qui nécessite moins de temps de simulation.

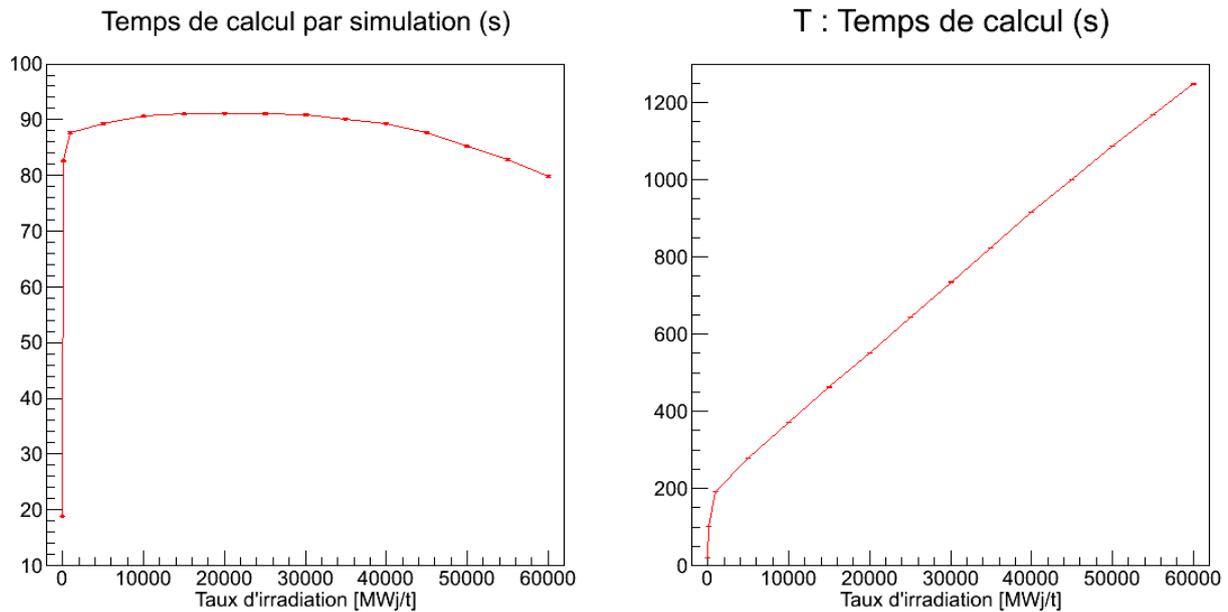


FIGURE 8.4 : Temps de calcul moyen des simulations non-perturbées de l'évolution de la cellule de combustible UOX. Le temps moyen de chaque pas de temps est affiché à gauche et le temps moyen de la somme des différents pas de temps depuis le début du calcul est affiché à droite. (La moyenne est effectuée sur les 100 simulations indépendantes.)

8.4 Résultats des calculs perturbés

8.4.1 Rappel de l'algorithme et définition des paramètres du schéma de calcul perturbé

Avant d'utiliser l'algorithme de perturbation des calculs en évolution, il faut encore déterminer le pas de temps à partir duquel le schéma "standard" est remplacé par le schéma perturbé (T_i), ainsi que l'intervalle de temps pendant lequel un même jeu de traces est perturbé pour remplacer les phases de transport (ΔT_p). (Pour rappel, le schéma de perturbation est illustré sur la figure 8.5, page 91.)

Le premier paramètre dépend du temps d'apparition des isotopes dans toutes les compositions évoluant. Les résultats du calcul de référence montrent que l'ensemble de la chaîne d'évolution apparaît dans toutes les compositions évoluant de toutes les simulations indépendantes à partir du cinquième pas de temps, c'est-à-dire à 10 GWj/t . Pour comprendre l'impact de T_i sur les résultats perturbés, on effectue deux calculs avec le

⁶. Par exemple les méthodes dévolues au calcul des scores ont besoin du calcul des sections efficaces macroscopiques totale et de fission pour l'estimation du flux et du facteur de multiplication effectif.

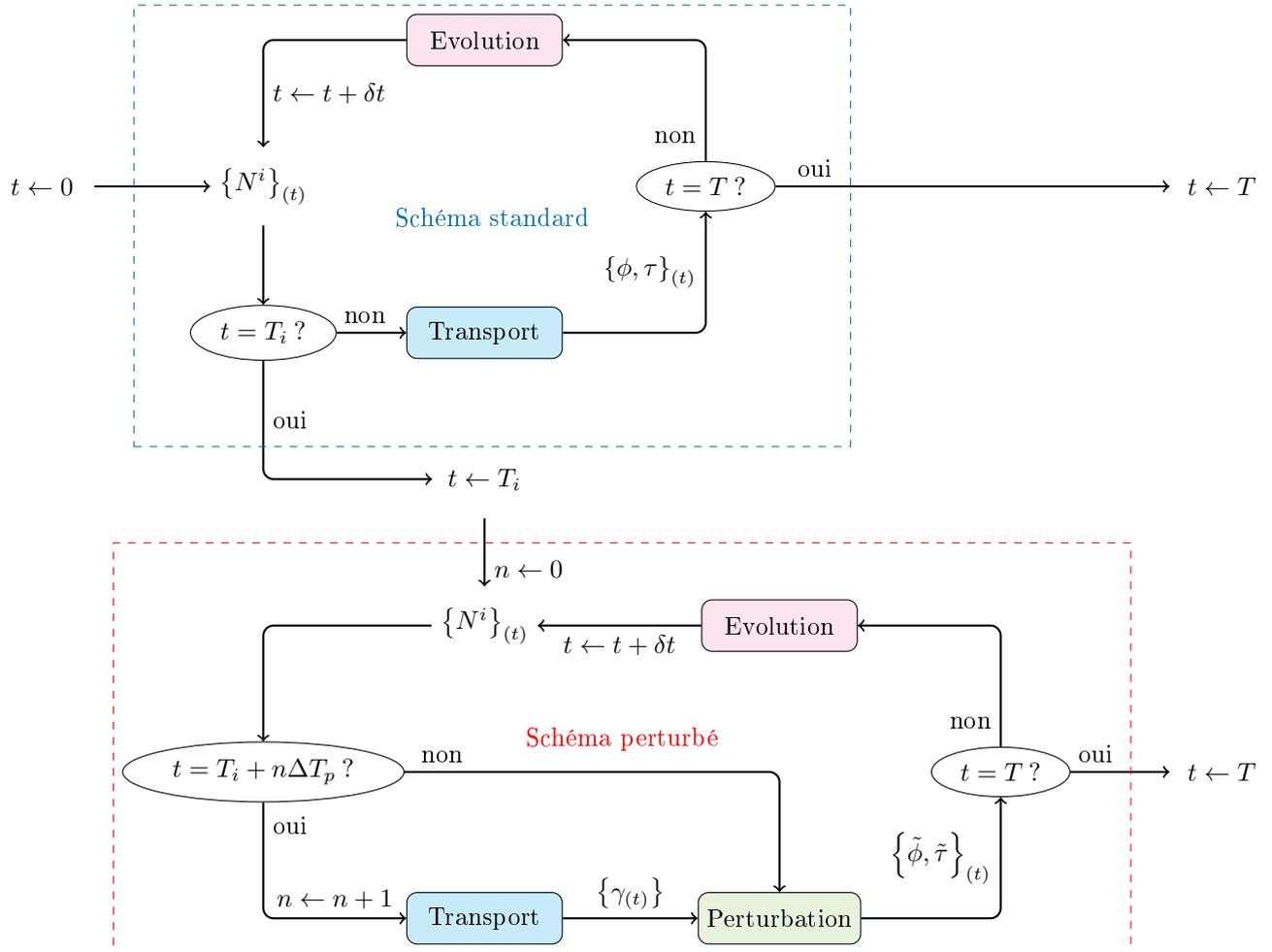


FIGURE 8.5 : Schéma d’Euler perturbé. Le schéma est divisé en deux phases. La première (entourée par des pointillés bleus) correspond au schéma d’Euler non-perturbé. Cette phase enchaîne les calculs de transport (en bleu) et d’évolution (en rose) et s’arrête lorsque tous les noyaux de la chaîne d’évolution sont apparus, c’est-à-dire à $t = T_i$, ou à la fin de la chaîne d’évolution, c’est-à-dire à $t = T$, si certains noyaux n’apparaissent jamais. Ensuite, la seconde phase correspond aux perturbations. Dans celle-ci, des traces sont générées tous les ΔT_p et sont perturbées par le module de perturbation (en vert).

schéma perturbé. Le premier utilise la plus petite valeur de T_i , c'est-à-dire 10 GWj/t , et le second une valeur intermédiaire de 35 GWj/t . De plus, pour bien comprendre l'impact des perturbations sur les résultats, on choisit de ne perturber qu'un seul jeu de traces, c'est-à-dire que l'on perturbe le reste de l'évolution avec les traces qui sont générées à $t = T_i$. La comparaison des deux calculs permettra alors de comprendre l'effet de T_i sans celui de ΔT_p (une analyse de ce second paramètre sera faite plus loin dans ce chapitre). On obtient alors

$$\begin{cases} T_i & = 10\text{ GWj/t} \\ \Delta T_p & = 50\text{ GWj/t} \end{cases}$$

pour le premier calcul, et

$$\begin{cases} T_i & = 35\text{ GWj/t} \\ \Delta T_p & = 50\text{ GWj/t} \end{cases}$$

pour le second⁷. Le premier calcul perturbé utilisera donc un jeu de traces simulées dans des milieux où tous les isotopes sont présents mais dont certains ne le sont qu'en très faible quantité, tandis que le second calcul utilisera un jeu de traces simulées à un taux d'irradiation plus avancé, et donc avec des concentrations isotopiques plus proches de celles de l'état final du système. L'analyse des résultats de ces deux calculs mettra en évidence l'influence de ce paramètre sur les résultats.

Remarque :

Une connaissance a priori de l'évolution du système a été nécessaire pour connaître le moment où le schéma perturbé peut démarrer. Toutefois, une estimation, même peu précise, de ce temps suffit en général pour appliquer l'algorithme de perturbation. En effet, on peut par exemple effectuer une première (et unique) simulation non-perturbée et obtenir une valeur approchée de T_i en analysant l'évolution des compositions. Le coût initial de cette simulation (qui peut être effectuée avec un nombre inférieur de particules) est alors négligeable face à celui des 100 simulations indépendantes du calcul de référence. Ou encore, il est possible d'analyser au début de chaque pas de temps les différentes compositions évoluant pour savoir si tous les isotopes sont présents. Mais dans ce cas, le schéma perturbé pourrait démarrer à des pas de temps différents d'une simulation à l'autre. L'analyse de l'influence de T_i sur les résultats de l'évolution perturbée n'en serait alors que plus complexe.

8.4.2 Évolution des concentrations isotopiques

Tout d'abord, concernant l'évolution des concentrations isotopiques, on constate que les concentrations isotopiques évoluent fortement entre 10 et 60 GWj/t . Par exemple, la concentration de certains isotopes du plutonium est multipliée par plus de 100 sur cet intervalle de temps. On s'attend donc à observer une forte détérioration de la qualité des résultats en fin d'évolution. Mais on ne présentera pas ici l'ensemble des résultats obtenus avec le schéma perturbé. L'analyse des concentrations de trois isotopes (^{238}U , ^{240}Pu et ^{243}Am) suffit à comprendre clairement l'évolution de l'ensemble des résultats. On voit sur le tableau 8.5 et les figures 8.6 à 8.7 que si l'évolution perturbée de quelques isotopes comme ^{238}U est correcte (le paramètre t de la concentration de cet isotope reste inférieur au quantile à 99,9% durant toute l'évolution), il n'en va pas de même avec les autres isotopes. Leurs concentrations peuvent être largement surestimées (comme pour ^{240}Pu) ou sous-estimées (comme pour ^{243}Am). Ceci est dû à l'amplitude des perturbations à la fin de l'évolution. En effet, les résultats obtenus sur ^{238}U sont corrects car la concentration de cet isotope évolue peu (elle diminue de moins de 10% entre 10 GWj/t et 60 GWj/t). En revanche, celle des autres isotopes change radicalement, ce qui induit des valeurs du paramètre t jusqu'à quatre fois supérieures à celle du quantile. Mais le tableau 8.5 montre aussi que si le paramètre t des concentrations isotopiques est généralement bien supérieur à la valeur du quantile à la fin de l'évolution, il peut être inférieur au quantile pour des taux d'irradiation plus faible. Le premier pas où l'on observe un dépassement de la valeur critique est à 30 GWj/t , soit 20 GWj/t d'irradiation avec le schéma perturbé. En démarrant les perturbations à 10 GWj/t , on ne peut donc utiliser le schéma perturbé que pendant trois pas de temps suivants avant que le test de validation n'échoue.

Mais même lorsque le test de validation réussi pour l'ensemble des isotopes, l'utilisation des perturbations a un impact non-négligeable sur la variance des résultats. Par exemple, la figure 8.8 montre que l'erreur statistique de la concentration de ^{240}Pu du calcul perturbé augmente exponentiellement, tandis que celle du calcul de

7. On rappelle qu'au delà de 10 GWj/t le maillage temporel est découpé uniformément par pas de 5 GWj/t .

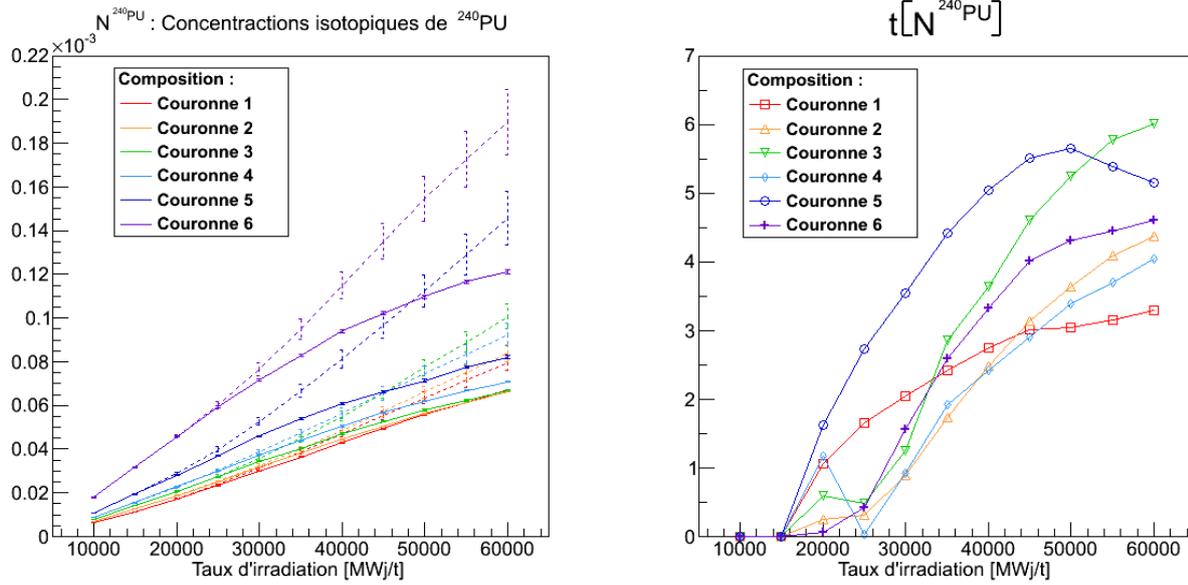


FIGURE 8.6 : Évolution perturbée de la concentration isotopique de ^{240}Pu dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX. Les concentrations isotopiques perturbée (en pointillé) et non-perturbée (en trait plein) de ^{240}Pu de chaque milieu évoluant (en nombre d’atomes par 10^{-24}cm^3) sont affichées à gauche avec leur barre d’erreur (à 1σ) et le paramètre t de cette concentration est affiché à droite.

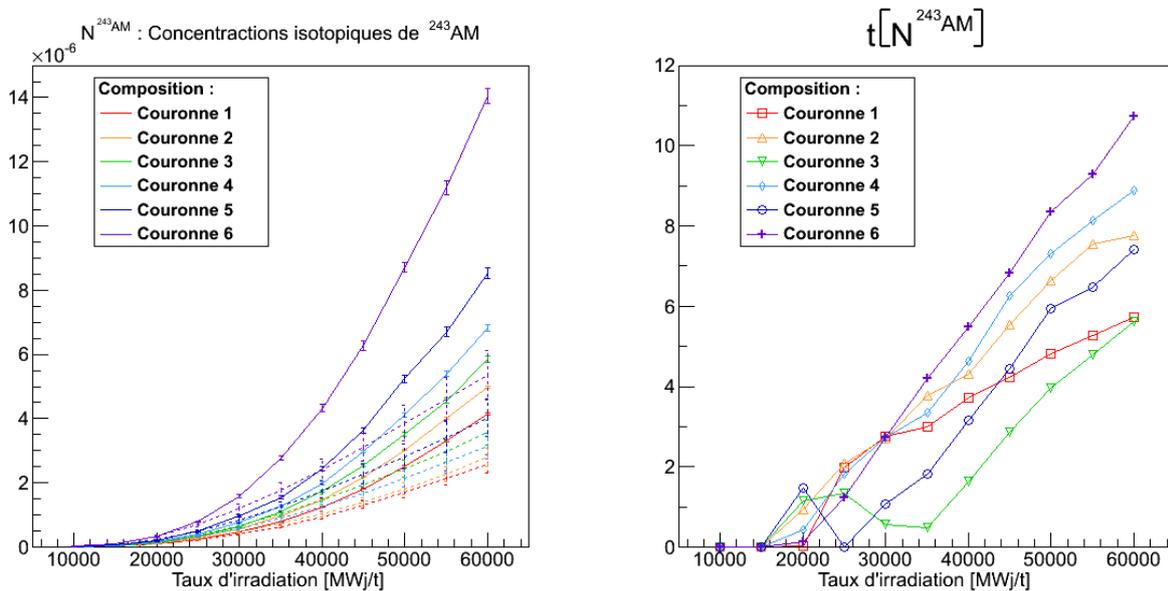


FIGURE 8.7 : Évolution perturbée de la concentration isotopique de ^{243}Am dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX. Les concentrations isotopiques perturbée (en pointillé) et non-perturbée (en trait plein) de ^{243}Am de chaque milieu évoluant (en nombre d’atomes par 10^{-24}cm^3) sont affichées à gauche avec leur barre d’erreur (à 1σ) et le paramètre t de cette concentration est affiché à droite.

Taux d'irradiation	30 GWj/t			60 GWj/t		
Isotope	²³⁸ U	²⁴⁰ Pu	²⁴³ Am	²³⁸ U	²⁴⁰ Pu	²⁴³ Am
Couronne 1	2,4	2,0	2,8	2,8	3,3	5,7
Couronne 2	0,6	0,9	2,7	2,4	4,4	7,8
Couronne 3	1,8	1,2	0,6	2,8	6,0	5,6
Couronne 4	0,4	0,9	2,7	0,1	4,0	8,9
Couronne 5	1,4	3,5	1,1	1,3	5,2	7,4
Couronne 6	0,7	1,6	2,7	1,6	4,6	10,7

TABLEAU 8.5 : Paramètre t de trois concentrations isotopiques après 20 GWj/t et 50 GWj/t d'irradiation perturbée. Le schéma perturbé a démarré à 10 GWj/t. Les valeurs supérieures au quantile à 99,9% sont en rouge.

référence reste stable durant toute l'irradiation. Cette dégradation de la variance des résultats issus de l'échantillonnage corrélé s'observe sur tous les résultats issus du schéma perturbé. Pour ne pas détériorer la variance trop rapidement, il serait donc préférable d'arrêter les perturbations après un pas de temps, ou deux. Mais le gain en terme de temps de calcul doit alors être conséquent pour compenser la faible utilisation des perturbation ainsi que la dégradation (même modérée) de la variance.

8.4.3 Impact sur le temps de calcul

Pour éviter de trop impacter le temps de calcul, les traces sont toutes stockées dans la mémoire vive de l'ordinateur et non sur le disque dur. Cela permet d'obtenir un gain de temps significatif car, d'une part, les accès au disque dur (en lecture et en écriture) sont plus lents que ceux de la mémoire vive et, d'autre part, les différents simulateurs indépendants exécutés parallèlement ne peuvent obtenir un accès simultané au disque dur (alors que cela est possible pour la mémoire vive).

On peut voir sur la figure 8.4 que les simulations Monte Carlo du calcul de référence (hormis celle du premier pas) durent en moyenne entre 80 et 90 secondes. On compare ce résultat au temps de calcul de la première simulation Monte Carlo du calcul perturbé, ralenti par la sauvegarde des traces et qui dure 111 secondes, ainsi que les pas de temps suivant (où les traces sont uniquement perturbées) qui durent en moyenne 68 secondes. On observe donc un ralentissement d'environ 23 % du temps de calcul lors du premier pas du schéma perturbé, suivi d'un gain de l'ordre de 14 à 24 % pour les pas de temps suivant.

Pour savoir si les performances obtenues sont suffisantes, on décompose le gain sur la figure de mérite (Eq. 1.15, page 18) en deux parties :

$$Gain [R] = \frac{\sigma_{ref}^2 [R]}{\sigma^2 [R]} \times \frac{T_{ref}}{T} = Gain [\sigma] \times Gain [T]. \quad (8.2)$$

Le premier terme $Gain [\sigma]$ correspond a priori à une perte, car l'utilisation des perturbations induit une dégradation de la variance des résultats, et le second terme $Gain [T]$ correspond d'abord à une perte (car le premier calcul du schéma perturbé est ralenti) puis à un gain (car l'utilisation de l'échantillonnage corrélé doit permettre d'obtenir une diminution du temps de calcul). Or, la variance des résultats perturbés est au mieux égale à celle du calcul de référence. Donc dans ce cas, c'est-à-dire quand $Gain [\sigma] = 1$, le second terme correspond au gain total obtenu. Il représente donc le gain maximal de l'échantillonnage corrélé. Si l'on ne tient pas compte du coût initial que représente la sauvegarde des traces, le gain de temps est compris entre 1,16 et 1,32. Comme en pratique la variance est très rapidement dégradée (elle est multipliée par plus de 2 après deux pas de perturbations c'est-à-dire 10 GWj/t d'irradiation⁸, et ce, quel que soit le résultat), on comprend que le gain en temps est beaucoup trop faible pour compenser le ralentissement initial dû à la sauvegarde des traces et la dégradation de la variance. Le schéma perturbé ne permet donc pas (pour l'instant) d'améliorer la figure de mérite.

8. Attention, la variance perturbée ne dépend pas du nombre de pas de perturbation (contrairement au gain en temps) mais uniquement de l'amplitude des perturbations. Cela signifie que si le maillage temporel était deux fois moins fin, la variance perturbée aurait doublé au bout d'un pas de perturbation.

Dans la suite de ce chapitre, on analyse les résultats d'un calcul perturbé démarrant à un taux d'irradiation plus avancé. L'objectif de ce calcul est de déterminer si l'on peut améliorer la qualité du calcul perturbé (c'est-à-dire diminuer le paramètre t des différents résultats) en modifiant la valeur du paramètre T_i . On cherchera ensuite à améliorer les performances du calcul perturbé en améliorant le temps de calcul des pas perturbés.

8.4.4 Démarrage retardé des perturbations

On fixe maintenant le démarrage des perturbations à 35 GWj/t . De même que précédemment, les perturbations durent jusqu'à la fin de l'évolution pour analyser la dégradation du calcul en fonction de l'amplitude des perturbations. L'analyse des résultats montre que les concentrations isotopiques évoluent moins rapidement à partir de 35 GWj/t que dans le cas précédent. Par exemple, la concentration de ^{243}Am est multipliée par 160 entre 10 GWj/t et 35 GWj/t et par 5 entre 35 GWj/t et 60 GWj/t . De même, la concentration de ^{240}Pu a été quintuplée entre 10 GWj/t et 35 GWj/t , alors qu'elle n'a même pas doublée entre 35 GWj/t et 60 GWj/t . De ce fait, on espère donc obtenir de meilleurs résultats avec cette valeur de T_i .

Tout comme dans le cas précédent, on constate sur le tableau 8.6 que les concentrations isotopiques obtenues avec le schéma perturbé ne sont compatibles que pendant trois pas de temps avec celles du calcul de référence. Au-delà, certains paramètres t sont supérieurs au quantile à 99,9 %. De plus, on remarque sur la figure 8.9 que les autres observables macroscopiques (ϕ , k_{eff} , P) du calcul perturbé sont toujours compatibles avec celles du calcul de référence. Donc seules les concentrations isotopiques limitent donc la validité du schéma de perturbation, qui semble ne pas aller au-delà de 15 GWj/t d'irradiation quelle que soit la valeur de T_i .

Taux d'irradiation (en GWj/t)	40	45	50	55	60
$\max_i (t [N^i])$	5.10^{-3}	2,4	2,8	3,8	4,2
isotope	^{235}U	^{135}Xe	^{153}Eu	^{153}Eu	^{153}Eu
couronne	2	6	1	1	1

TABLEAU 8.6 : Maximum du paramètre t sur les concentrations isotopiques des différentes couronnes entre 40 et 60 GWj/t d'irradiation. Ce tableau contient pour tous les pas perturbés la valeur maximale du paramètre t observée. L'isotope et la couronne correspondant à cette valeur sont indiqués en dessous. On rappelle que le schéma perturbé a démarré à 35 GWj/t , et les valeurs supérieures au quantile à 99,9% sont en rouge.

Concernant la dégradation de la variance des résultats, on observe la même dégradation des résultats perturbés que dans le cas précédent. L'erreur statistique augmente de plus en plus avec l'amplitude des perturbations, alors que celle du calcul de référence fluctue peu (voir la figure 8.10 pour la concentration isotopique de ^{238}U et pour le facteur de multiplication effectif). Relativement au cas précédent, cette dégradation est toutefois moins importante. Par exemple, la concentration de l'isotope ^{240}Pu est multipliée par un facteur compris entre 3 et 5 après trois pas de perturbation, alors que dans le cas précédent cette même concentration était multipliée par un facteur compris entre 5 et 7. Et on observe le même phénomène sur l'ensemble des résultats. Ceci peut s'expliquer par le fait que pour un même intervalle de taux d'irradiation, l'évolution des concentrations isotopiques est plus lente à partir de 35 GWj/t qu'elle ne l'est à partir de 10 GWj/t . La valeur de T_i a donc une forte influence sur l'erreur statistique des résultats.

Enfin, concernant le temps de calcul, la modification de T_i n'a eu aucune incidence. Le temps de la simulation perturbée n'est que de 12,4 % inférieur à celui du calcul de référence à la fin de l'évolution. Ce n'est toujours pas suffisant pour que la figure de mérite du calcul perturbé soit supérieure à celle du calcul de référence, ce que montre la figure 8.11 avec la mesure du gain obtenu sur l'estimation du facteur de multiplication effectif.

8.5 Méthodes d'accélération de la construction des sections efficaces

Les résultats précédents ne permettent pas encore d'accélérer les calculs Monte Carlo évoluant avec l'échantillonnage corrélé. On peut alors envisager de générer d'autres jeux de traces avant la fin de l'évolution (ce qui se traduit par une diminution de la valeur de ΔT_p). Mais dans ce cas, on diminue le gain en temps $\text{Gain} [T]$ (car une simulation avec enregistrement des traces nécessite plus de temps que la perturbation de ces traces)

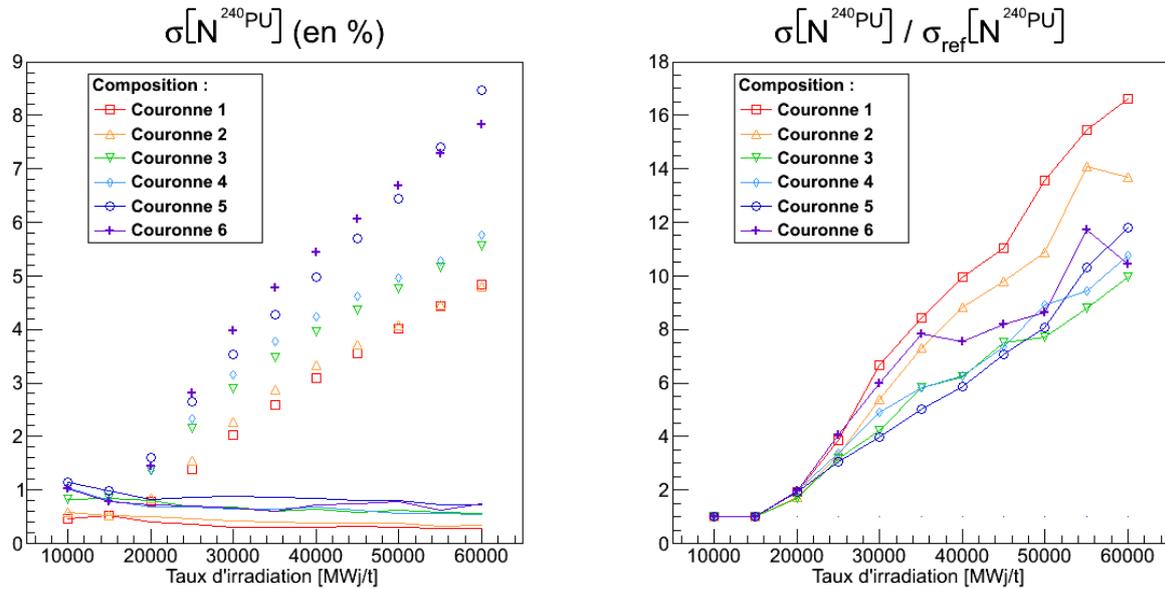


FIGURE 8.8 : Écart type perturbé de la concentration isotopique de ^{240}Pu dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX. Les erreurs statistiques relatives (en %) de la concentration isotopique perturbée (sans trait, avec marqueur) et non-perturbée (avec trait, sans marqueur) de ^{240}Pu de chaque milieu évoluant sont affichées à gauche et les rapports de ces erreurs statistiques perturbées et non-perturbées sont affichés à droite.

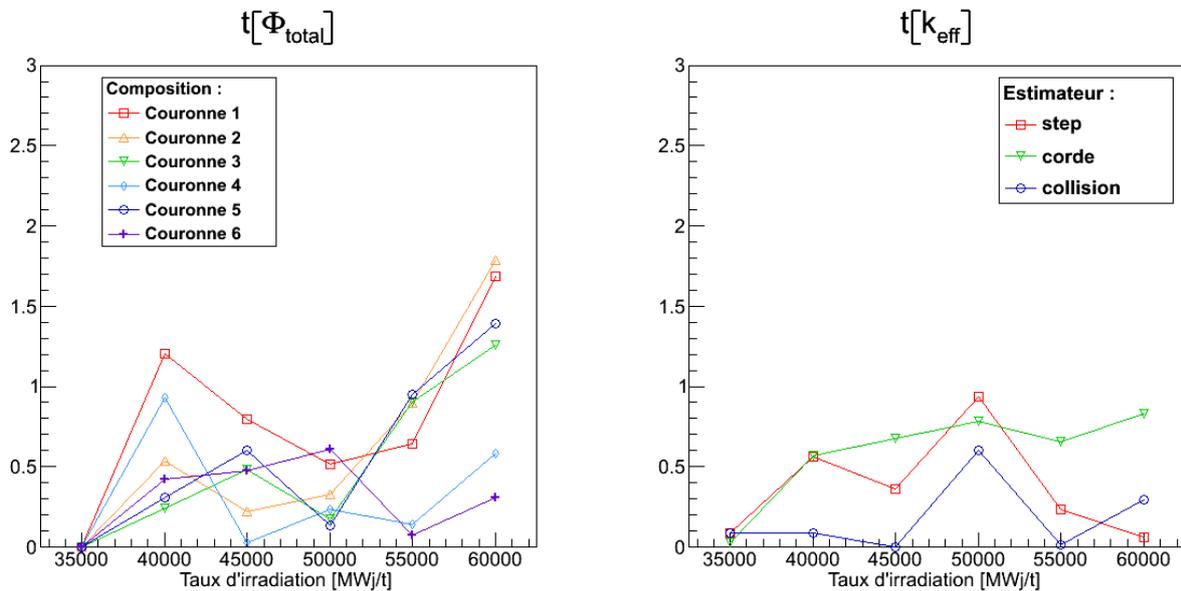


FIGURE 8.9 : Paramètre t du flux total dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif. Le flux volumique total (c'est-à-dire intégré en énergie et en angle, en nombre de neutrons par $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) est affiché à gauche pour chaque milieu évoluant et celui de chaque estimateur du facteur de multiplication effectif est affiché à droite.

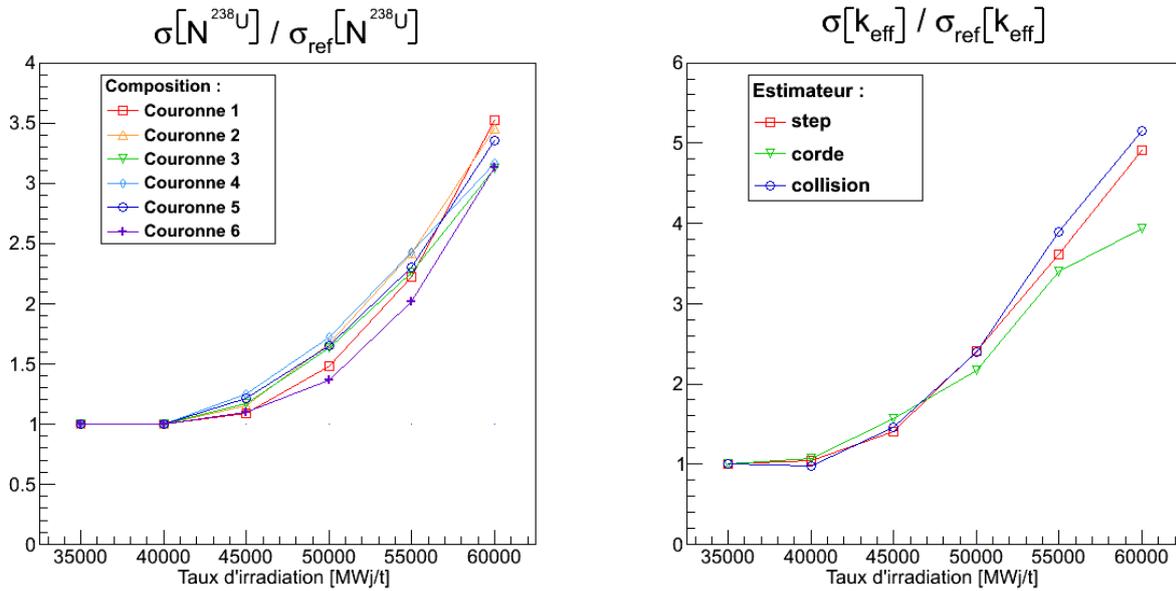


FIGURE 8.10 : Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{238}U (à gauche) dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif (à droite).

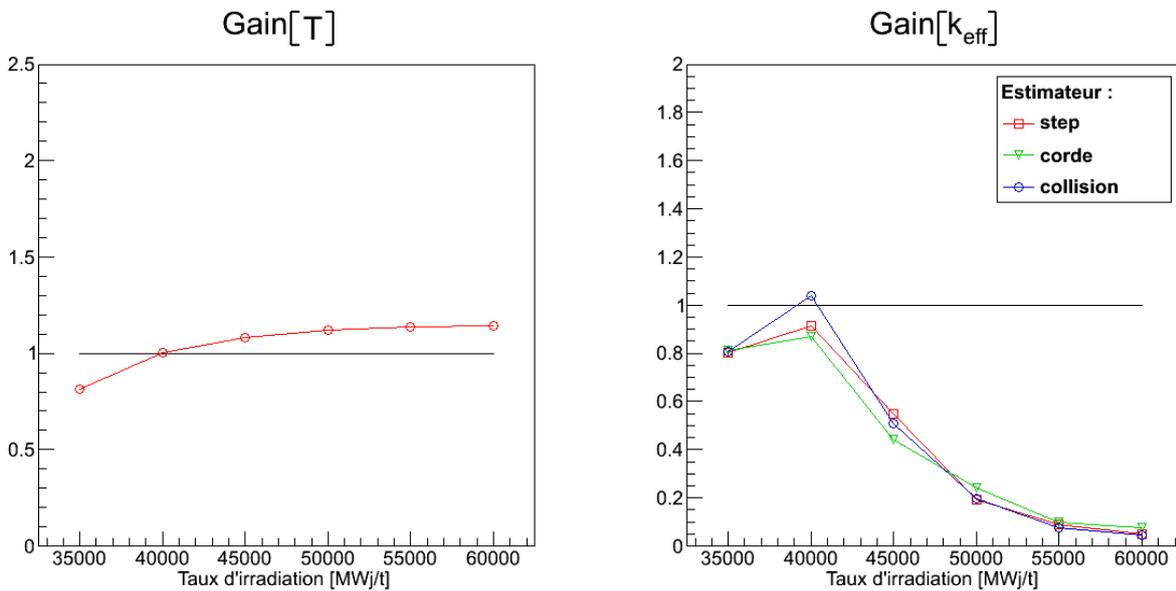


FIGURE 8.11 : Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX. Le gain en temps (Eq. 8.2) est affiché à gauche (en rouge) et celui sur les trois estimateurs du facteur de multiplication effectif est affiché à droite.

mais on améliore la valeur des paramètres t des concentrations isotopiques, ce qui permet d'utiliser le schéma de perturbation sur un intervalle de temps plus grand (mais toujours pas jusqu'à la fin du calcul, à 60 GWj/t). Et concernant la précision des résultats, cela ne permet pas d'éviter la dégradation de la variance mais seulement de la ralentir. En effet, après avoir généré un fichier de traces, la variance est dégradée exponentiellement à chaque pas de temps, ce qui signifie que la vitesse de la dégradation de la variance augmente avec l'amplitude des perturbations. Lorsque l'on génère un nouveau fichier de traces, on diminue cette vitesse mais pas la variance (qui continue donc d'augmenter). Néanmoins, même si les pertes en variance ($\text{Gain}[\sigma]$) sont réduites, les gains en temps ($\text{Gain}[T]$) restent inférieurs. La modification du paramètre ΔT_p n'est alors pas suffisante pour améliorer les performances du schéma perturbé. On cherche donc à mettre en place d'autres solutions qui améliorent le temps d'exécution du code et maintiennent la valeur de la variance sans avoir à modifier la valeur de ΔT_p .

On commence ici par chercher une solution au temps d'exécution du code et on verra, à la fin de ce chapitre, comment palier le problème de la dégradation de la variance. Une analyse de ΔT_p sera faite à ce moment-là.

8.5.1 Profilage du code et optimisation du temps de calcul

Pour accélérer le temps d'exécution du schéma perturbé, on cherche à identifier les méthodes les plus chronophages du code. Un profilage du code source a permis de révéler que la majeure partie du temps de calcul (environ 80 %) était occupée par les méthodes nécessitant le calcul de données nucléaires macroscopiques qui sont utilisées pour perturber les traces et pour calculer les scores. En effet, les corrections de poids de l'échantillonnage corrélé dépendent des sections efficaces macroscopiques totales perturbée et non-perturbée, l'estimateur collision du flux dépend de la section efficace macroscopique totale perturbée et l'estimateur corde du facteur de multiplication effectif dépend de la section efficace macroscopique de fission perturbée et du nombre moyen de neutrons produits par fission. Or, ces données sont très lentes à construire car le découpage énergétique des données microscopiques n'est pas commun à chaque isotope (et parfois il diffère aussi d'une donnée nucléaire à l'autre⁹). Par exemple, lorsque l'on souhaite construire la section efficace macroscopique totale d'un milieu à une énergie donnée, il faut connaître la section efficace microscopique totale de chacun isotope du milieu (il y en a environ 150 dans notre cas) et les sommer en les pondérant par les concentrations isotopiques. Si cette dernière opération est rapide à effectuer, le calcul des sections microscopiques ne l'est pas, car la recherche de la position de l'énergie au sein du découpage énergétique de chaque isotope prend du temps. Et lors de la simulation, ce calcul est réalisé pour toutes les données nucléaires ayant leur propre découpage énergétique lors de chacun des événements de l'histoire des particules que l'on a sauvegardée, ce qui explique la part importante de ces méthodes dans le temps de calcul.

8.5.2 Unification des compositions

Afin de vérifier l'impact sur le temps de calcul de la construction des données nucléaires, on utilise une option de TRIPOLI-4 appelée "unification des compositions". Cette option propose de calculer avant le début de la simulation la section efficace macroscopique totale et la grandeur $\bar{\nu}\Sigma_f = \sum_{i=1}^N \bar{\nu}_i \Sigma_f^i$ (où i est un index sur les N isotopes) de chaque composition sur un découpage énergétique dit "unifié" qui correspond à l'union des différents découpages énergétiques de tous les isotopes de la composition. La connaissance de ces données durant la simulation permet d'accélérer le calcul car une seule recherche dans le découpage énergétique unifié dans chacune des compositions suffit à calculer Σ_t et $\bar{\nu}\Sigma_f$. Cette option remplace donc les N recherches dans les découpages énergétiques des isotopes par une seule. Et comme ces données sont exploitées par plusieurs parties du code (comme l'estimateur collision du flux, l'estimateur corde du facteur de multiplication effectif et l'opérateur de transport), l'impact sur le temps d'exécution est conséquent.

On peut voir sur la figure 8.12 l'effet de cette option sur le temps de calcul (où l'on a volontairement omis le temps d'initialisation de cette option car on souhaite observer l'impact de la construction des données nucléaires sur les temps de calcul). On constate que l'unification des compositions rend presque constant le temps de calcul durant toute l'évolution. Après le premier pas (dont le temps est quasiment identique à celui du calcul sans l'unification des compositions), le temps de calcul de chacun des pas de temps reste compris entre 20 et 23 secondes. Le temps de simulation est donc très proche de celui du premier pas de temps où il n'y a que 5

9. Par exemple, le découpage énergétique du nombre moyen de neutrons produits par fission n'est pas commun à celui de la section efficace microscopique totale.

isotopes dans le combustible¹⁰, ce qui représente un facteur d'accélération en temps d'environ 3,8 pour chaque transport par rapport au calcul sans l'unification. Et comme les calculs en perturbation ont aussi besoin des grandeurs unifiées, on peut espérer que le schéma perturbé soit lui aussi accéléré. On compare donc de nouveau le temps de calcul des schémas perturbé et non-perturbé, mais avec cette option dans les deux schémas. Les résultats obtenus (voir Fig. 8.13) montrent que le premier pas de temps perturbé, où l'on sauvegarde les traces, dure environ 30 secondes, soit un temps 31,5 % plus long que celui de la référence. Ensuite, les autres pas durent seulement 6 secondes, ce qui correspond à un gain de temps compris entre 70 et 73 %. Au final, le gain en temps obtenu à la fin de l'évolution, $Gain [T]$, devient suffisamment conséquent pour avoir un impact significatif sur la figure de mérite. Cette option est donc plus profitable au schéma perturbé qu'au schéma non-perturbé.

Mais si l'utilisation de l'unification permet d'augmenter les gains en temps, la dégradation de la variance n'est pas impactée et reste trop rapide pour améliorer suffisamment la figure de mérite (voir Fig. 8.13). De plus, cette option a d'autres conséquences sur la simulation. La fabrication des données unifiées a un coût important à la fois en temps et en espace, car l'initialisation de cette option dure environ 80 secondes (soit environ 89 % du temps d'une simulation sans l'unification) par composition et elle requiert un espace mémoire très important. Bien que ces inconvénients ne dépendent pas du nombre de particules simulées, le temps d'initialisation et l'espace mémoire occupé sont tout de même proportionnels au nombre de compositions présentes dans la géométrie. Il n'est donc pas envisageable de l'utiliser systématiquement dans toutes les études en évolution.

8.5.3 Généralisation de la méthode d'accélération à l'exploitation de la persistance des données

Afin d'obtenir les mêmes performances que celles obtenues avec l'unification des compositions, mais en essayant d'en éviter les contraintes, on propose d'ajouter au contenu des traces les données nucléaires nécessaires aux calculs en perturbation. On ajoute alors une option au jeu de données d'entrée de TRIPOLI-4 qui indique la liste des interactions dont on souhaite sauvegarder les sections efficaces microscopique, ainsi que les compositions et les isotopes concernés.

Dans les calculs perturbés précédents, il y a en tout trois sections efficaces macroscopiques qui sont nécessaires à la résolution du problème. La méthode de perturbation par échantillonnage corrélé a besoin des sections efficaces macroscopiques totales perturbée et non-perturbée de tous les milieux évoluant. Le calcul du flux nécessite aussi les sections efficaces macroscopiques totales de tous les milieux évoluant, car le calcul en perturbation utilise l'estimateur collision du flux. Et l'estimateur corde du facteur de multiplication effectif nécessite la section efficace macroscopique de fission perturbée multipliée par le nombre moyen de neutrons produits par fission, c'est-à-dire la quantité $\bar{\nu}\tilde{\Sigma}_f = \sum_{i=1}^N \bar{\nu}_i \tilde{\Sigma}_f^i$, pour toutes les compositions. Or, ces valeurs macroscopiques ne sont pas accessibles durant la simulation, car les valeurs des concentrations isotopiques perturbées ne sont pas encore connues. On sauvegarde donc dans les traces la section efficace microscopique totale (σ_t^i) et le produit de la section efficace microscopique de fission et du nombre moyen de neutrons produits par fission ($\bar{\nu}^i \sigma_f^i$) lors de chaque événement de l'histoire des particules (c'est-à-dire à l'énergie précise de chaque collision), et on reconstruit les valeurs macroscopiques perturbées à la volée.

Comme on pouvait s'y attendre, la simulation générant des traces accompagnées de ces données nucléaires est plus lente et nécessite beaucoup plus de mémoire que précédemment. Ainsi, le premier pas en perturbation dure 216 secondes, ce qui représente une augmentation de 140 % du temps de calcul par rapport à la référence. Mais en contrepartie les pas de temps suivants ne durent que 16,5 secondes, soit un gain d'environ 80 % par rapport aux calculs de référence. L'utilisation des données au sein des traces permet donc de diminuer significativement le temps de calcul des pas utilisant les perturbations (voir Fig. 8.14, page 101).

On remarque tout de même que cela n'apporte pas les mêmes performances que l'unification des compositions. Ceci s'explique par le volume de données à traiter. En effet, le volume total de données occupant la mémoire est rapidement plus important que celui de l'unification des compositions, ce qui impacte le temps de calcul. Mais on remarque cependant que le coût initial de cette méthode est beaucoup moins important que celui de l'unification. La première simulation perturbée a duré 105 secondes de plus que la référence, alors que

10. Cela signifie que la plupart du temps le code de transport boucle sur les isotopes uniquement pour construire quelques grandeurs macroscopiques. Or, avec l'unification ces boucles ne sont pas nécessaires, ce qui explique pourquoi le temps de calcul ne dépend (presque) pas du nombre d'isotopes.

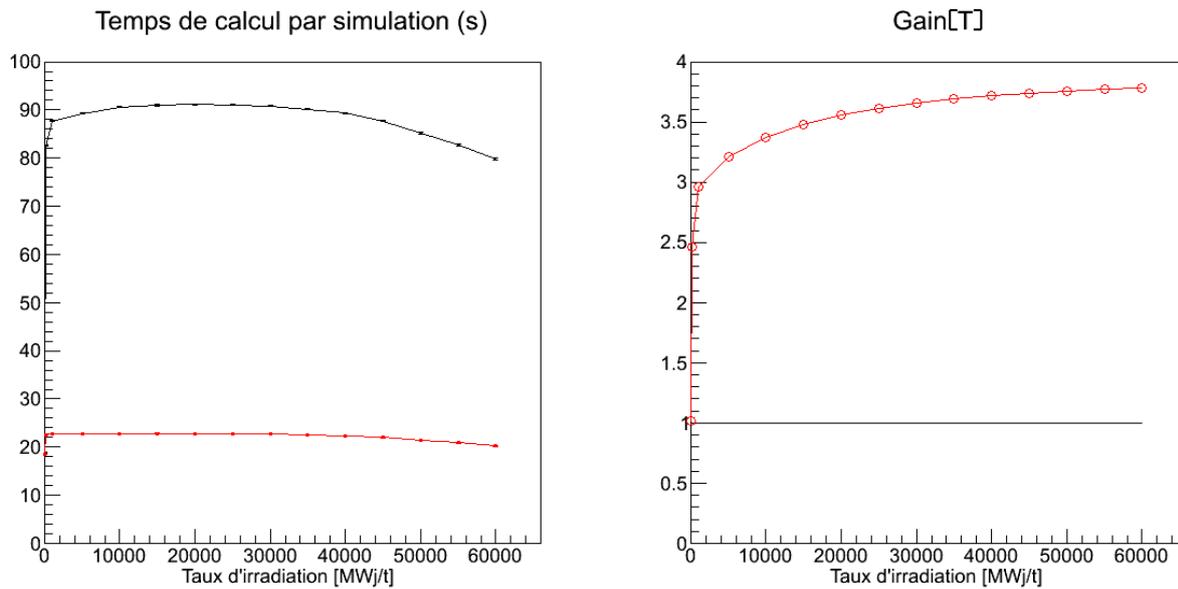


FIGURE 8.12 : Comparaison des temps de calcul de la simulation de référence avec (en rouge) et sans (en noir) l'unification des compositions pour le temps instantané (à gauche) et le temps cumulé, ou gain en temps (à droite).

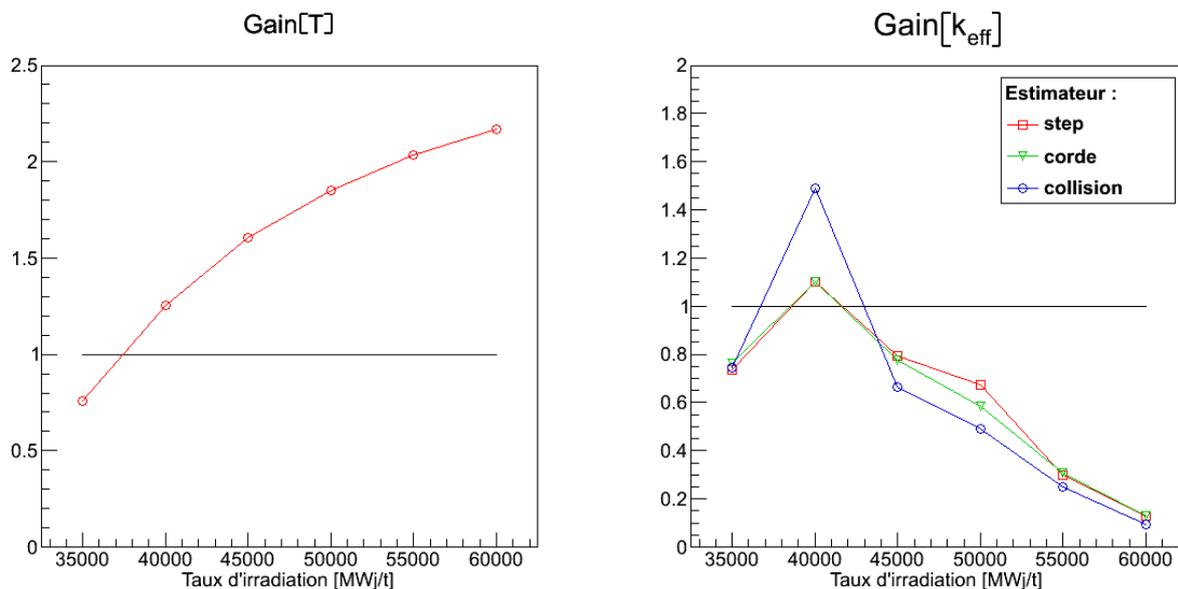


FIGURE 8.13 : Performances du calcul perturbé avec l'unification des compositions de la cellule de combustible UOX. Le gain en temps obtenu en utilisant l'unification des compositions est affiché à gauche (en rouge) et celui sur la variance des trois estimateurs du facteur de multiplication effectif est affiché à droite.

l'initialisation de l'unification des traces dure 80 secondes par composition, soit au total 480 secondes de plus que la référence. Néanmoins, on remarque aussi que si ce coût initial n'est proportionnel pas au nombre de milieux, il augmente avec le nombre de particules simulées. Le coût initial de l'unification peut donc être moins important que celui de l'enregistrement des traces si le nombre de particules simulées était plus important. Or, quelle que soit la géométrie, plus le maillage spatial est fin et plus le nombre de particules à simuler pour éviter les erreurs systématiques [Brun2011] est grand. On peut donc raisonnablement considérer que le nombre de particules simulées augmente donc en même temps que le nombre de milieux évolutifs. De ce point de vue, le coût du stockage des données nucléaires dans les fichiers de traces reste toujours plus faible que celui de l'unification des compositions.

On a donc mis en place une nouvelle façon d'utiliser les données de simulations. L'objectif premier de ces travaux était de perturber un transport Monte Carlo pour remplacer les simulations suivantes. Mais la méthode de perturbation utilisée, l'échantillonnage corrélé, consiste à ré-exploiter l'histoire des particules simulées durant l'évolution des compositions. Avec l'ajout et l'exploitation de données nucléaires dans les traces, le schéma de perturbation mis en place peut être vu, d'un point de vue plus général, comme l'exploitation de la persistance des toutes les données d'une simulation nécessaire au remplacement du transport des pas de temps suivants.

Malgré l'amélioration du temps de calcul, on peut voir sur la figure 8.14, page 101, que ce gain n'est toujours pas suffisant. La dégradation de la variance est toujours trop rapide en comparaison du nombre de pas de temps nécessaires pour qu'un gain en temps apparaisse. Il faut au moins deux pas avec le schéma de perturbation pour compenser le coût initial de la fabrication des traces avec les données nucléaires du premier pas de temps et donc obtenir un gain en temps significatif. Toutefois, ce gain reste inférieur à 2 alors que très rapidement la variance perturbée vaut le double de celle du calcul de référence. Le gain sur la figure de mérite reste alors constamment inférieur à 1. L'optimisation (informatique) de la méthode de perturbation des calculs Monte Carlo évoluant ne suffit donc pas. Il faut maintenant chercher à optimiser l'utilisation de la méthode des échantillons corrélés en vue de minimiser la dégradation de la variance.

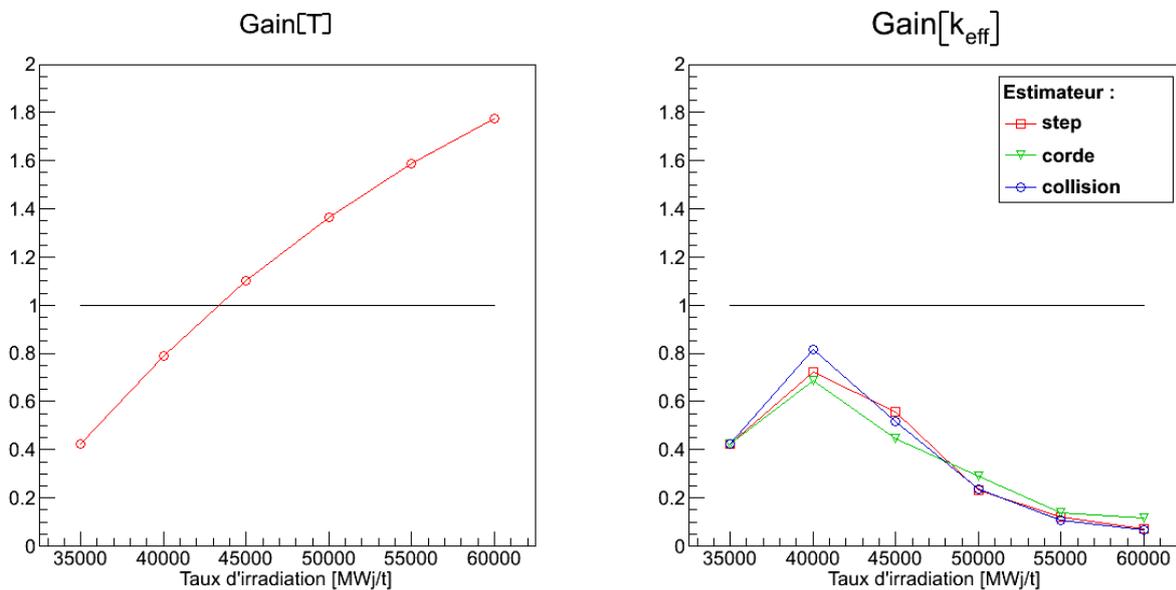


FIGURE 8.14 : Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX avec l'enregistrement des données nucléaires dans le jeu de traces. Le gain en temps obtenu en exploitant les données nucléaires dans les traces est affiché à gauche et le gain sur les trois estimations du facteur de multiplication effectif est affiché à droite.

8.6 Vers des schémas de réduction de variance

On a vu que l'utilisation de l'échantillonnage corrélé peut servir à remplacer les phases de transport Monte Carlo dans un calcul en évolution, mais souffre de plusieurs limitations. La première d'entre elles est directement liée à la principale contrainte de la méthode des échantillons corrélés : on ne peut pas perturber une simulation Monte Carlo avec l'échantillonnage corrélé pour remplacer un autre transport dans lequel des isotopes sont apparus. Par exemple, lorsque l'on simule l'irradiation du combustible nucléaire, il faut attendre que l'ensemble des produits de fission et leurs descendants soient présents dans l'ensemble du combustible. Ensuite, on a constaté que la qualité des résultats perturbés est progressivement détériorée et le test de Student montre que les résultats ne sont plus valides lorsque le taux d'irradiation est trop important (cette erreur systématique avait elle aussi été prédite par la partie théorique). L'état du système tel qu'il était au moment de la génération des traces n'est plus suffisamment représentatif de ce qu'il est devenu à la fin de l'évolution. Il faut donc mettre en œuvre une nouvelle utilisation de l'échantillonnage corrélé permettant de lever ces limitations.

Le jeu de données servant à produire les premières traces utilisées par le schéma perturbé correspondait dans la première partie de cette étude à l'état du système au temps T_i . Mais rien théoriquement n'oblige celui-ci à représenter l'état du système à un quelconque instant de l'évolution. Le jeu de traces pourrait tout aussi bien être simulé dans d'autres conditions. Par exemple, si certains isotopes de la chaîne d'évolution ne sont pas apparus dans tous les milieux évoluant à T_i , il est tout à fait possible de les ajouter au jeu de données servant à générer les traces puisque celui-ci est arbitraire et qu'il ne sert qu'à minimiser la variance de la simulation perturbée représentant l'état réel du système. En effet, si l'échantillonnage corrélé ne permet pas de faire apparaître des isotopes entre la situation initiale (c'est-à-dire celle dans laquelle les traces sont produites) et la situation perturbée (c'est-à-dire celle correspondant à l'évolution réelle du système), rien n'empêche en revanche d'en faire disparaître. De ce fait, on peut chercher à optimiser le jeu de concentrations isotopiques pour minimiser la dégradation de la variance en utilisant un jeu de compositions arbitraire, ce qui permettrait d'utiliser le schéma perturbé sur l'ensemble de l'évolution. Cette optimisation peut être assimilée à une technique de réduction de variance, puisque dans un calcul Monte Carlo statique, ces techniques modifient certains paramètres physiques (comme les densités de probabilités des événements subis par les particules) pour améliorer la précision et/ou le temps du calcul.

Suivant cette idée, en plus d'ajouter les isotopes non-présents, on peut aussi améliorer la valeur des concentrations des isotopes déjà présents. Par exemple, pour le premier intervalle de perturbation, c'est-à-dire entre T_i et $T_i + \Delta T_p$, on peut améliorer la représentativité des traces durant tout cet intervalle de temps en utilisant le jeu de concentrations d'un autre instant que T_i (car les traces de ce pas de temps sont trop différentes de celles à $T_i + \Delta T_p$). Sous réserve de connaître a priori l'évolution des concentrations isotopiques entre T_i et $T_i + \Delta T_p$, ou du moins d'en avoir une estimation suffisamment proche¹¹, on peut alors imaginer diverses solutions :

- La première consiste à minimiser l'erreur obtenue à la fin de l'intervalle de perturbation. Pour cela, on pourrait utiliser les concentrations à $T_i + \Delta T_p$. Toutefois, cette solution risque de générer des erreurs systématiques dès les premiers pas de calcul en perturbation. Et ces erreurs se propageraient durant le reste du calcul. Cette solution n'est donc pas acceptable car il faut minimiser l'écart entre les concentrations isotopiques utilisées pour générer les traces et celle de tous les pas de temps de l'intervalle de perturbation.
- De ce fait, on imagine facilement que celles à $T_i + \Delta T_p/2$ représentent une solution convenable. D'ailleurs, avec ces concentrations, on s'attend à ce que la variance des résultats perturbés soit égale à celle du calcul de référence à $T_i + \Delta T_p/2$. Néanmoins, l'évolution des concentrations isotopiques n'est pas nécessairement linéaire. Les concentrations à $T_i + \Delta T_p/2$ peuvent donc tout de même être très éloignées de celles d'une partie de l'intervalle de perturbation, ce qui risque de créer des erreurs systématiques. De plus, l'étude du modèle théorique (Part. III) montre que la dégradation de la variance est plus forte lorsque les concentrations isotopiques sont plus fortes que les concentrations initiales (c'est-à-dire lorsque l'on perturbe en diminuant les concentrations). Or, dans cette étude, la plupart des éléments sont des produits de fission dont le nombre augmente avec l'irradiation. En choisissant un jeu de concentrations entre T_i et $T_i + \Delta T_p/2$, on peut espérer minimiser la variance dès les premiers pas d'irradiation. De ce fait, on utilisera les concentrations à $T_i + \alpha \Delta T_p$, avec $\alpha \in [0; 1]$, où le choix de la valeur de α dépend de l'évolution des concentrations.
- Plus généralement, au lieu de choisir l'un des pas de temps de l'évolution, on peut aussi générer des

11. La façon d'obtenir cette connaissance sera discutée par la suite.

compositions totalement arbitraires (voire absurdes) dont on optimise chaque concentration isotopique une à une. Par exemple, on peut utiliser la moyenne de la concentration de chaque noyau sur l'intervalle de perturbation. Cette solution a alors l'avantage de minimiser l'amplitude des perturbations sur l'ensemble de l'intervalle de perturbation, mais les traces sont produites dans un système dont la physique peut être très éloignée de celle du système réel, ce qui pourrait aussi générer des erreurs systématiques.

Dans cette dernière partie du chapitre, on met en place cette optimisation en choisissant la seconde solution. Celle-ci semble être la plus efficace (à condition de trouver une valeur de α convenable) et la plus rapide à mettre en place. On montrera comment on obtient la connaissance a priori de l'évolution du système nécessaire à la mise en œuvre de cette optimisation, ainsi que les gains obtenus sur la variance du calcul perturbé.

8.6.1 Procédure d'optimisation des concentrations isotopiques du jeu de traces

Comme l'objectif recherché est de trouver un jeu de concentrations isotopiques le plus proche possible des concentrations à $T_i + \alpha\Delta T_p$, avec $\alpha \in [0; 1]$, on propose d'effectuer un premier calcul d'évolution pour estimer ces concentrations. Comme aucune précision sur les résultats n'est requise, cette simulation peut être réalisée avec le même code Monte Carlo évoluant, dont on peut éventuellement restreindre le nombre de pas de temps et/ou le nombre de particules simulées, ou encore avec un code déterministe. Néanmoins, on préfère tout de même effectuer cette simulation dans les mêmes conditions afin d'éviter d'introduire des biais systématiques trop importants sur l'estimation des concentrations recherchées. Pour pouvoir utiliser la méthode des échantillons corrélés même lorsque des isotopes apparaissent d'un pas de temps à l'autre, on ajoutera cependant systématiquement à chaque milieu évoluant les isotopes de la chaîne d'évolution qui ne sont pas présents en leur affectant une concentration (minimale) arbitraire. Ainsi, les concentrations isotopiques de ce calcul peuvent être utilisées pour perturber l'ensemble de l'évolution, tout en minimisant la dégradation de la variance des résultats.

Enfin, on note que seul le second calcul d'évolution est parallélisé en plusieurs simulations indépendantes. Comme chacun des simulateurs produit un jeu de traces à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires initialisés avec une graine unique, il n'est pas nécessaire que les concentrations isotopiques du jeu de traces soient elles aussi propres au simulateur. Le premier calcul en évolution n'est donc pas parallélisé et le temps de calcul de celui-ci est alors négligeable en comparaison du temps de calcul de l'ensemble des simulateurs de la seconde évolution et ne sera donc pas pris en compte lors de la mesure de performances.

L'ensemble de cette procédure est présenté sur l'algorithme 8.1 (page 105), ainsi que sur la figure 8.15 (page 104) pour $T_i = 0$ ¹².

Remarque :

Les concentrations isotopiques n'évoluent pas linéairement au cours de l'irradiation. Les concentrations à $T_i + \Delta T_p/2$ ne sont donc pas nécessairement les plus représentatives de celles sur l'intervalle $[T_i ; T_i + \Delta T_p]$. De plus, on a vu dans la partie III que la méthode des échantillons corrélés était plus adaptée à des perturbations augmentant les concentrations isotopiques. Or, à part quelques isotopes (tel que ²³⁵U et ²³⁸U), la plupart des éléments apparaissent progressivement. On préférera donc en général utiliser les concentrations isotopiques du premier calcul les plus proches de $T_i + \Delta T_p/3$, c'est-à-dire pour $\alpha = 1/3$, plutôt qu'à $T_i + \Delta T_p/2$. L'expérience montre que la qualité des résultats est bien améliorée avec ce choix.

8.6.2 Validation des résultats

Au début de l'irradiation de la cellule, il n'y a que trois isotopes dans le combustible et les concentrations isotopiques évoluent très rapidement sur les premiers pas de temps. Aussi, si l'on commence le nouveau schéma perturbé au tout début de l'évolution, le premier jeu de traces (produit avec l'estimation des concentrations à $\Delta T_p/3$) ne sera pas représentatif des concentrations initiales. On préfère donc démarrer ce schéma après les trois premiers pas de temps, soit à $T_i = 5 GWj/t$. De plus, il faut fractionner le plus possible l'évolution pour que les différents jeux de traces soient toujours les plus représentatifs possible (c'est-à-dire avoir plusieurs jeux de traces à différents pas de temps pour minimiser la variance sur toute l'évolution). Le paramètre ΔT_p ne doit donc pas couvrir l'ensemble du calcul. On choisit alors de séparer le calcul en deux parties. La première

12. T_i est fixé à 0 sur la figure 8.15 par soucis de lisibilité du schéma.

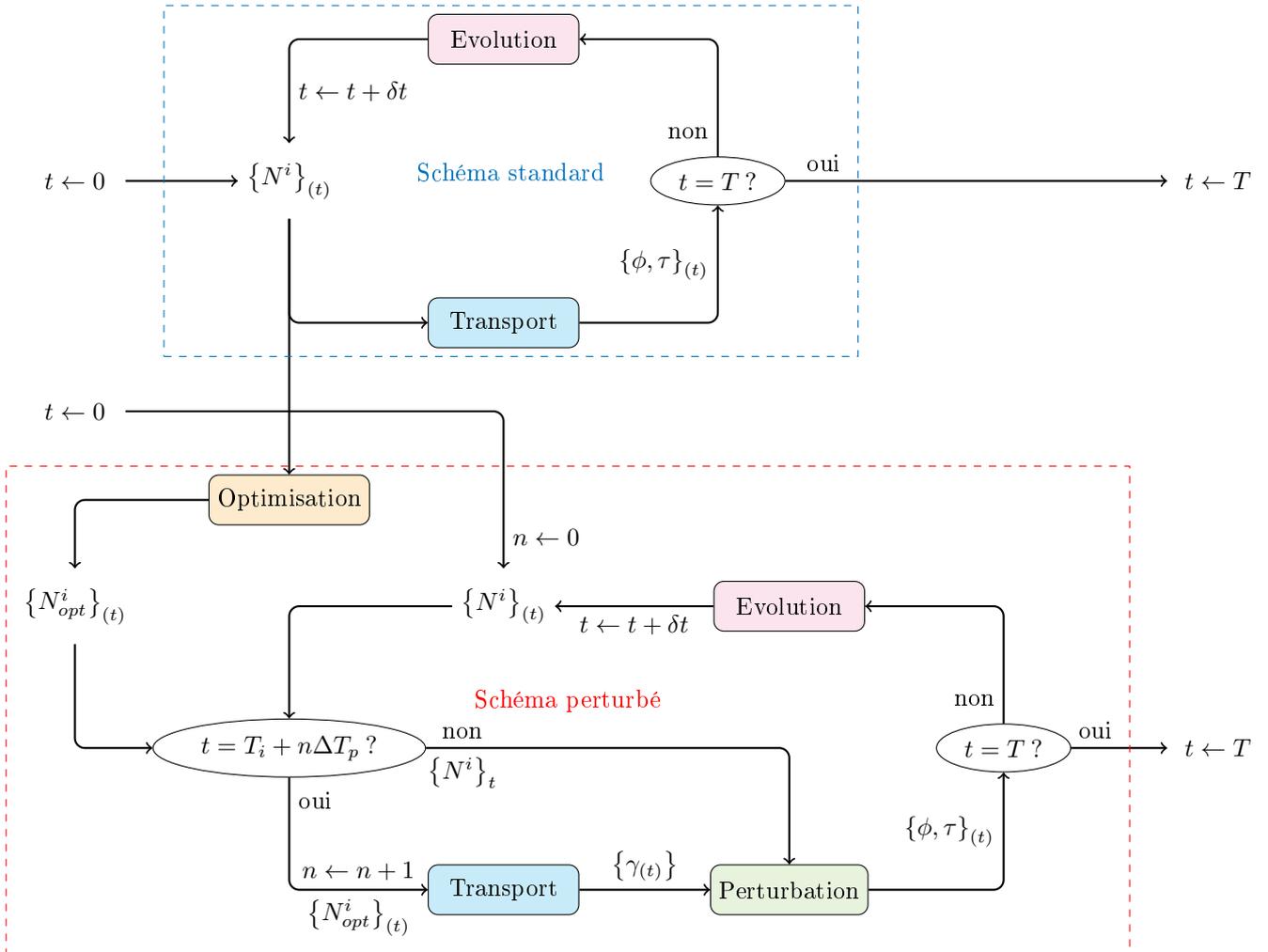


FIGURE 8.15 : Schéma d’Euler perturbé avec la méthode de réduction de variance. Le schéma est encore divisé en deux phases, mais ici les deux phases sont réalisées entièrement. La première (entourée par des pointillés bleus) n’est pas perturbée et sert à estimer l’évolution des concentrations isotopiques. Elle ne sera réalisée qu’une seule et unique fois. Ensuite, la seconde phase (qui est entièrement perturbée ici, c’est-à-dire que $T_i = 0$) utilise les résultats de la première phase, en les optimisant (en orange) pour ajouter les noyaux non présents au début de chaque intervalle de perturbation mais qui peuvent apparaître durant ces intervalles. Ces concentrations seront utilisées par le code de transport pour générer les traces. Seule cette seconde phase est dupliquée en simulateurs indépendants.

Algorithme 8.1 Optimisation des concentrations isotopiques pour la création des traces.

ENTRÉE : $\{N^i\}_{(t=0)}$, T , δt , $T_i < T$, ΔT_p

$t \leftarrow 0$

procédure $\langle \text{SCHÉMA TEMPOREL} \rangle(0, T, \delta t)$ ▷ Premier calcul sans perturbation

pour $i = 1$ **jusqu'à** N **faire**

si $N_{opt}^i(t) = 0$ **alors**

$N_{opt}^i(t) \leftarrow N_{min}^i$ ▷ On ajoute les isotopes non présents

fin si

fin pour

$\{N_{opt}^i\}_{(t)} \leftarrow \{N^i\}_{(t)}$ ▷ Sauvegarde des concentrations isotopiques

fin procédure

$t \leftarrow 0$ ▷ On recommence l'évolution avec les résultats précédents

procédure $\langle \text{SCHÉMA TEMPOREL} \rangle(0, T_i, \delta t)$ ▷ Initialisation sans perturbation

fin procédure

$t \leftarrow T_i$ ▷ Début de l'évolution perturbée

tant que $t < T$ **faire**

$\{\gamma(t)\} \leftarrow \text{TRIPOLI} \left[\{N_{opt}^i\}_{(t+\Delta T_p/2)} \right]$ ▷ Utilisation des concentrations du premier calcul

procédure $\langle \text{SCHÉMA PERTURBÉ} \rangle(t, t + \Delta T_p, \delta t, \{\gamma(t)\})$

fin procédure

$t \leftarrow t + \Delta T_p$

fin tant que

SORTIE : $\forall t \in [0; T], \{N^i\}_{(t)}$

commence à 5 GWj/t et dure $\Delta T_p = 20 \text{ GWj/t}$. La seconde, qui démarre donc à 25 GWj/t , contient le reste de l'évolution. Cela correspond à

$$\begin{cases} T_i & = 5 \text{ GWj/t} \\ \Delta T_p & = \{20 \text{ GWj/t}, 35 \text{ GWj/t}\} \end{cases}$$

Le premier intervalle de perturbation est donc moins étendu que le second afin de mesurer la qualité du calcul perturbé en fonction de la valeur de ΔT_p . De plus, on choisit d'utiliser les concentrations du premier calcul à 10 GWj/t et à 30 GWj/t .

L'analyse de l'ensemble des résultats du calcul perturbé montre que la quasi-totalité des résultats étudiés ont un paramètre t inférieur au quantile à 99,9 % jusqu'à 50 GWj/t . Seul l'isotope ^{153}Eu dans la troisième couronne et au taux d'irradiation 10 GWj/t présente un paramètre t supérieur à la valeur critique (il vaut $3,187 (\pm 0,001)$) et au-delà de 50 GWj/t la plupart des résultats ne sont plus corrects. On peut donc considérer que la méthode produit des résultats valides lorsque l'intervalle de perturbation ΔT_p n'est pas trop important, c'est-à-dire inférieur à 30 GWj/t . Le second intervalle de perturbation aurait dû donc être scindé en deux pour que le schéma perturbé donne des résultats compatibles avec ceux de la référence jusqu'à la fin de l'évolution.

8.6.3 Dégradation de la variance

La figure 8.16, page 107, donne le rapport des erreurs statistiques perturbée et non-perturbée du flux total de chacune des couronnes de la cellule et du facteur de multiplication effectif en fonction du taux d'irradiation. Cette figure montre qu'avec cette nouvelle procédure de perturbation la dégradation de la variance est radicalement différente. Sur chaque intervalle de perturbation, l'erreur statistique décroît dans un premier temps, puis augmente dans un second temps. Elle atteint un minimum très proche de la valeur du calcul de référence autour des taux d'irradiations correspondants aux jeux de concentrations isotopiques qui ont servis à produire les traces, c'est-à-dire autour de 10 GWj/t et à 30 GWj/t .

Ceci démontre bien la possibilité de maintenir la valeur de la variance au même niveau que de celle du calcul de référence. En effet, la dégradation de la variance ne dépend pas du nombre de pas de temps des différents intervalles de perturbation, mais seulement de l'amplitude de la perturbation des concentrations, c'est-à-dire de l'écart entre les compositions du calcul et celles utilisées pour fabriquer les traces. On peut donc minimiser cette dégradation en choisissant des intervalles de perturbation de plus petite taille. Mais cela nécessite par conséquent un découpage temporel plus fin, car il faut plusieurs pas de temps au sein de chaque intervalle de perturbation pour maximiser le gain en temps de calcul.

Toutefois, avec la figure 8.17, page 107, qui montre le rapport des variances des concentrations isotopiques de ^{235}U et ^{239}Pu en fonction du taux d'irradiation, on remarque que les erreurs statistiques des concentrations isotopiques perturbées sont généralement plus importantes que celles des autres scores (c'est-à-dire du flux, de la puissance et du facteur de multiplication effectif, voir Fig. 8.16) et son minimum est généralement supérieur à celui du calcul de référence. L'estimation de l'évolution de l'inventaire isotopique est donc plus sensible à l'amplitude des perturbations que les autres grandeurs du problème.

8.6.4 Mesure des performances

Les temps de calcul des différents pas du schéma perturbé restent identiques à ceux de la dernière étude, car la nouvelle procédure mise en place n'impacte que la variance des résultats. Toutefois, un nouveau jeu de traces a été généré à 25 GWj/t , ce qui diminue le gain en temps sur la seconde moitié de l'évolution.

On peut voir sur la figure 8.18 que l'amélioration de la variance profite régulièrement à la figure de mérite du calcul perturbé, plus particulièrement lorsque la variance est minimale. Mais celle-ci reste presque constamment inférieure à celle du calcul de référence et est au mieux équivalente à cette dernière. La procédure de réduction de variance mise en place ne permet donc pas encore d'accélérer les calculs en évolution.

8.7 Impact du découpage temporel sur la figure de mérite

Comme cela a été suggéré précédemment, les performances de la méthode sont impactées par le découpage temporel : plus celui-ci est fin, plus la figure de mérite relative de la méthode est élevée. En effet, raffiner le découpage a pour effet de réduire la dégradation de la variance et d'augmenter le gain en temps car on peut définir des intervalles de perturbation de plus petite taille (ce qui améliore $\text{Gain}[\sigma]$) et dans lesquels il y a plus de pas de temps (ce qui améliore $\text{Gain}[T]$).

Pour tester cette hypothèse, on réalise des simulations de la cellule REP où on modifie le découpage temporel de la simulation à partir de 5 GWj/t , en utilisant un pas de temps de 1 GWj/t jusqu'à 15 GWj/t . De même que précédemment, on fractionne l'évolution en deux intervalles de perturbation. Le premier démarre à 5 GWj/t et dure $\Delta T_p = 5\text{ GWj/t}$. Le second, qui démarre donc à 10 GWj/t , contient le reste de l'évolution. Cela correspond donc à

$$\begin{cases} T_i &= 5\text{ GWj/t} \\ \Delta T_p &= 5\text{ GWj/t} \end{cases}$$

Et concernant les jeux de compositions utilisés pour générer les traces, on choisit d'utiliser ceux du pré-calcul à 7 GWj/t et à 12 GWj/t , c'est-à-dire que l'on fixe $\alpha = 2/5$.

L'analyse des résultats issus du schéma de perturbation montre que la totalité des résultats ont un paramètre t inférieur à 2,6 sur toute l'évolution, ce qui valide l'utilisation des perturbations sur l'ensemble du calcul (le quantile à 99,9 % vaut 3,132). De plus, on constate que la variance des résultats varie de la même façon que précédemment mais avec des amplitudes de variation beaucoup moins importantes. Ainsi, l'erreur statistique des concentrations isotopiques perturbées reste toujours inférieure à trois fois celle de la référence et l'erreur statistique des autres scores (qui est là aussi est moins dégradée que celle des concentrations isotopiques) est équivalente à l'erreur du calcul de la référence (on observe moins de 50 % d'écart entre les deux simulations). Ces résultats sont illustrés sur les figures 8.19, page 109, et 8.20, page 110, où l'on affiche le rapport des erreurs statistiques perturbée et non-perturbée de deux concentrations isotopiques (celles de ^{235}U et ^{239}Pu) et de deux scores macroscopiques (celles du flux total et du facteur de multiplication effectif) en fonction du taux d'irradiation. Ces figures montrent bien que la variance perturbée des scores macroscopiques est presque identique à

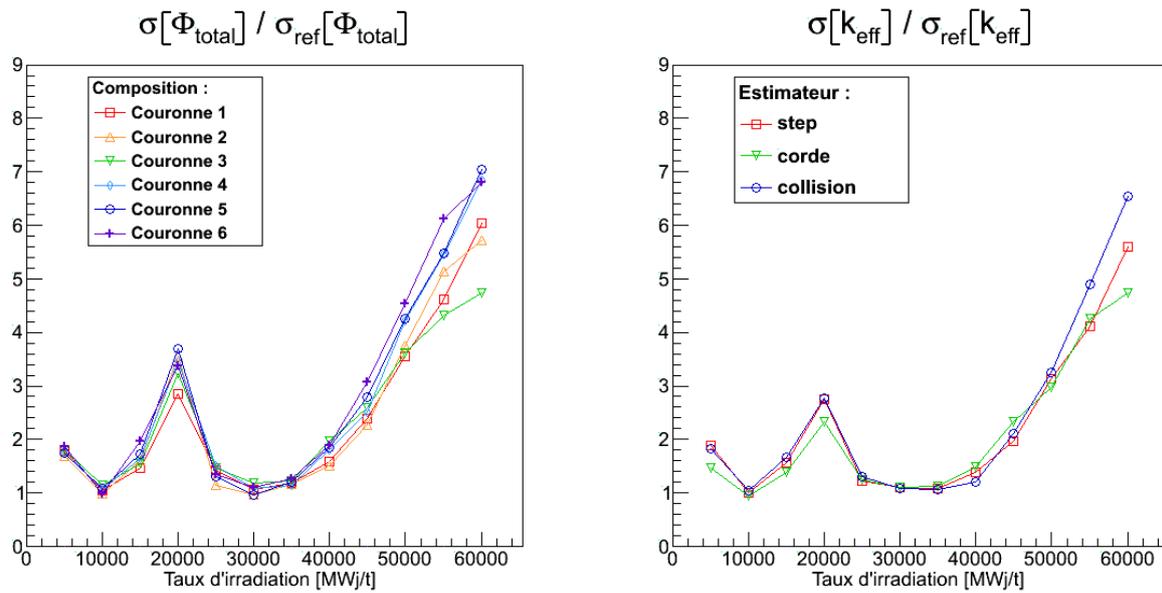


FIGURE 8.16 : Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation du flux volumique total (à gauche) dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif (à droite) avec la procédure de réduction de variance (Alg. 8.1).

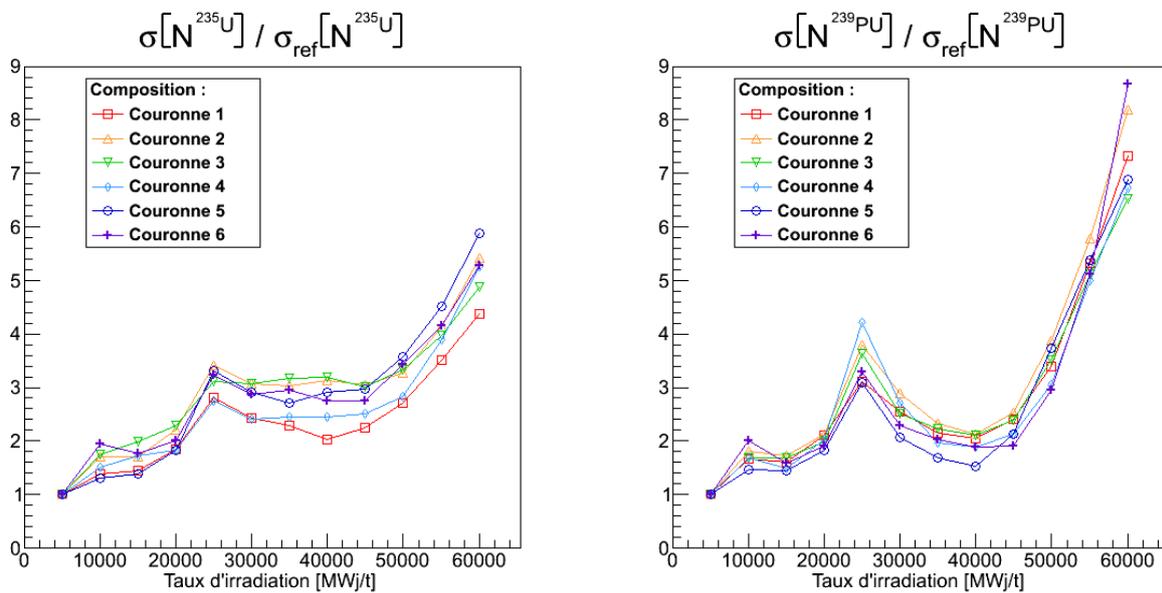


FIGURE 8.17 : Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{235}U (à gauche) et de ^{239}Pu (à droite) dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX avec l'utilisation de la procédure de réduction de variance (Alg. 8.1).

celle du calcul de référence, alors que celle des concentrations isotopiques croît progressivement. Cette différence entre ces scores sera expliquée dans le prochain chapitre.

Enfin, la figure 8.21 montre les gains obtenus sur le temps de calcul et sur les trois estimateurs du facteur de multiplication effectif de la cellule REP en fonction du taux d'irradiation. Cette figure prouve que la nouvelle procédure de perturbation mise en place (utilisant les compositions d'un pré-calcul et stockant des données nucléaires dans les traces) permet d'accélérer la méthode Monte Carlo en évolution. Toutefois, si le gain obtenu sur le k_{eff} peut paraître faible (il reste inférieur à 2), il faut tenir compte de la complexité du système. En effet, comme la géométrie du problème contient très peu de volumes (8 au total), le suivi de la trajectoire des particules est relativement rapide. Or, l'utilisation de la méthode des échantillons corrélés doit permettre d'accélérer le temps de calcul, notamment en évitant ce suivi. Le gain en temps que le schéma de perturbation peut obtenir est donc faible en comparaison de celui d'un calcul ayant une géométrie très complexe (comme celle d'un cœur de réacteur complet par exemple). Et comme la variance des concentrations isotopiques est plus importantes que celle des autres scores et que le temps de calcul est commun à l'ensemble des résultats, on observe que la figure de mérite des concentrations isotopiques reste quant à elle inférieure à celle du calcul de référence.

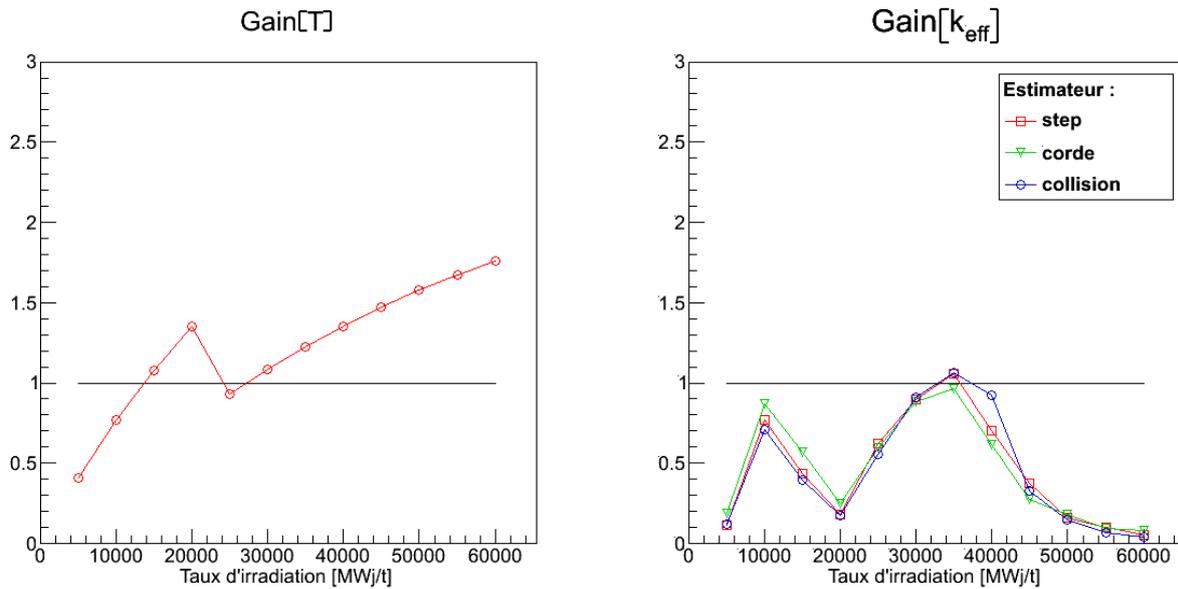


FIGURE 8.18 : Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX avec l’enregistrement des données nucléaires dans le jeu de traces et la procédure de réduction de variance (Alg. 8.1). Le gain en temps obtenu en exploitant les données nucléaires dans les traces est affiché à gauche (en rouge) et le gain sur la variance des trois estimateurs du facteur de multiplication effectif est affiché à droite.

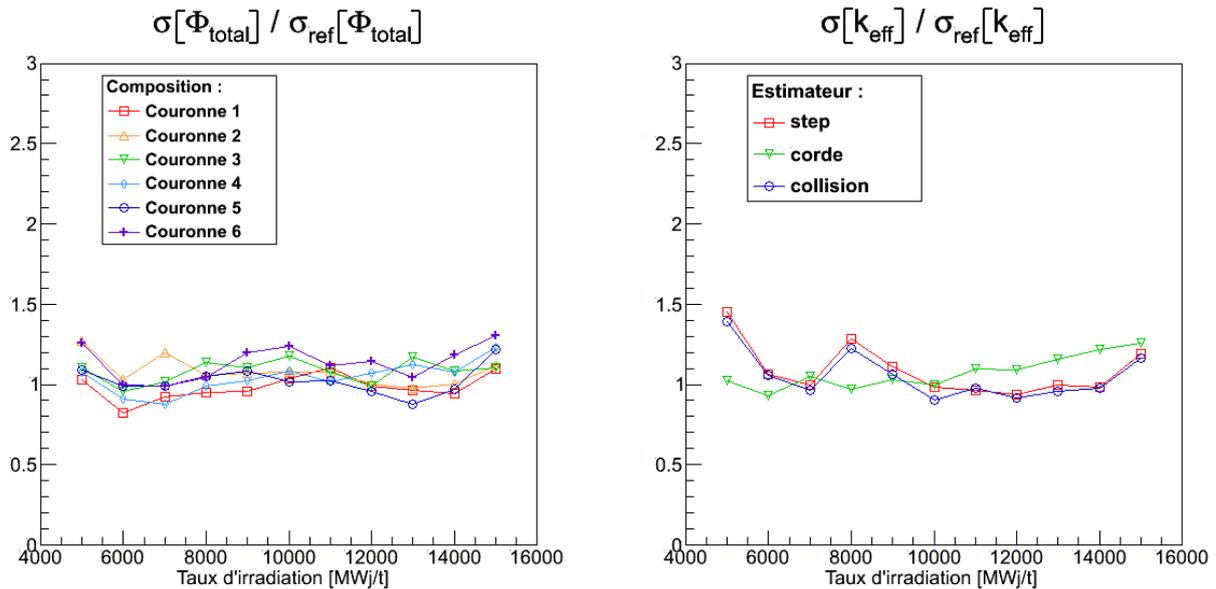


FIGURE 8.19 : Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l’estimation du flux volumique total (à gauche) dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX et du facteur de multiplication effectif (à droite) avec la procédure de réduction de variance (Alg. 8.1) et un découpage temporel fin.

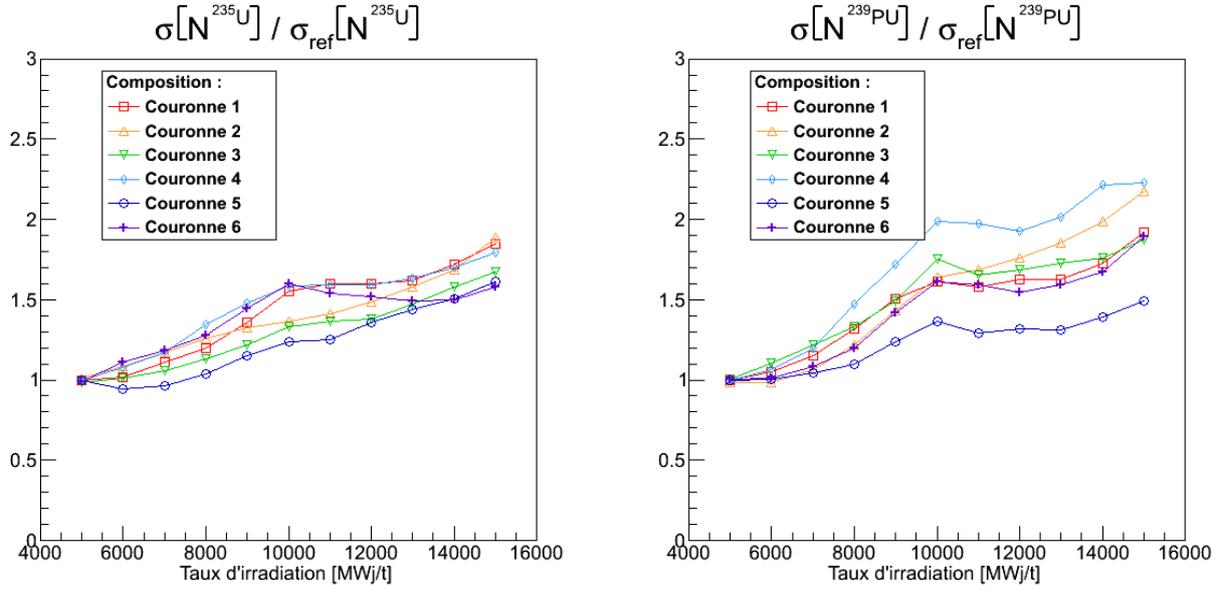


FIGURE 8.20 : Rapport des écarts types perturbé et non-perturbé sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{235}U (à gauche) et de ^{239}Pu (à droite) dans les 6 couronnes de la cellule de combustible UOX avec l'utilisation de la procédure de réduction de variance (Alg. 8.1) et un découpage temporel fin.

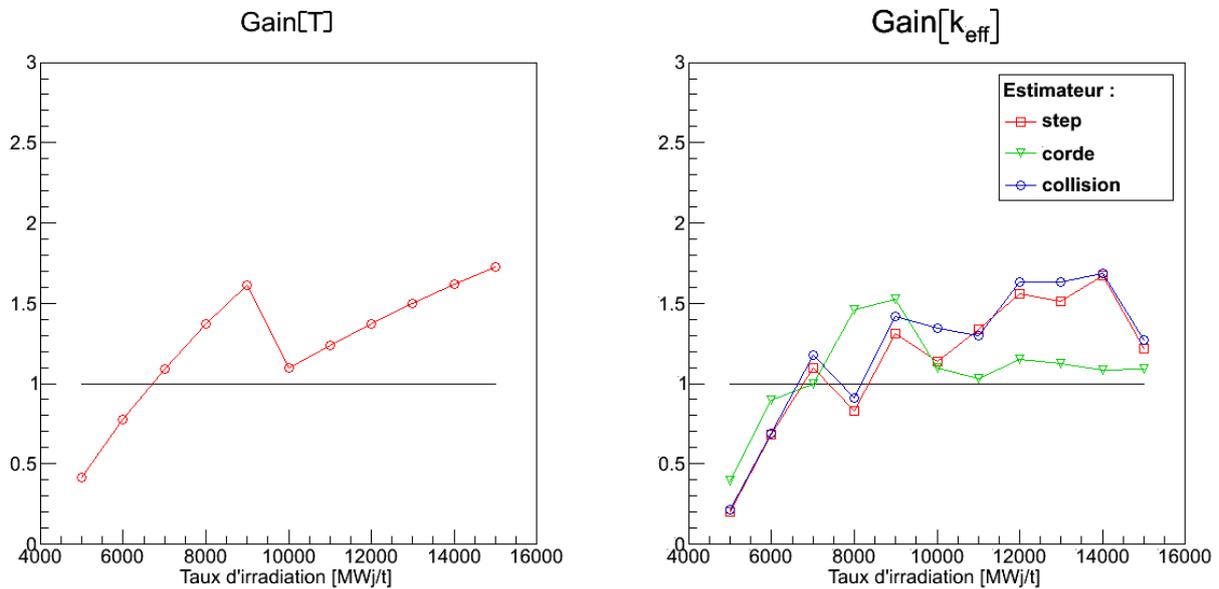


FIGURE 8.21 : Performances du calcul perturbé de la cellule de combustible UOX avec l'enregistrement des données nucléaires dans le jeu de traces, la procédure de réduction de variance (Alg. 8.1) et un découpage temporel fin. Le gain en temps obtenu en exploitant les données nucléaires dans les traces est affiché à gauche et le gain sur les trois estimations du facteur de multiplication effectif est affiché à droite.

Références

- [Brun2011] E. BRUN, E. DUMONTEIL et F. MALVAGI, “Systematic uncertainty due to statistics in Monte Carlo burnup codes : Application to a simple benchmark with TRIPOLI-4-D”, *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, p. 879-885, 2011.
- [Dieu2013] C. DIEUDONNÉ, E. DUMONTEIL, F. MALVAGI et C. M. DIOP, “Monte Carlo burnup code acceleration with the correlated sampling method. Preliminary test on an UOX cell with TRIPOLI-4”, *Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2013)*, Sun Valley, Idaho, USA, mai 2013.

Application à l'étude d'un assemblage en début de cycle

L'objectif de ce chapitre est de quantifier et de mesurer les performances du schéma de perturbation avec la procédure de réduction de variance développée dans le chapitre précédent dans un contexte où tous les éléments de la chaîne d'évolution ne sont pas encore apparus. Pour cela, on teste ce schéma sur un cas complexe et réaliste : l'étude d'un assemblage de combustible UOX en début de cycle (c'est à dire de 0 à 14 GW_j/t). Cette étude doit permettre de valider l'efficacité de la méthode de réduction de variance dans un cadre a priori contraignant pour la mise en œuvre des perturbations en évolution (car l'apparition des différents éléments de la chaîne d'évolution est associée à de très fortes amplitudes de perturbations). On commencera donc par définir plus en détail les caractéristiques de cet assemblage et on analysera ensuite les résultats issus du calcul de référence, notamment pour justifier certains paramètres de la modélisation de l'assemblage. Dans la dernière partie de ce chapitre, on s'intéressera à l'efficacité de la technique de réduction de variance et à la mesure des performances du schéma de perturbation.

9.1 L'assemblage de combustibles UOX

9.1.1 Description du cas test

Le cas test utilisé dans ce chapitre modélise un assemblage REP contenant un réseau de 17×17 cellules UOX (Fig. 9.1, page 114). Les centres inter-cellules sont espacés de 1,26 cm et l'assemblage est entouré d'une lame d'eau de $4,2 \cdot 10^{-4} cm$ d'épaisseur. De la même manière que pour l'étude de la cellule REP, on impose des conditions de réflexions aux bords de la géométrie pour modéliser un réseau infini d'assemblages.

Les cellules de l'assemblage sont également celles du cas présenté en 8.2 (page 85), mais elles contiennent soit une pastille de combustible à 1 couronne, soit du modérateur (on parlera alors de tubes guides). On dénombre au total 25 tubes guides répartis sur tout l'assemblage et, comme dans le cas précédent, on ne fait évoluer que les pastilles de combustible. A priori, la composition de chaque pastille évolue indépendamment de celle des autres, mais pour ne pas rendre le nombre de régions évoluant trop important et pour faciliter l'analyse et l'interprétation des résultats, les pastilles évoluent par groupe. Bien entendu, lors d'une véritable étude d'assemblage REP, ce regroupement n'est pas nécessaire et le schéma de perturbation peut tout aussi bien s'y appliquer. Ce regroupement est néanmoins utilisé pour simplifier l'étude du schéma de perturbation qui est réalisée dans ce chapitre. Les groupes de pastilles, au nombre de 3, sont répartis en fonction de la quantité moyenne de modérateur présent autour du combustible, car celui-ci a un impact sur le spectre énergétique du flux dans le combustible. Plus précisément, le groupe d'une cellule dépend du type de ses huit plus proches voisins. Si la cellule partage un côté (et éventuellement un coin) avec une cellule contenant un tube guide, alors elle appartient au groupe 1. Mais si elle ne partage qu'un coin avec une cellule de tube guide, alors elle appartient au groupe 2. Toutes les autres cellules sont entourées uniquement par d'autres cellules de combustible et font donc partie du groupe 3. Et comme la lame d'eau entourant l'assemblage a une épaisseur très faible, on ne tiendra pas compte de son influence sur le flux neutronique. La répartition des différentes pastilles selon

leur groupe est plus clairement indiquée sur la figure 9.1 grâce à un code couleur. Ce code sera réutilisé dans les chapitres suivants pour la présentation des résultats.

Enfin, mis à part le nombre de simulateurs indépendants, que l'on portera à 200 pour atteindre un nombre total de 2.10^6 particules simulées, et le découpage temporel, les autres paramètres (nombre de cycles, nombre de particules par cycles, compositions initiales, maillage énergétique, températures, ...) sont identiques à ceux du cas test précédent (la cellule UOX).

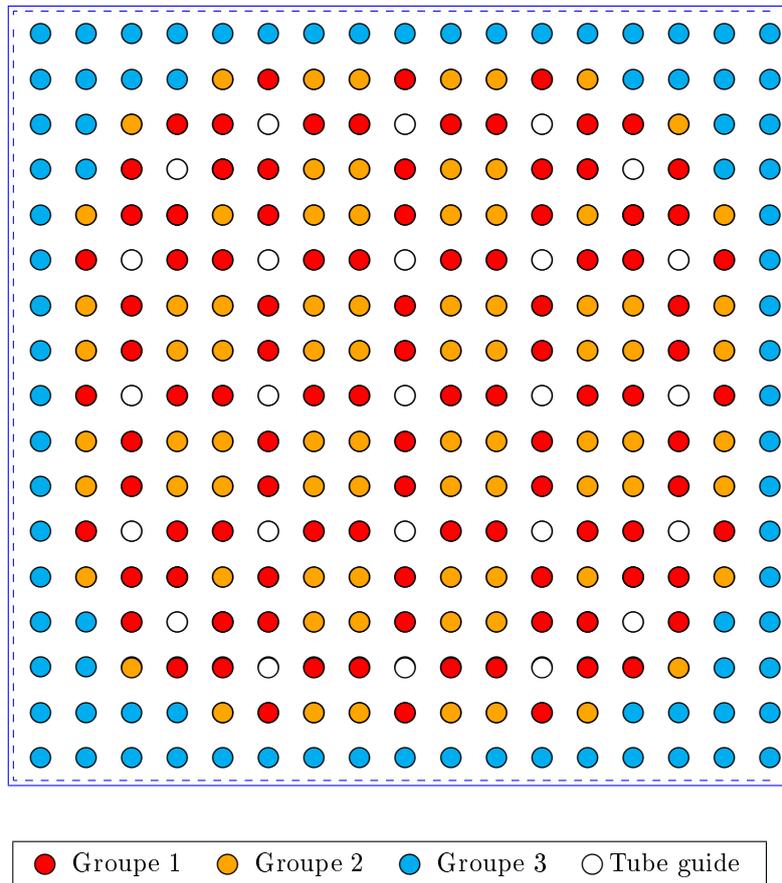


FIGURE 9.1 : Description radiale d'un assemblage de combustibles UOX. Les dimensions de l'assemblage sont : $21,42 \times 21,42 \times 20$. Il contient 17×17 cellules, géométriquement identiques aux cellules UOX à 1 couronne (voir Fig. 8.1) mais elles contiennent soit du combustible, soit du modérateur (tubes guides). Enfin, une lame d'eau d'épaisseur 420.10^{-6} entoure l'assemblage. (Toutes les valeurs sont indiquées en *cm*.)

9.1.2 Définition des paramètres temporels

On a vu avec l'étude de la cellule dans le chapitre précédent que le combustible UOX évolue brutalement au tout début de l'irradiation. Ceci a notamment un fort impact sur le facteur de multiplication effectif. Cet état de fait a justifié la mise en œuvre d'une procédure permettant d'utiliser les perturbations dès le début du calcul. Mais lors d'un tel bouleversement de la nature des compositions, il est très compliqué de définir un jeu de compositions qui soit représentatif des premiers GWj/t d'irradiation. Pour cette raison, on choisit de démarrer le schéma de perturbation à $T_i = 4 GWj/t$. Et même si les premiers pas de la simulation ne sont pas calculés avec le schéma de perturbation, on peut tout de même vérifier l'efficacité de la technique de réduction de variance puisque tous les isotopes de la chaîne d'évolution ne sont pas encore apparus à ce stade de l'irradiation, et ceux qui le sont ne sont présents qu'en très faible quantité.

De plus, on se place dans le cadre d'une étude fine de l'évolution du combustible. Ainsi, de 4 à 14 GWj/t , l'évolution est découpée uniformément avec un pas de 50 MWj/t . Il ne reste alors plus qu'à choisir la fréquence d'enregistrement des fichiers de traces. On a vu dans le chapitre précédent que pour contenir la dégradation de l'erreur statistique, il faut que les intervalles de perturbation soient au maximum de l'ordre de quelques GWj/t , mais plus l'intervalle est large et plus la dégradation de l'erreur statistique est forte. Pour obtenir un bon compromis entre le gain en temps et la perte en variance, on fixe ce dernier paramètre à 500 MWj/t . Ainsi, entre chaque pas de génération de traces, il y a 9 pas de perturbation. On obtient alors

$$\begin{cases} T_i & = 4 \text{ } GWj/t \\ \Delta T_p & = 0,5 \text{ } GWj/t \end{cases}$$

Et concernant les fichiers de concentrations utilisés pour générer les traces, on sélectionne ceux correspondant à 0,2 GWj/t après le début de chaque intervalle de perturbations, ce qui correspond à $\alpha = 2/5$. Par exemple, pour le premier intervalle qui contient tous les pas entre 4 et 4,5 GWj/t ¹, on utilise le fichier de concentrations à 4,2 GWj/t du pré-calcul pour perturber les pas 4, 4,05, 4,1, 4,15, 4,2, 4,25, 4,3, 4,35, 4,4 et 4,45 GWj/t de chacun des simulateurs indépendants.

9.2 Résultats de l'évolution avec la méthode "classique"

On discute dans cette section des résultats obtenus à partir du calcul de référence. On y présente notamment quelques éléments justifiant la modélisation de l'assemblage. De plus, concernant les grandeurs physiques telles que le flux ou les concentrations isotopiques, on ne présentera que les résultats obtenus sur le groupe 1. Ceci permettra de faciliter la lisibilité des résultats, tout en sachant que l'ensemble des résultats obtenus sur les autres groupes sont équivalents.

9.2.1 Évolution de quelques concentrations isotopiques

La figure 9.2 (page 117) donne l'évolution des concentrations isotopiques de quelques noyaux du calcul de référence dans le groupe de cellules 1 jusqu'à 14 GWj/t . Ainsi, on peut observer sur le graphe supérieur l'évolution des concentrations des deux principaux isotopes de l'uranium (^{235}U et ^{238}U) et de ceux du plutonium (^{239}Pu et ^{241}Pu) et sur le graphe inférieur trois des principaux poisons neutroniques des combustibles UOX (^{135}Xe , ^{103}Rh et ^{149}Sm) et ^{239}Np .

Tout d'abord, concernant les isotopes de l'uranium, on voit que leur concentration n'évolue pas de la même façon. Celle de ^{235}U , qui est de plus d'un ordre de grandeur inférieure à celle de ^{238}U , diminue rapidement (elle varie de -38% entre 0 et 14 GWj/t). Par contre, celle de ^{238}U n'a quasiment pas été modifiée (-0,7% sur le même intervalle). Ces deux isotopes sont donc consommés différemment car ils ont des propriétés différentes. En effet, ^{235}U est fissile tandis que ^{238}U est fertile. Le premier engendre donc par fission un grand nombre de produits de fissions alors que ^{238}U produit principalement du ^{239}Pu (par capture neutronique suivie de deux décroissances β^-) qui est fissile et que l'on retrouve sur le même graphe. De plus, ce dernier élément engendre lui aussi par capture neutronique un autre isotope fissile : ^{241}Pu . Ces deux isotopes du plutonium, qui n'étaient pas présents au début du calcul, apparaissent très rapidement au cours de l'irradiation et ont un impact notable sur la réactivité du combustible. Les quatre noyaux du graphe supérieur ont un effet très important sur la réactivité du combustible UOX et sont, de ce fait, souvent analysés dans les études de criticités. De plus, comme leur concentration isotopique évolue différemment sur des ordres de grandeurs disjoints, on choisit d'étudier ces isotopes car ils permettent d'illustrer les effets du schéma de perturbation dans quatre cas de figure différents.

En plus des éléments fissiles et fertiles, on peut voir sur le graphe inférieur de la figure 9.2 l'évolution de la concentration isotopique de quatre autres noyaux : ^{135}Xe , ^{103}Rh , ^{149}Sm et ^{239}Np . Les trois premiers sont présentés ici car ils font partie des trois principaux poisons neutroniques du combustible REP. Par contre, ^{239}Np ne fait pas partie du tableau 8.1 (page 84) car il n'a pas d'impact notable sur la réactivité du combustible. Toutefois, l'analyse de cet isotope sera importante dans la suite de chapitre, puisque l'on verra que l'évolution de la variance de sa concentration révèle une caractéristique importante du schéma de perturbation. Concernant l'évolution de leur concentration isotopique, on observe sur ce graphe que seule la concentration de ^{103}Rh évolue

1. Le dernier pas, à 4,5 GWj/t , n'est pas inclus. C'est le premier pas du second intervalle de perturbation.

continûment au cours de l'irradiation, alors que celle des autres noyaux arrive rapidement à saturation (avant 2GWj/t). De même que pour les quatre noyaux précédents, ces éléments ont été sélectionnés dans cette étude car l'évolution de leur concentration présente des caractéristiques variées.

9.2.2 Le spectre énergétique

On peut voir sur la figure 9.3, page 118, le rapport du flux thermique (c'est-à-dire le flux volumique intégré en énergie entre 0 et $2,57884\text{ keV}$) sur le flux total (c'est-à-dire le flux volumique intégré en énergie) au cours de l'irradiation. On constate que ce rapport est bien différent d'un groupe de cellule à un autre, ce qui signifie que le spectre énergétique du flux volumique n'est pas le même dans toutes les cellules. Et comme on pouvait s'y attendre, la partie thermique du flux est plus importante dans le groupe 1, où les cellules sont situées à côté d'un tube guide et donc entourées par une quantité de modérateurs plus importante que celles des autres groupes.

9.2.3 Facteur de multiplication effectif

Comme pour la cellule, on constate une rapide diminution du facteur de multiplication effectif au tout début de l'évolution (voir Tab. 9.1). A cause de l'empoisonnement du combustible, la réactivité diminue rapidement, ce qui a pour conséquence de ralentir la chute du facteur de multiplication effectif. Mais une fois que les poisons arrivent à saturation très rapidement (voir par exemple l'évolution de ^{135}Xe , Fig. 9.2), cet effet disparaît et la réactivité du combustible diminue progressivement en même temps que l'appauvrissement en matériaux fissiles.

Estimateur	k_{eff}^{step}		k_{eff}^{corde}		$k_{eff}^{collision}$	
	Moyenne	Écart type (en pcm)	Moyenne	Écart type (en pcm)	Moyenne	Écart type (en pcm)
Taux d'irradiation (en GWj/t)						
0	1,33948	69	1,34032	85	1,33949	65
0,1	1,31500	77	1,31631	91	1,31494	73
1	1,30098	69	1,30076	90	1,30083	66
2	1,29117	74	1,29094	91	1,29067	71
4	1,27223	71	1,27145	90	1,27192	68
6	1,25222	70	1,25155	93	1,25242	67
8	1,23274	73	1,23343	105	1,23309	71
10	1,21552	71	1,21282	97	1,21521	67
12	1,19640	72	1,19732	98	1,19651	66
14	1,17906	75	1,17752	95	1,17960	73

TABEAU 9.1 : Estimations du k_{eff} par un calcul non-perturbé sur l'assemblage de combustible UOX. L'écart type est arrondi au *pcm* près.

9.2.4 Temps de calcul

Tout comme dans le cas test de la cellule REP, on constate sur la figure 9.4 (page 118) que le temps de calcul des premiers pas de temps (où le combustible neuf est composé d'un faible nombre de noyaux) est très différent de celui des pas de temps suivants. Mais bien que la taille caractéristique de l'assemblage soit considérablement plus grande que celle de la cellule, le temps de simulation de chacun des pas de temps de l'assemblage est plus faible que celui de la cellule. Il était compris entre 80 et 90 secondes après le premier pas de temps, il n'est plus que de 33 à 35 secondes, pour un même nombre de particules simulées. Ceci est dû au nombre de scores à calculer (il y a deux fois moins de matériaux évoluant que précédemment), mais aussi à la complexité de la géométrie. En effet, l'assemblage est composé de cellules de combustibles non-divisées en couronnes, mais avec des matériaux quasi-identiques. Leur libre parcours moyen est donc similaire à celui du cas précédent, mais pour une même distance parcourue ces particules traversent moins de volumes différents. D'un point de vue informatique, les méthodes permettant de positionner les particules au sein de la géométrie et celles visant à calculer la section efficace macroscopique totale du milieu traversée sont moins souvent sollicitées, ce qui explique la différence sur le temps de calcul.

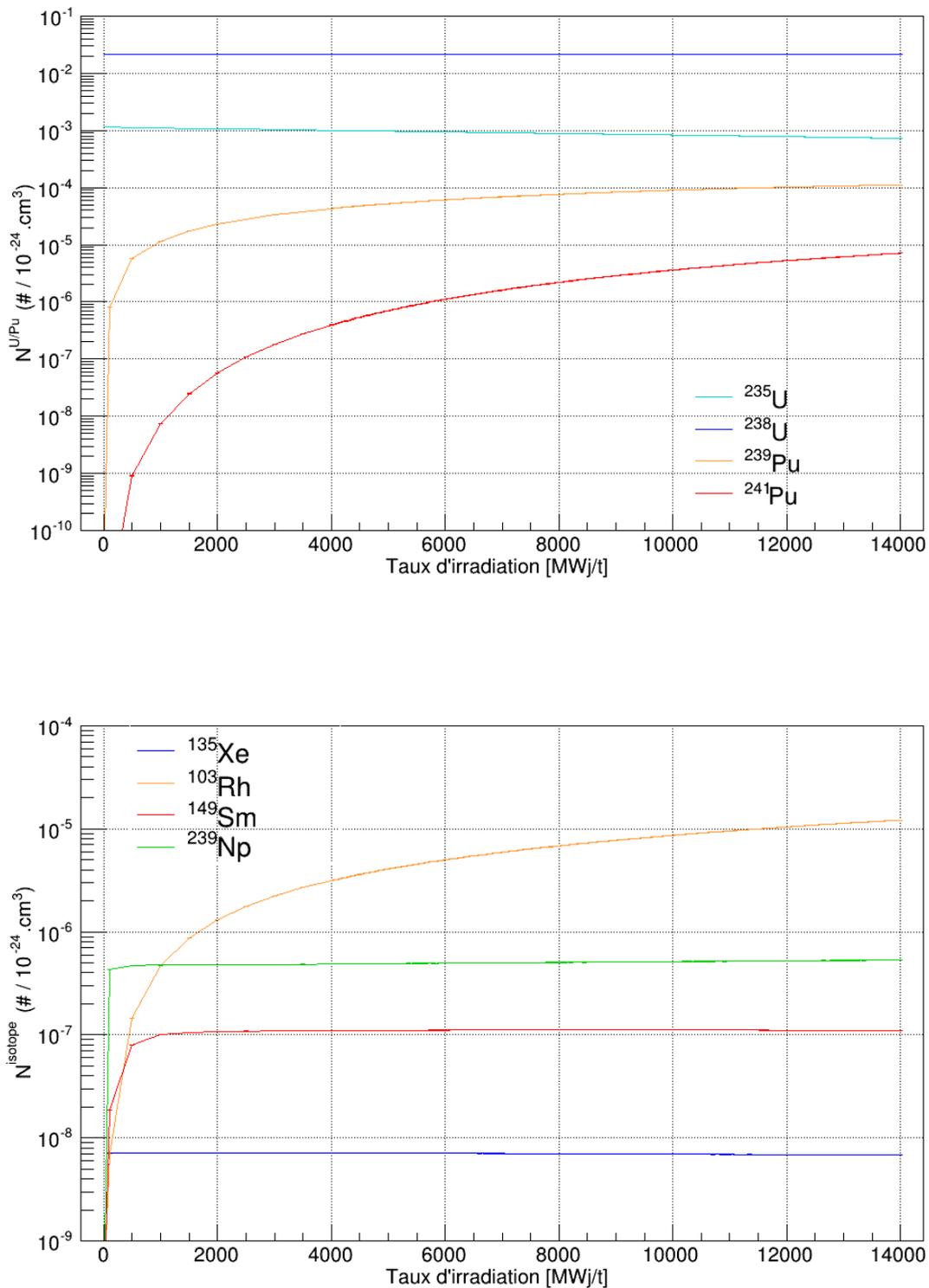


FIGURE 9.2 : Évolution des concentrations de quelques noyaux (^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu en haut, ^{135}Xe et ^{103}Rh , ^{149}Sm et ^{239}Np en bas) du calcul de référence de l'assemblage de combustible UOX jusqu'à 14 GWj/t d'irradiation. Ces concentrations sont celles du groupe de cellules 1 et sont indiquées en nombre d'atome par 10^{-24} cm^3 .

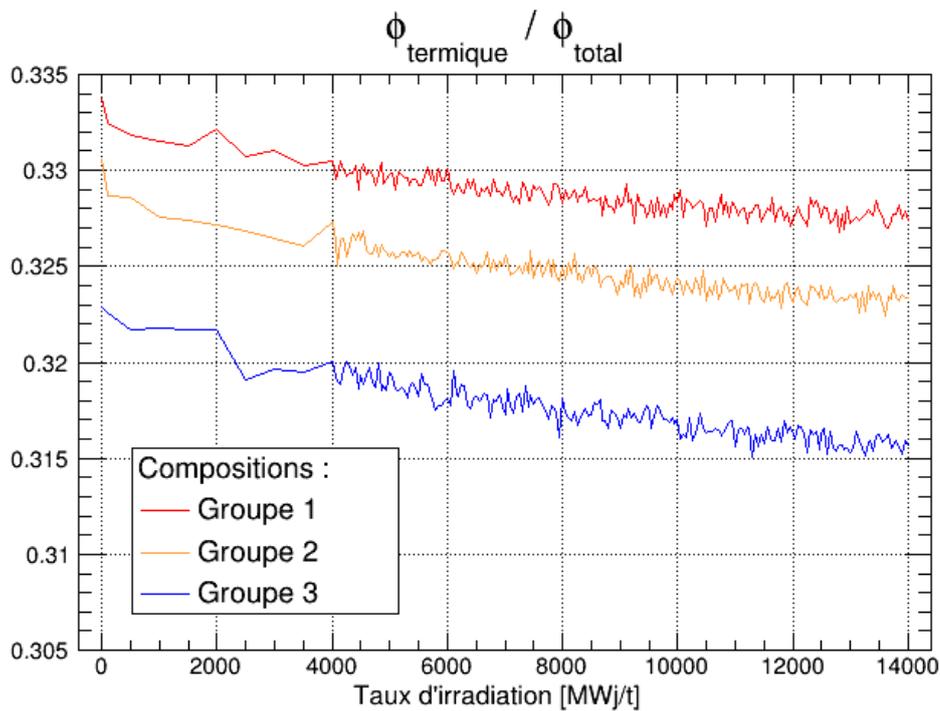


FIGURE 9.3 : Rapport des flux volumiques thermique et total dans chacune des compositions évoluant de l'assemblage de combustible UOX jusqu'à 14 GWj/t d'irradiation. Le flux total correspond au flux volumique intégré sur l'ensemble de l'intervalle en énergie de la simulation (c'est-à-dire sur $[0 \text{ MeV}; 20 \text{ MeV}]$), et le flux thermique correspond à l'intégration du flux volumique sur le domaine thermique (c'est-à-dire sur $[0 \text{ keV}; 2, 57884 \text{ keV}]$).

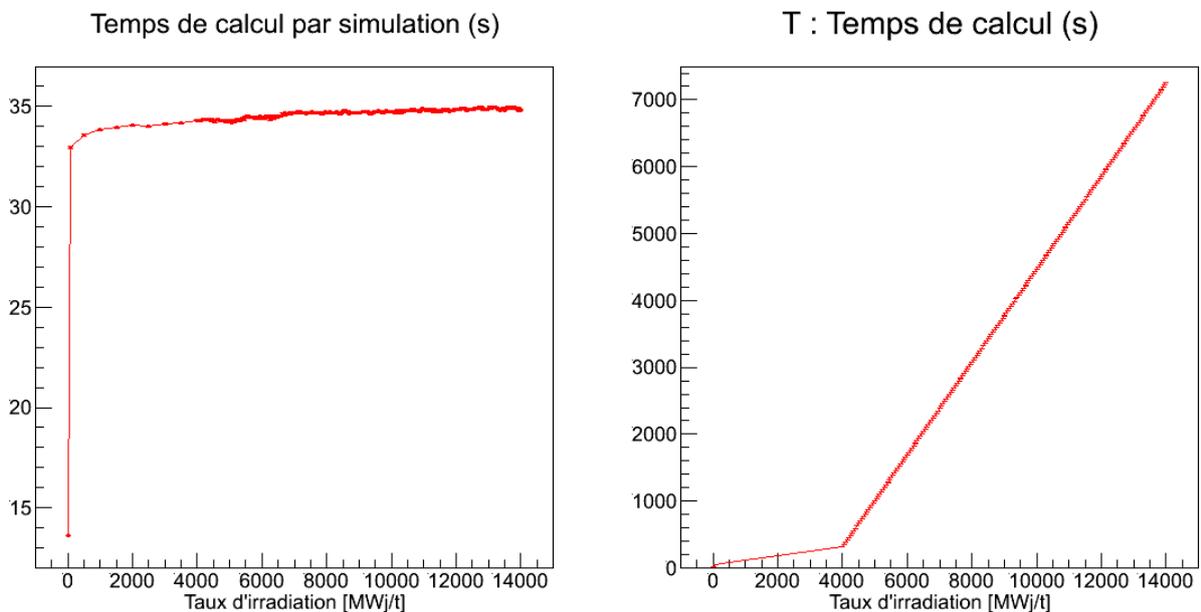


FIGURE 9.4 : Temps de calcul moyen des simulations non-perturbée de l'évolution de l'assemblage de combustible UOX. Le temps moyen de chaque pas de temps est affiché à gauche et le temps moyen de la somme des différents pas de temps depuis le début du calcul est affiché à droite. (La moyenne est effectuée sur les 200 simulations indépendantes.)

9.3 Validation et mesure des performances

9.3.1 Validation des résultats

Concernant la validation des résultats, les résultats des simulations perturbées indiquent que tous les scores estimés par le code de transport sont correctement reconstruits avec le schéma de perturbation. Ainsi, on peut voir sur la figure 9.5 (page 120) que le facteur de multiplication effectif k_{eff}^{step} et le flux volumique total du groupe de cellules 1 sont correctement estimés. Cette figure montre l'évolution de ces deux grandeurs entre 4 et 14 GWj/t obtenues avec le calcul de référence et le calcul perturbé. Comme les différentes courbes sont proches les unes des autres, on affiche aussi l'écart relatif entre les valeurs perturbées et non-perturbées. Dans cet exemple, on constate que l'erreur reste toujours inférieure à 0,5 %. Et pour valider la compatibilité des distributions des résultats perturbés et non-perturbés, on indique aussi la valeur maximale du paramètre t de ces deux grandeurs entre 4 et 14 GWj/t . On constate ainsi que les distributions sont bien compatibles puisque les paramètres t restent toujours inférieurs au quantile à 99,9 %.

Mais, il n'en va pas de même avec les concentrations isotopiques. On peut voir sur la figure 9.6, page 121, l'écart relatif entre les estimations perturbées et non-perturbées des concentrations de huit noyaux, ainsi que la valeur maximale du paramètre t de ces huit grandeurs. Il apparaît que l'un d'entre eux ne passe pas le test de Student (Fig. 9.7). Il s'agit de la concentration isotopique de ^{238}U , dont le paramètre t vaut 6,8323. Même si l'écart entre les concentrations isotopiques perturbée et non-perturbée de cet élément est faible (moins de 6 pcm), les deux distributions ne sont pas compatibles. Toutefois, une analyse plus détaillée de l'évolution des concentrations montre que cet apparent échec n'a en réalité aucun lien avec l'échantillonnage corrélé. En effet, on a constaté que d'un pas de temps à l'autre la diminution de la concentration de ce noyau est extrêmement faible. De ce fait, la différence entre les résultats de deux calculs indépendants est de l'ordre de l'erreur numérique du code. Ainsi, les 200 simulateurs indépendants fournissent un résultat parmi une vingtaine de valeurs numériques possibles. C'est cette difficulté informatique qui est à l'origine de cet écart. Pour s'en convaincre, on affiche sur la figure 9.7 le maximum des paramètres t et des écarts relatifs de l'estimation de tous les isotopes du tableau 8.1 (page 84). On peut alors constater que seul ^{238}U a un paramètre t supérieur à la valeur du quantile à 99,9 % et que, pour l'ensemble de ces isotopes, l'écart entre le calcul de référence et le calcul perturbé est inférieur à 2 %. Tous ces éléments permettent de valider le schéma de perturbation.

9.3.2 Efficacité de la technique de réduction de variance

Concernant la dégradation de la variance, on illustre l'efficacité de la méthode de réduction de variance par les figures 9.8 à 9.11 (pages 124 à 127). Ces figures montrent tout d'abord le rapport entre les erreurs statistiques perturbées et non-perturbées des estimations du facteur de multiplication effectif, de la puissance produite par les différents milieux évoluant et de huit noyaux du groupe de cellules 1 (les mêmes que précédemment) au cours de l'irradiation perturbée. Et ces rapports sont comparés sur les mêmes figures au gain en temps obtenu avec le schéma de perturbation.

On constate alors que le comportement de ces rapports n'est pas le même selon le score. Il y a une différence entre les concentrations isotopiques et les autres scores. En effet, pour le k_{eff} , le flux et la puissance, le rapport des erreurs statistiques fluctue toujours autour de 1, ce qui signifie que la méthode de réduction de variance fonctionne parfaitement pour ces grandeurs. Leur variance n'est pas dégradée par les perturbations. Mais il n'en va pas de même pour les concentrations isotopiques : si pour quelques noyaux, comme ^{135}Xe , la variance n'est pas dégradée (Fig. 9.11), les résultats sont plus mitigés pour la majorité des isotopes. Le rapport des erreurs statistiques de ces noyaux augmente progressivement avec l'irradiation et, parfois, se stabilise autour d'une valeur donnée. C'est le cas par exemple de ^{149}Sm et de ^{239}Np , dont les rapports des erreurs statistiques convergent respectivement vers 2, 4 et 1, 3 après quelques pas de temps. La méthode de réduction de variance semble donc agir différemment sur les concentrations isotopiques. Pour en comprendre la raison, on présente sur les figures 9.8 à 9.11 (pages 124 à 127) les erreurs statistiques relatives des simulations perturbée et non-perturbée. On voit sur ces figures que les grandeurs pour lesquelles la méthode de réduction de variance fonctionne ont une erreur statistique relative constante durant toute l'évolution. Mais pour les autres grandeurs, c'est-à-dire la majorité des concentrations isotopiques, on observe une variation de leur erreur statistique au cours de l'irradiation. C'est cette variation qui semble entraîner une dégradation de la variance perturbée. En effet, si l'on analyse plus particulièrement les erreurs statistiques relatives de ^{149}Sm et ^{239}Np (Fig. 9.11), on constate que leur erreur diminue très rapidement après 4 GWj/t puis se stabilise jusqu'à la fin de l'évolution. Cela coïncide avec le comportement

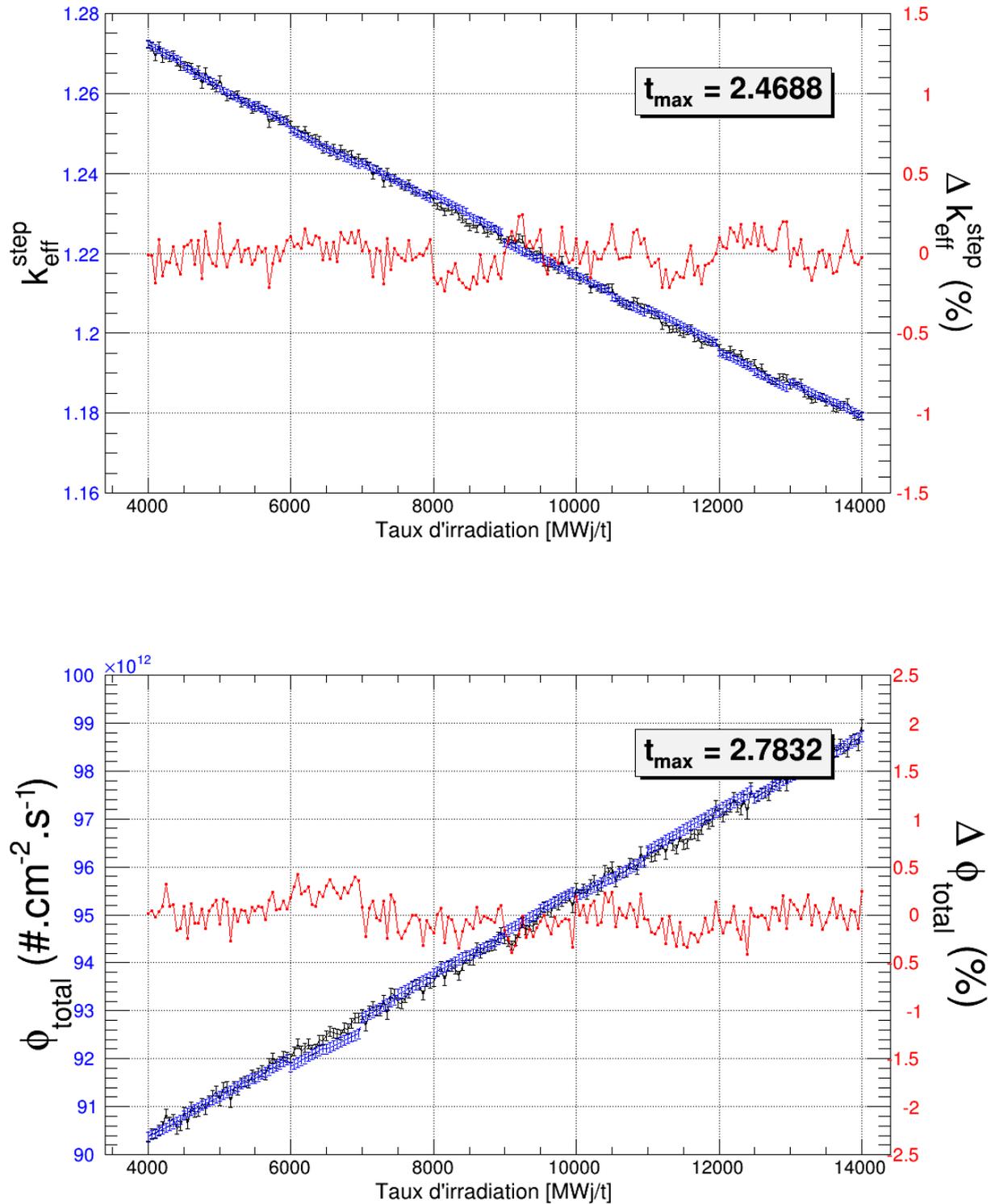


FIGURE 9.5 : Évolutions perturbée et non-perturbée (respectivement en bleu et noir, ordonnées de gauche) du facteur de multiplication effectif (avec l'estimateur "step", en haut) et du flux volumique total dans le groupe de cellules 1 (en bas) de l'assemblage de combustible UOX entre 4 et 14 GWj/t. Comme les valeurs perturbées sont très proches des valeurs non-perturbées, on affiche aussi l'écart relatif (en %) entre ces deux mesures (en rouge, ordonnées de droite). De plus, le maximum du paramètre t de ces grandeurs est affiché en haut à droite de chaque graphe.

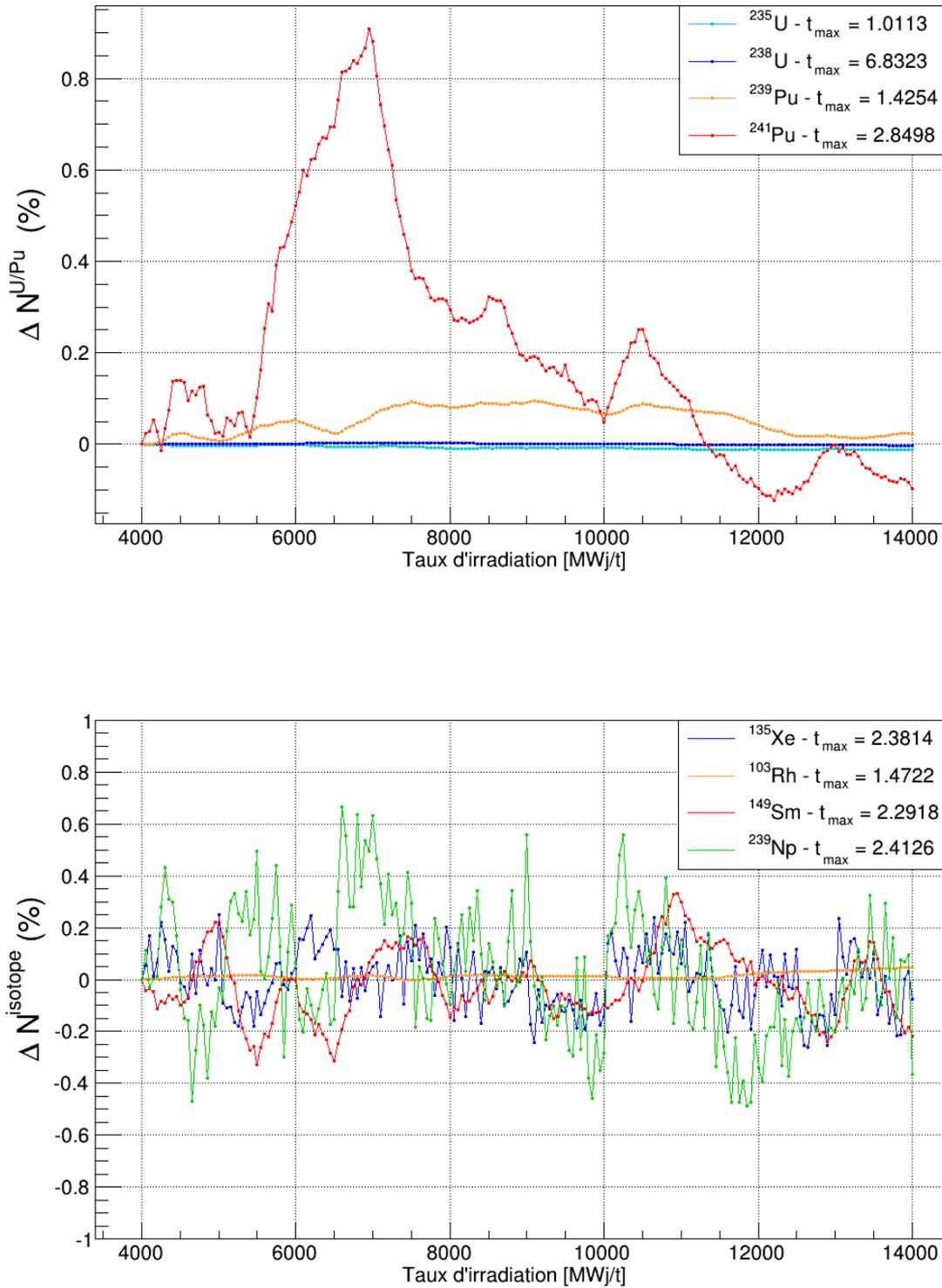


FIGURE 9.6 : Écart (en %) entre les concentrations isotopiques perturbées et non-perturbées de huit noyaux (^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu en haut et ^{135}Xe , ^{103}Rh , ^{149}Sm et ^{239}Np en bas) dans le groupe de cellules 1 de l'assemblage de combustible UOX entre 4 et 14 GWj/t. Le maximum du paramètre t de ces isotopes est affiché dans la légende.

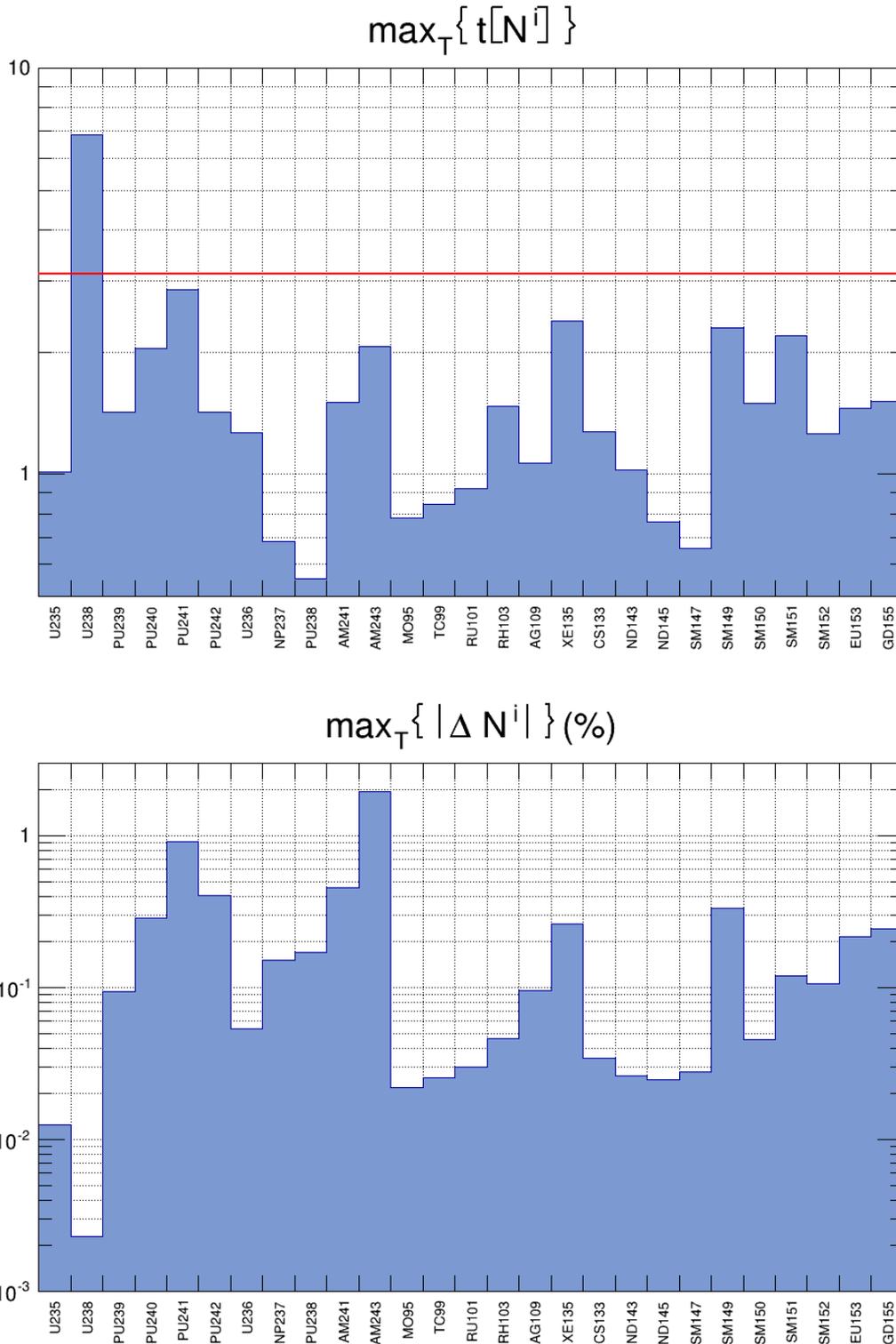


FIGURE 9.7 : Validation des concentrations isotopiques du calcul perturbé de l'assemblage de combustible UOX dans le groupe de cellules 1 avec la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GWj/t . Le maximum du paramètre t de chaque isotope observé sur cet intervalle dans ce groupe de cellules est affiché sur l'histogramme du haut, tandis celui du bas présente le maximum de l'écart (en %) mesuré entre les concentrations isotopiques perturbée et non-perturbée, soit $\left| N_{ref}^i - N_{pertu}^i \right| / N_{ref}^i \times 100$. L'écart observé est toujours faible (moins de 2 %) et le paramètre t d'un seul noyau est supérieur à la valeur critique ($t [^{238}U] = 6,8323$).

des erreurs statistiques relatives perturbées de ces noyaux, puisque celles-ci sont dégradées uniquement lorsque les erreurs non-perturbées diminuent. Et lorsque ces dernières sont stabilisées, les erreurs statistiques perturbées ne sont plus dégradées. La variation de la variance de référence semble donc être à l'origine de la dégradation des variances perturbées.

Pour comprendre ce phénomène, il faut se souvenir de deux éléments importants du schéma de perturbation. D'une part, la variance perturbée est toujours au mieux égale à celle du système dans lequel les traces sont générées. Et plus l'amplitude des perturbations est forte, plus la dégradation de la variance est importante. D'autre part, les jeux de données servant à simuler les traces (qui sont perturbées durant l'évolution) utilisent les concentrations isotopiques issues du pré-calcul. Or, celles-ci correspondent (à peu près) à celles du milieu des intervalles de perturbation. De ce fait, lorsque la variance n'est pas constante, il y a toujours une partie de l'intervalle où la variance non-perturbée est inférieure à celle du système utilisant les concentrations du pré-calcul. Sur cet intervalle, la variance est en plus dégradée par l'échantillonnage corrélé. Il y a donc deux effets qui se cumulent. Et si le premier effet peut être minimisé en limitant l'amplitude des perturbations (c'est le rôle de la méthode de réduction de variance), il est plus compliqué d'intervenir sur le second. Le travail présenté ici ne permet pas de résoudre ce problème. Néanmoins, quelques solutions seront proposées et discutées dans la dernière partie de ce document (voir le dernier chapitre de la partie V, page 131).

9.3.3 Mesure des performances

Comme on peut s'y attendre, le gain obtenu sur la figure de mérite dépend de l'efficacité de la méthode de réduction de variance mise en place, et donc du score considéré. Pour tous les scores autres que les concentrations isotopiques, comme la variance n'est pas dégradée, le gain obtenu sur la figure de mérite est proche du gain en temps. Par exemple, on peut voir sur la figure 9.12 (page 128) que le gain obtenu sur le facteur de multiplication effectif augmente très rapidement et reste compris entre 3 et 5 durant toute l'évolution. Ce même gain est obtenu sur tous les scores autres que les concentrations isotopiques.

Les résultats sont plus mitigés pour les concentrations isotopiques. On présente sur la figure 9.13 (page 129) le gain obtenu sur les huit noyaux étudiés précédemment. Pour la majorité d'entre eux, la variance se dégrade progressivement sur tout le calcul. Cela se traduit par une perte plus ou moins lente sur la figure de mérite. De ce fait, on obtient un gain en faveur du schéma de perturbation pour ^{235}U , ^{238}U , ^{135}Xe et ^{239}Np et une dégradation du gain pour ^{239}Pu , ^{241}Pu , ^{103}Rh et ^{139}Sm . Par exemple, on obtient un gain de 2 sur l'estimation de la concentration isotopique de ^{238}U et l'inverse pour la concentration de ^{241}Pu .

Finalement, on a montré que le schéma de perturbation mis en place permet d'accélérer entièrement les calculs en évolution, même lorsque des éléments de la chaîne d'évolution apparaissent. On a obtenu un gain conséquent sur la figure de mérite du facteur de multiplication effectif, de la puissance et du flux (proche de 4 dans le cas de l'assemblage) et un gain plus variable pour les concentrations isotopiques (entre 0,5 et 4). Et grâce à la méthode des échantillons corrélés et à la procédure de réduction de variance mise en place, on a montré que, pour un coût négligeable, il est possible de contrôler la dégradation de la variance de la plupart des résultats perturbés et donc de maximiser le gain obtenu sur la figure de mérite.

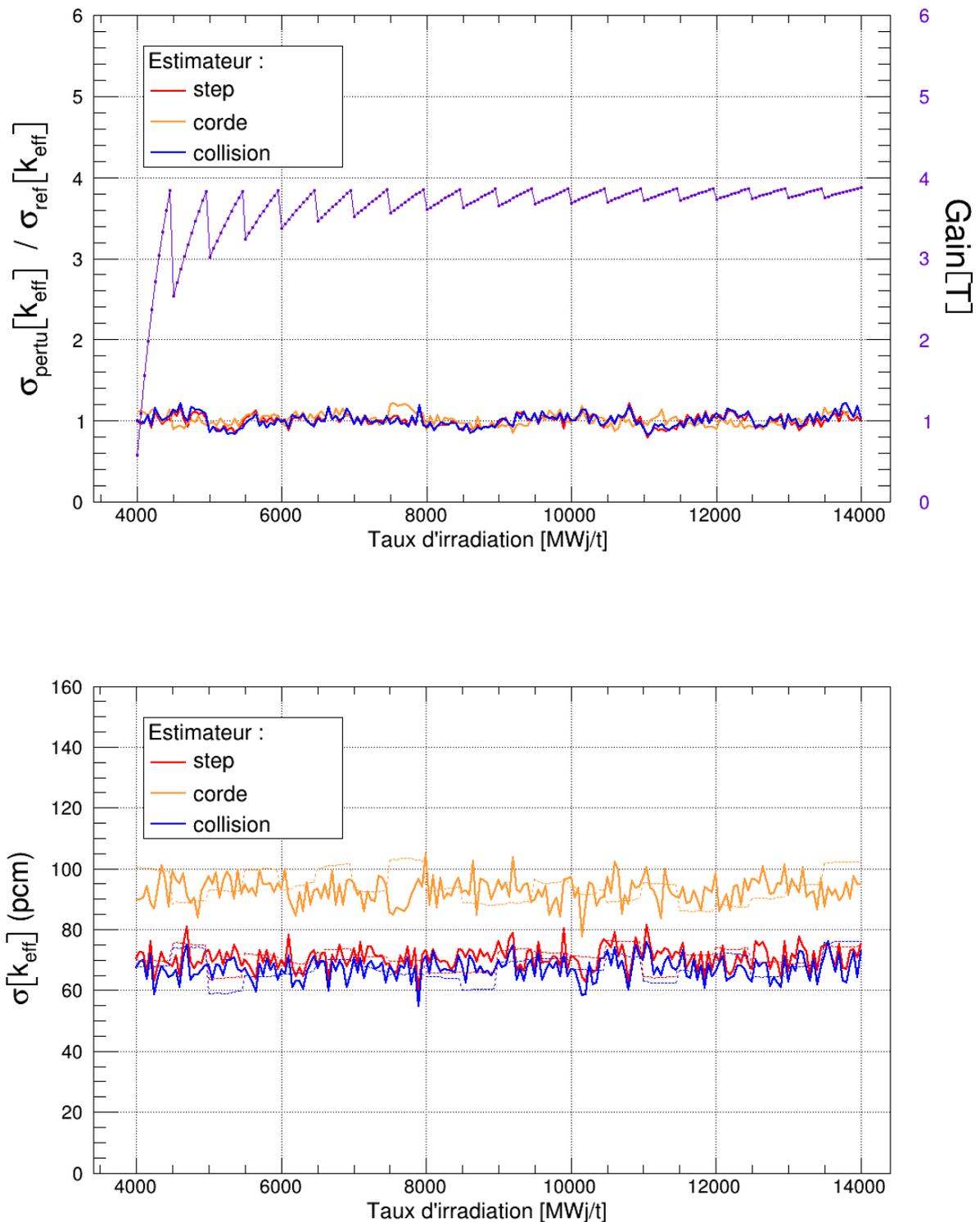


FIGURE 9.8 : Performances de la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GWj/t sur l'estimation du facteur de multiplication effectif. On compare sur le graphe du haut le rapport des écarts types des trois estimateurs du facteur de multiplication effectif (en rouge, orange et bleu, axe de gauche) au gain en temps de calcul obtenu avec le schéma de perturbation (en violet, axe de droite). Et pour mieux comprendre le comportement du rapport des écarts types, on affiche sur le graphe du bas l'erreur statistique relative perturbée (en pointillé) et non-perturbée (en trait plein et épais) pour les trois estimateurs (en %).

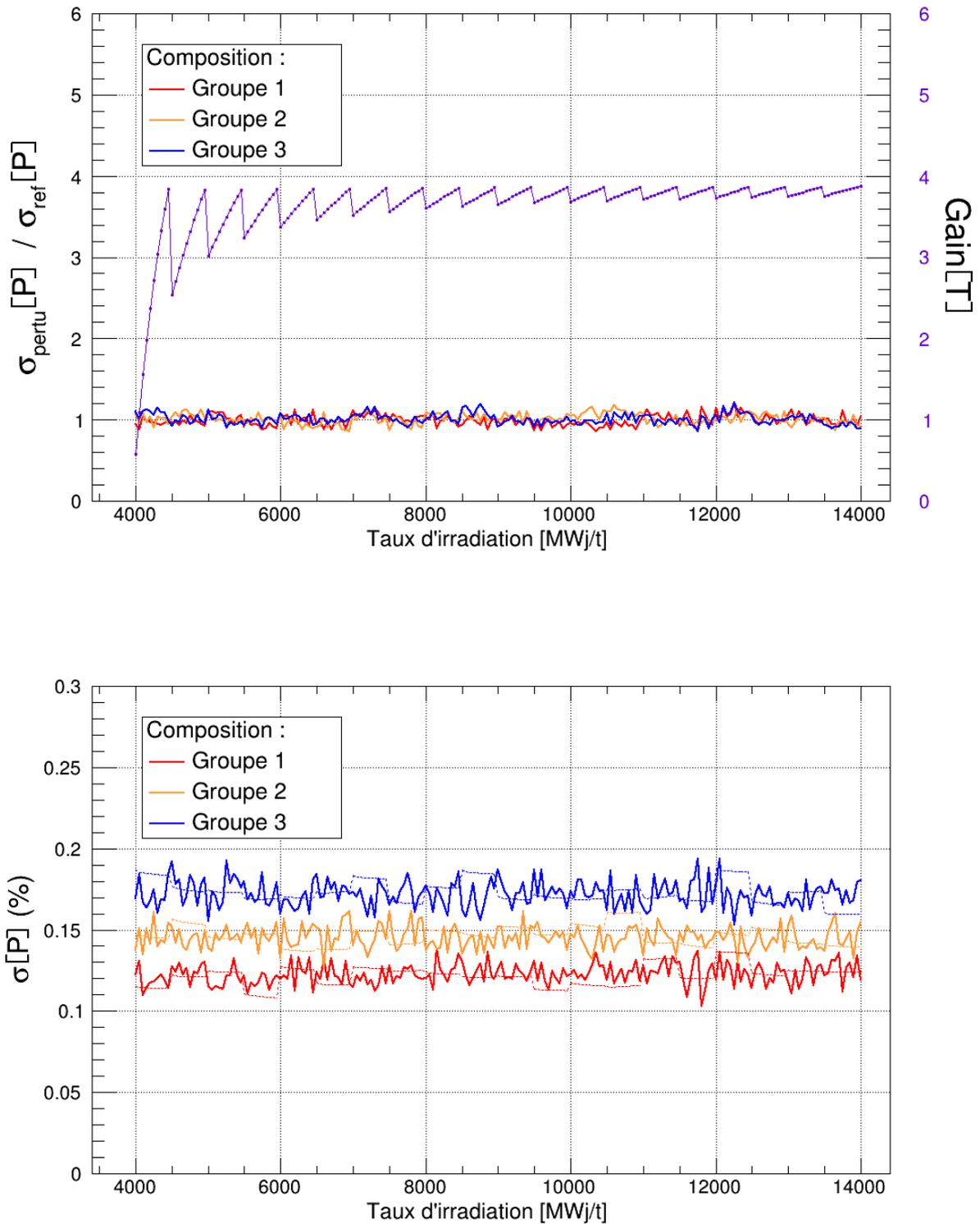


FIGURE 9.9 : Performances de la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GWj/t sur l'estimation de la puissance. On compare sur le graphe du haut le rapport des écarts types de la puissance des trois groupes de cellules (en rouge, orange et bleu, axe de gauche) au gain en temps de calcul obtenu avec le schéma de perturbation (en violet, axe de droite). Et pour mieux comprendre le comportement du rapport des écarts types, on affiche sur le graphe du bas l'erreur statistique relative perturbée (en pointillé) et non-perturbée (en trait plein et épais) pour chacune des trois compositions (en %).

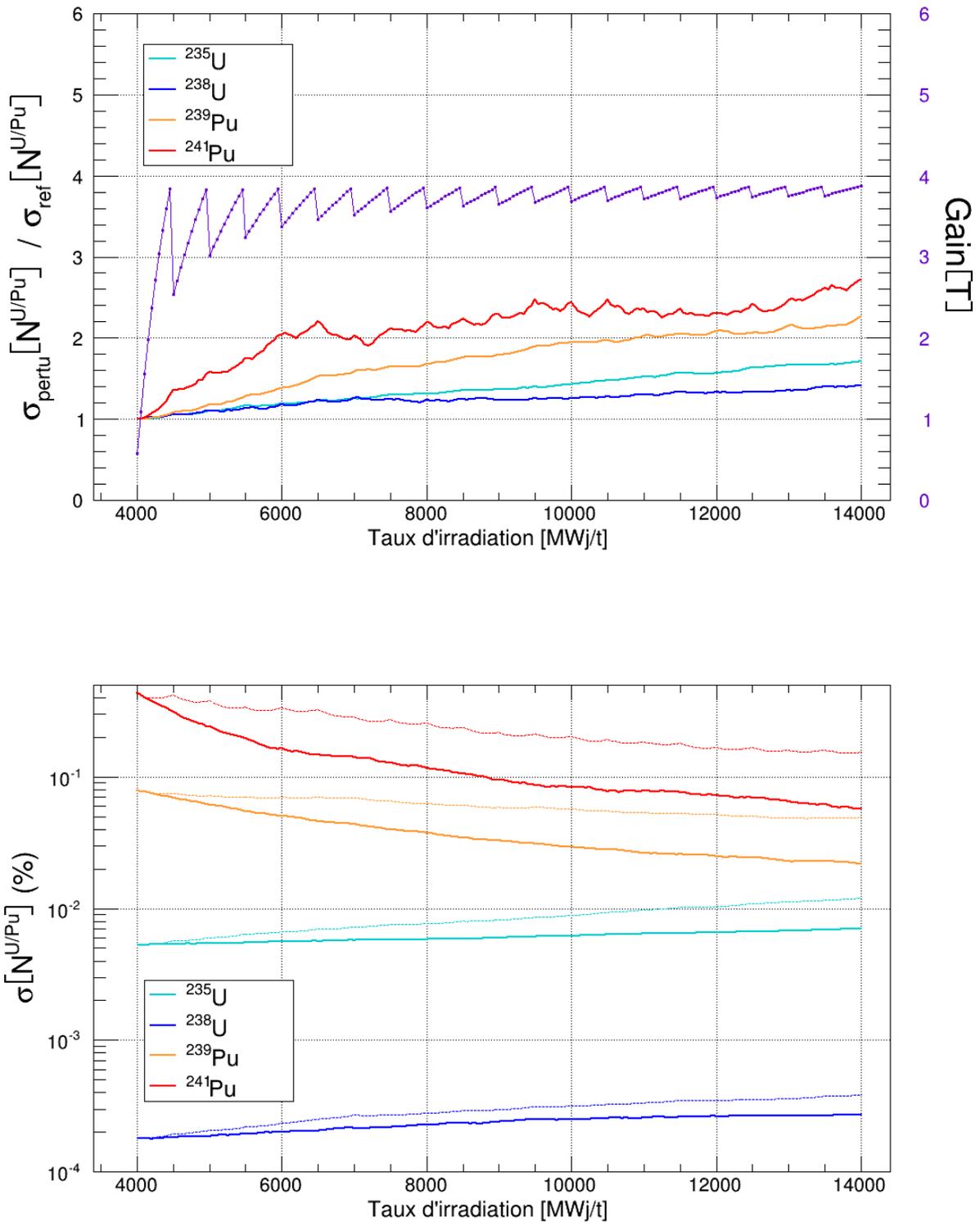


FIGURE 9.10 : Performances de la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GWj/t sur l'estimation des concentrations isotopiques de quelques actinides majeurs dans le groupe de cellules 1. On compare sur le graphe du haut le rapport des écarts types de la concentration isotopique de ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu (axe de gauche) au gain en temps de calcul obtenu avec le schéma de perturbation (en violet, axe de droite). Et pour mieux comprendre le comportement du rapport des écarts types, on affiche sur le graphe du bas (en échelle logarithmique) l'erreur statistique relative perturbée (en pointillé) et non-perturbée (en trait plein et épais) pour chacune des trois composition (en %).

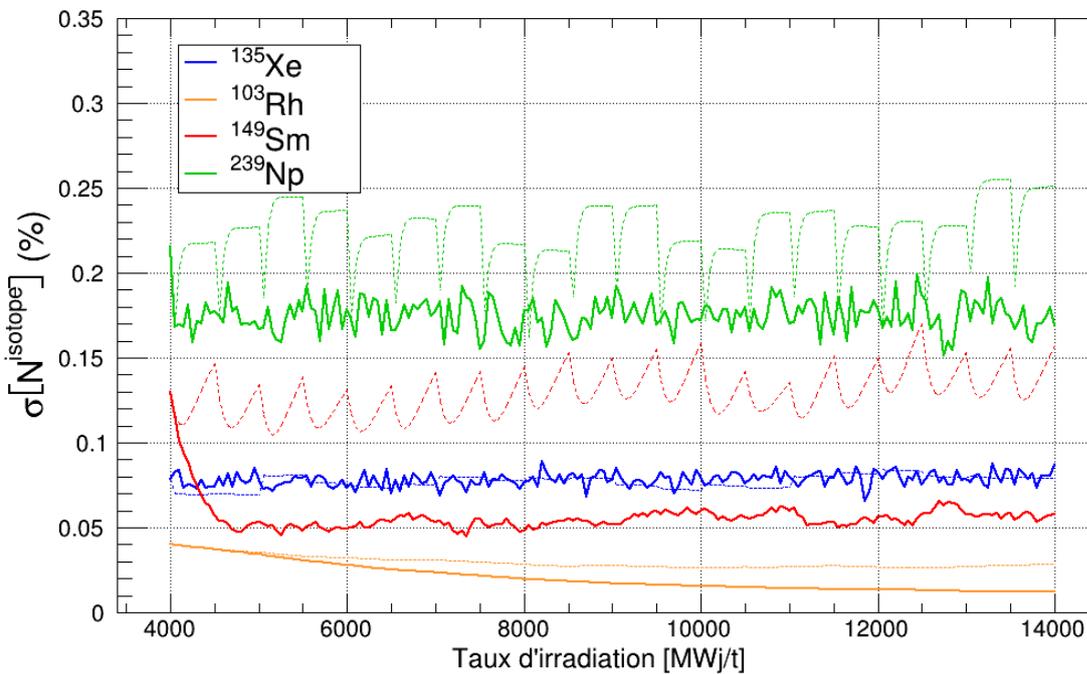
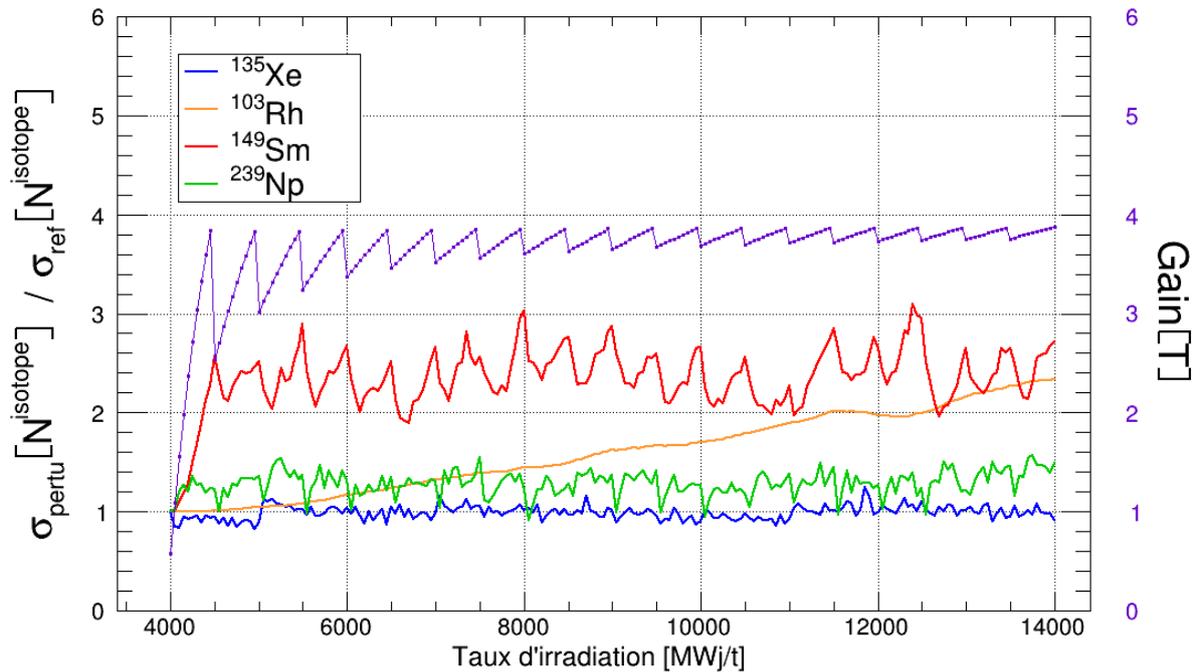


FIGURE 9.11 : Performances de la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GWj/t sur l'estimation des concentrations isotopiques de quelques noyaux dans le groupe de cellules 1. On compare sur le graphe du haut le rapport des écarts types de la concentration isotopique de ^{135}Xe , ^{103}Rh , ^{149}Sm et ^{239}Np (axe de gauche) au gain en temps de calcul obtenu avec le schéma de perturbation (en violet, axe de droite). Et pour mieux comprendre le comportement du rapport des écarts types, on affiche sur le graphe du bas (en échelle logarithmique) l'erreur statistique relative perturbée (en pointillé) et non-perturbée (en trait plein et épais) pour chacune des trois composition (en %).

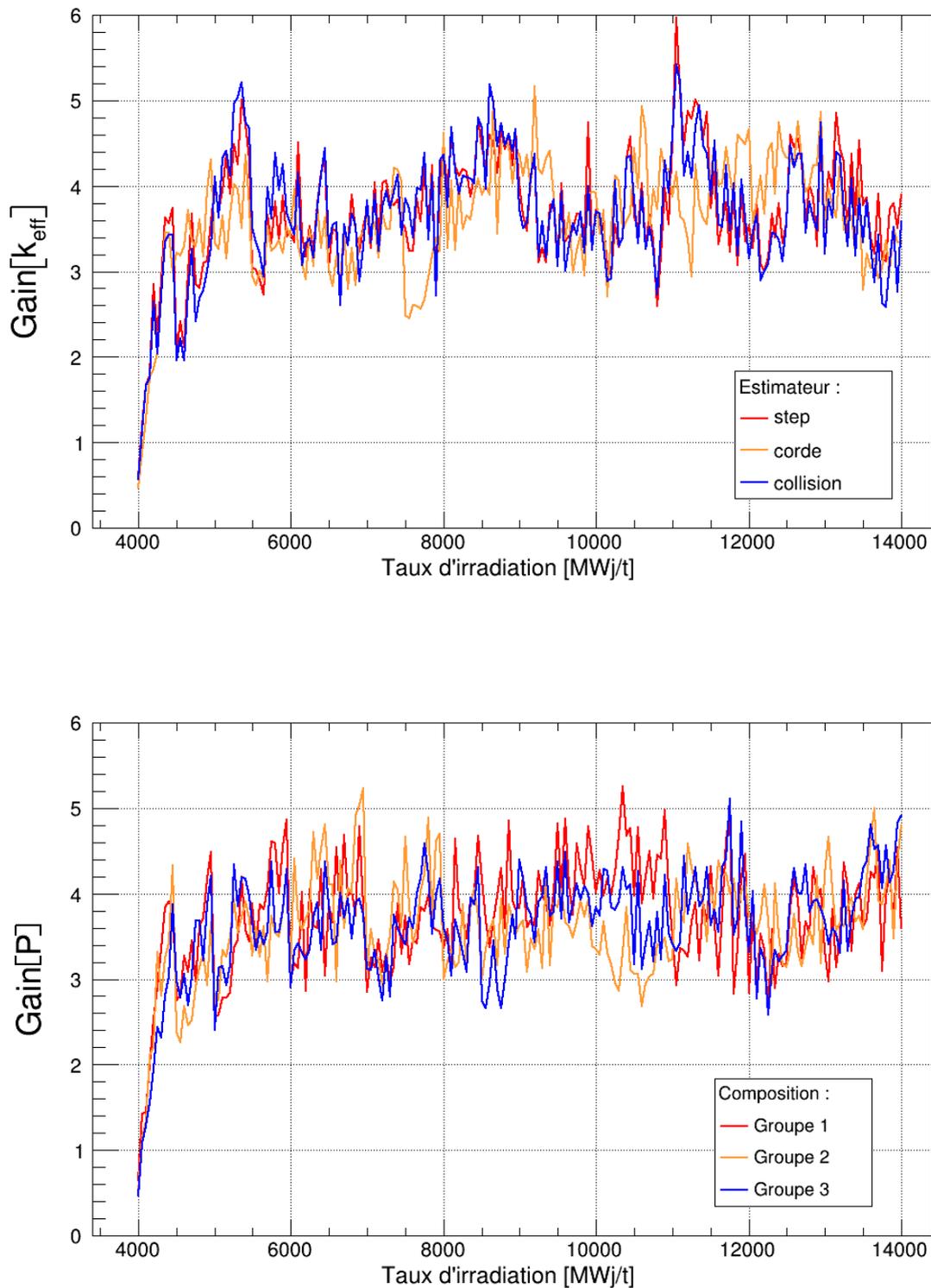


FIGURE 9.12 : Gain obtenu avec le schéma de perturbation et la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GW_j/t sur l'estimation du facteur de multiplication effectif (en haut) et de la puissance de chaque milieu évoluant (en bas).

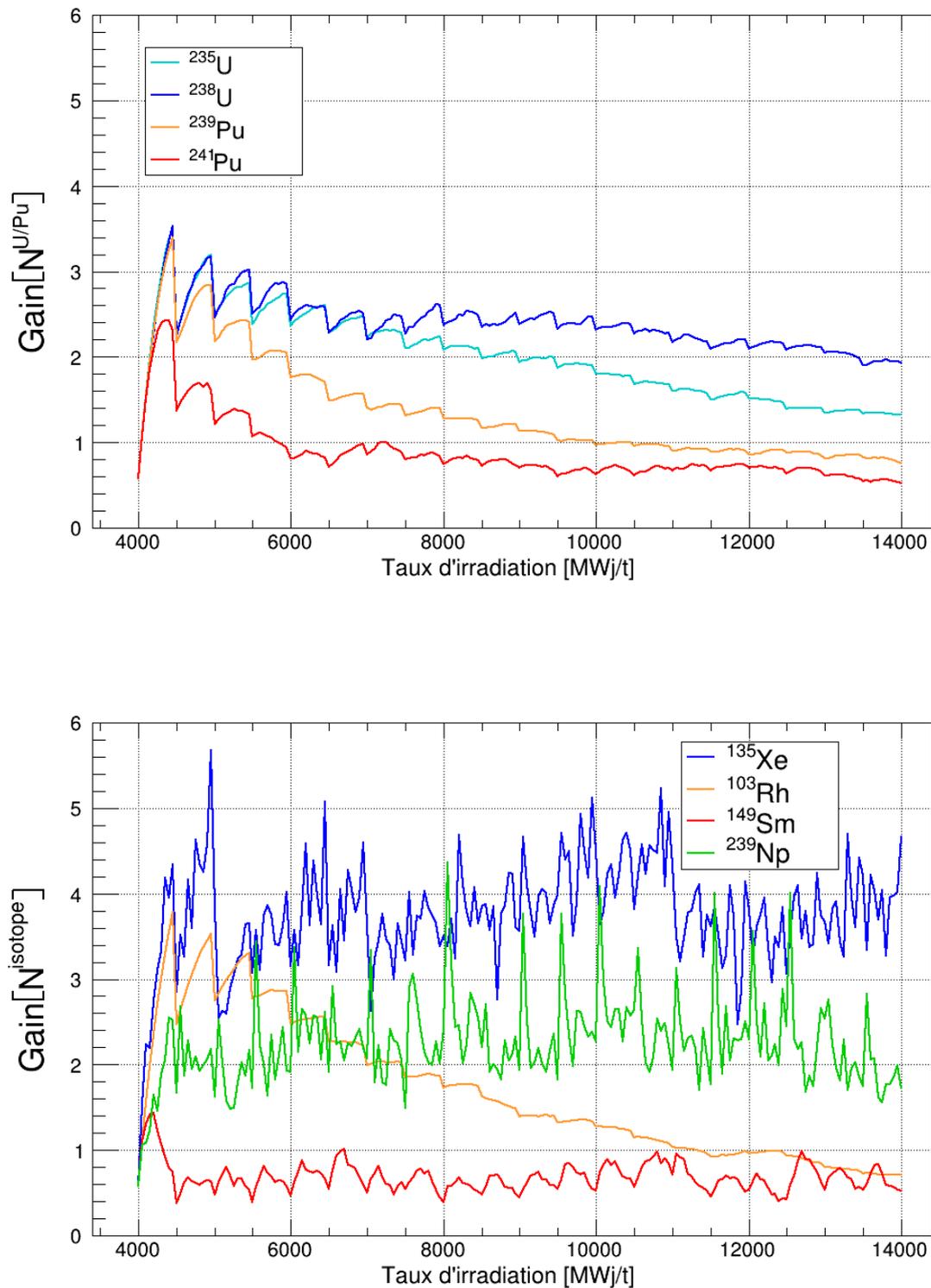


FIGURE 9.13 : Gain obtenu avec le schéma de perturbation et la méthode de réduction de variance entre 4 et 14 GWj/t sur l'estimation des concentrations isotopiques de huit noyaux (^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu et ^{241}Pu en haut et ^{135}Xe , ^{103}Rh , ^{149}Sm et ^{239}Np en bas).

Références

- [Dieu2013] C. DIEUDONNÉ, E. DUMONTEIL, F. MALVAGI et C. M. DIOP, “Depletion calculations based on perturbations. Application to the study of a REP-like assembly at beginning of cycle with TRIPOLI-4”, *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013)*, La Cité des Sciences et de l’Industrie, Paris, France, oct 2013.

Cinquième partie

BILAN ET PERSPECTIVES

Conclusion

Bilan du travail de thèse

Dans ce mémoire, nous avons cherché à développer un **nouveau schéma de couplage** des codes Monte Carlo évoluant permettant d'améliorer le temps de calcul des simulations en évolution tout en maîtrisant les incertitudes statistiques. Pour cela, nous avons présenté dans un premier temps les principes de la simulation **Monte Carlo** appliquée à la **neutronique** (échantillonnage, techniques de réduction de variance, ...), avec le code TRIPOLI-4 comme application. Puis, nous avons introduit la méthode des **échantillons corrélés** et son application à la **perturbation des concentrations isotopiques**. Enfin, on a présenté le fonctionnement des codes de calcul Monte Carlo évoluant, en s'intéressant plus particulièrement à TRIPOLI-4 évoluant. Ces différents éléments ont permis d'explicitier clairement la mise en place d'un algorithme de perturbation des calculs en évolution. Le travail qui a suivi et qui est résumé dans ce mémoire a alors été scindé en deux parties.

La première partie visait à appréhender les caractéristiques de la méthode des échantillons corrélés appliquée à la perturbation des concentrations isotopiques. Dans ce cadre, on a développé un **modèle théorique** qui a permis de prédire l'estimation du flux neutronique produit par une source quelconque sous certaines hypothèses (volume homogène et infini, transport mono-cinétique, ...) suite à une perturbation des concentrations isotopiques. Ce calcul, vérifié par des simulations, a permis de préciser les qualités et les défauts de la méthode de perturbation. Ainsi, si l'estimation du flux perturbé est toujours égale en moyenne à celui d'un transport sans perturbation, il n'en va pas de même de sa **variance**. En effet, cette dernière est **dégradée** par rapport à celle d'une simulation sans perturbation et cette dégradation augmente avec l'amplitude des perturbations. Toutefois, on a montré que cette détérioration de la variance n'est pas aléatoire. Elle dépend des caractéristiques des noyaux perturbés et du sens de la perturbation. Par exemple, si l'on perturbe la concentration d'un noyau, la dégradation de la variance du flux sera modérée si la section efficace de capture neutronique sur ce noyau est élevée. De même, cette dégradation sera moins importante si la perturbation va dans le sens d'une augmentation de la concentration du noyau. Toutes ces données ont permis de mieux comprendre **l'impact de l'échantillonnage corrélé** sur l'estimation du flux neutronique et ont fourni de premiers résultats encourageants pour une application de la méthode de perturbation dans les calculs en évolution.

Ensuite, la seconde étape de ce travail concernait l'implémentation proprement dite de la méthode au sein de TRIPOLI-4 évoluant. Pour cela, un développement logiciel spécifique (s'appuyant sur les bibliothèques informatiques de ROOT) a été réalisé afin de pouvoir **post-traiter** les traces ROOT issues des transports Monte Carlo TRIPOLI-4. La méthode de perturbation des calculs en évolution a été implémentée au sein des scripts de couplage de TRIPOLI-4 évoluant, et plus particulièrement dans le schéma numérique d'**Euler explicite**. Pour valider l'utilisation d'un tel schéma, on a mis en place une procédure basée sur le **test t de Student**. Ce test permet de vérifier la compatibilité de l'ensemble des résultats issus de la méthode "classique" avec ceux du schéma de perturbation car il tient compte à la fois de la moyenne et de la variance des résultats. Pour cela, on a effectué systématiquement deux simulations dans les mêmes conditions (c'est-à-dire avec le même nombre de particules simulées, le même maillage temporel, ...), l'une avec la méthode classique et l'autre avec la méthode de perturbation. Et on reproduit ces simulations un grand nombre de fois de manière indépendante afin d'estimer la variance de l'ensemble des scores. Et concernant les performances de la méthode de perturbation, la mesure du temps de calcul ne suffit pas à montrer que la méthode de perturbation accélère les calculs Monte Carlo

évaluant. En effet, la qualité des résultats de simulations, qui se mesure par la valeur de leur variance, doit aussi être prise en compte, car l'étude théorique de l'échantillonnage corrélé a montré que cette méthode perturbative ne permet pas de réduire la variance. Pour que la méthode de perturbation apporte une accélération aux calculs en évolution, il faut donc que le temps de calcul du schéma perturbé soit meilleur que celui du schéma classique et que la variance des résultats perturbés soit dégradée dans une moindre mesure. Pour quantifier cela, on compare **la figure de mérite** des simulations non-perturbée et perturbée, car cette grandeur réunie dans une même formule la mesure du **temps de calcul** et celle de la **variance** des résultats.

Les premiers calculs effectués sur **une cellule REP** ont montré que le premier algorithme de perturbation utilisé n'était pas adapté au calcul d'un cycle complet. Le faible gain en temps obtenu ne permettait pas de compenser la perte importante en termes de dégradation de la variance des scores. De plus, la méthode des échantillons corrélés possède intrinsèquement une limitation importante pour les calculs en évolution. En effet, **on ne peut pas faire apparaître d'isotopes** entre les simulations non-perturbée et perturbée. Cela induit une forte restriction sur le schéma de perturbation puisque celui-ci ne peut démarrer tant que tous les éléments de la chaîne d'évolution ne sont pas apparus dans les milieux évoluant. Une **optimisation** de l'algorithme était donc nécessaire pour redonner de l'intérêt à ce schéma. Dans ce but, deux types d'optimisations ont été réalisés. Leur objectif est d'améliorer la figure de mérite de la méthode de perturbation (en diminuant le temps de calcul d'une part et en limitant la dégradation de la variance d'autre part), mais aussi de permettre au schéma de perturbation d'être utilisable même lorsque tous les noyaux de la chaîne d'évolution ne sont pas encore apparus.

La première optimisation visait à **améliorer le temps de calcul** des simulations perturbées. Cette optimisation a été effectuée notamment en augmentant le nombre de données écrites dans les fichiers de traces, ce qui a permis d'étendre le périmètre du sujet de la thèse. En effet, de la même manière que l'échantillonnage corrélé consiste à ré-exploiter les événements issus d'une simulation pour en remplacer une autre, l'ajout des données nucléaires² dans la structure des traces permet de généraliser le principe de l'algorithme de perturbation à un concept plus large : **l'exploitation de la persistance des données des simulations**. De ce point de vue, le schéma de perturbation consiste donc à sauvegarder un maximum d'informations au cours d'une simulation donnée pour remplacer différentes phases de transport d'un calcul en évolution dans le but d'accélérer le calcul. Il suffit, pour se faire, d'enrichir les fichiers de traces de toutes les données possibles permettant de reconstruire plus rapidement les différentes phases de transport. Cela augmente le temps de création des fichiers de traces, mais réduit considérablement le temps de leurs exploitations.

La seconde optimisation propose quant à elle de **minimiser la dégradation de la variance**. Pour cela, une procédure de réduction de variance a été mise en place. Elle consiste à améliorer la **représentativité des traces** sur tous les pas de temps où elles sont utilisées en modifiant le jeu de concentrations isotopiques utilisé par la simulation ayant permis d'enregistrer les traces. Plus précisément, pour chaque intervalle de temps où un même fichier de traces est utilisé, au lieu de fabriquer ces traces à partir des concentrations isotopiques du début de l'intervalle de temps, cette méthode propose de les fabriquer à partir des concentrations du milieu de cet intervalle. Cela permet alors de minimiser tout au long de l'évolution l'amplitude des perturbations. Mais cette information (c'est-à-dire le jeu de compositions isotopiques) n'est pas connue au début du calcul. On réalise alors **un pré-calcul** afin d'estimer la valeur de ces concentrations. Comme l'objectif de la méthode est de minimiser l'amplitude des perturbations, c'est-à-dire l'écart entre les concentrations isotopiques du calcul en évolution et celles servant à générer les traces, aucune valeur exacte n'est requise. Une simple estimation des concentrations isotopiques recherchées suffit. On montre alors que la qualité des résultats perturbés utilisant cette méthode est nettement améliorée. Et suivant le même principe, on ajoute arbitrairement à ces jeux de concentrations isotopiques tous les noyaux de la chaîne d'évolution qui ne sont pas apparus. Cela permet d'utiliser le schéma de perturbation sur **l'ensemble du cycle du combustible**.

Enfin, pour **valider** définitivement l'utilisation des échantillons corrélés au sein des calculs en évolution, et pour mesurer **l'efficacité** de la méthode de réduction de variance mise en place, on effectue une nouvelle simulation sur **le début de cycle d'un assemblage REP**. Cette étude a montré que le schéma de perturbation permet de **reconstruire correctement toute la simulation**. Et concernant les performances de la méthode, le bilan est plus contrasté car l'efficacité de la technique de réduction de variance n'est pas la même sur tous les scores. En effet, celle-ci fonctionne correctement lorsque l'erreur statistique relative des scores est stable au cours de l'évolution, ce qui concerne un grand nombre de grandeurs telles que le facteur de multiplication

2. Telles que les sections efficaces microscopiques

des neutrons, la distribution spatiale de puissance, le flux neutronique et certaines concentrations isotopiques. Dans ce cas, la variance n'est pas dégradée par le schéma de perturbation et **le gain sur la figure de mérite** est alors proche du gain sur le temps de calcul, c'est à dire compris **entre 3 et 5 dans notre cas**. Par contre, dans le cas où la variance des scores non-perturbée varie au cours de l'évolution (ce qui concerne uniquement la plupart des concentrations isotopiques), la variance des résultats perturbés est tout de même dégradée. La méthode de réduction de variance est donc moins efficace. Mais cela permet tout de même d'améliorer la figure de mérite de certaines concentrations isotopiques. Par exemple, dans le cas de l'assemblage REP, la figure de mérite de la concentration isotopique de l'uranium 238 est améliorée d'un facteur compris entre 3,5 et 2.

Le bilan de cette méthode est donc particulièrement encourageant et permet d'envisager son application à des configurations plus complexes. On a mis en place **un schéma d'accélération** des calculs Monte Carlo évoluant en exploitant **la persistance** de toutes les données des simulations Monte Carlo (notamment avec la méthode des échantillons corrélés), ce qui permet de reconstruire et d'accélérer l'ensemble des calculs en évolution. Cette méthode, qui n'introduit **aucune restriction** sur les paramètres du calcul, permet d'obtenir **des gains conséquents** sur la majeure partie des résultats. Et concernant les scores dont le bilan est plus partagé, on verra dans la suite de cette partie que le schéma utilisé est perfectible et que les gains obtenus peuvent être améliorés. De plus, elle pourra être étendue à d'autres types de situations physiques faisant varier les concentrations isotopiques, comme les variations des conditions thermohydrauliques en situation normale et accidentelle (traitement des transitoires).

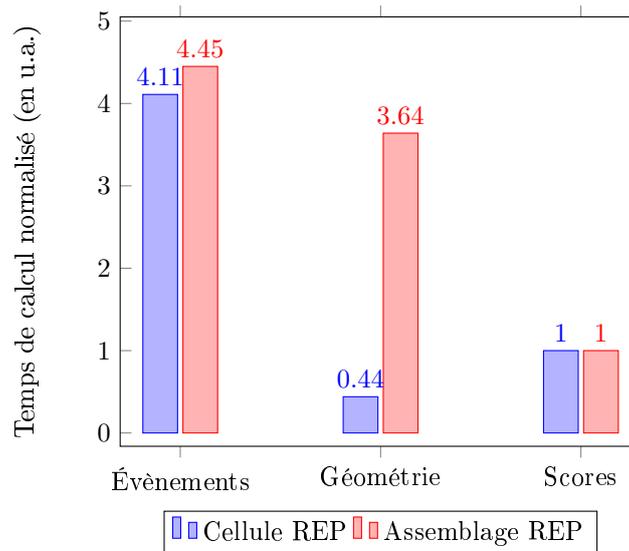
Perspectives de développement

On présente dans cette dernière partie les différentes perspectives de développement du schéma de perturbation qui sont envisageables **pour améliorer ou pour étendre** les capacités du schéma de perturbation. Mais auparavant, on analyse plus en détail les temps de calcul des différentes simulations réalisées dans la partie IV afin de mieux comprendre **la valeur des gains en temps** obtenus avec le schéma de perturbation.

On peut considérer que le temps de calcul d'un transport Monte Carlo est occupé par trois fonctionnalités principales du code : l'échantillonnage des **événements** de l'histoire des neutrons, le suivi des particules dans la **géométrie** et le calcul des **scores**. En jouant sur les options d'entrées des calculs Monte Carlo, on peut estimer le temps occupé par chacune de ces trois fonctionnalités. Par exemple, on peut effectuer une simulation sans le calcul des scores, ce qui permet d'estimer facilement le temps passé à encaisser les différents scores. Ainsi, on obtient les valeurs indiquées dans le tableau suivant :

Cas test	Cellule REP	Assemblage REP
Temps consacré à la génération des événements aléatoires (%)	74	49
Temps consacré au suivi des particules dans la géométrie (%)	8	40
Temps consacré à l'encaissement des scores (%)	18	11

Mais pour mieux interpréter ces résultats, on normalise les temps de chaque partie de telle sorte que le temps consacré à l'encaissement des scores soit égal à 1³. On obtient alors les valeurs suivantes :



L'intérêt de cette normalisation est de constater que pour un même calcul de score, le temps passé à générer des événements aléatoires est presque identique dans les deux cas tests étudiés. Ceci est dû au fait que les compositions isotopiques sont similaires dans les deux cas tests et à l'utilisation d'une même chaîne d'évolution dans ces deux cas. Le temps consacré à la génération des événements aléatoires est toutefois légèrement plus long pour l'assemblage car la présence des tubes guides améliore la modération des neutrons, ce qui se traduit par une augmentation du nombre moyen de collisions subies par ces particules. Par contre, il n'en va pas de même pour le temps consacré au suivi des particules dans la géométrie. Ce temps est beaucoup plus court dans le cas de la cellule que dans le cas de l'assemblage (le rapport entre les deux temps est d'environ 8). Ceci est dû à la difficulté du code de calcul à suivre les mouvements des particules dans les géométries complexes et à déterminer les coordonnées des interfaces traversées par les particules. Dans le cas où l'on traite une géométrie plus complexe que celle de l'assemblage REP, comme celle d'un cœur de réacteur complet par exemple,

3. Par exemple, pour le temps de suivi dans la géométrie dans l'assemblage REP, on divise cette valeur (40) par le temps consacré à l'encaissement des scores, c'est-à-dire 11.

seul ce temps est modifié. La partie consacrée à la génération des événements aléatoires serait, elle, peu modifiée (pour les mêmes raisons qu'elle n'a presque pas changé entre le calcul de la cellule et celui de l'assemblage).

Or, l'utilisation du schéma de perturbation vise à **factoriser** ces deux parties du temps de calcul, grâce à la persistance des données de simulations, et à les remplacer par des perturbations dont le calcul est nettement plus **rapide**. En effet, l'échantillonnage corrélé applique des **variations de poids** (tout comme TRIPOLI-4 lors de chaque collision) mais n'effectue **aucun ré-échantillonnage d'évènements**. Cette modification des poids nécessite de connaître quelques sections efficaces, mais n'a besoin d'aucune information sur la géométrie. Et le rôle de la persistance des données de simulations et de fournir à la méthode des échantillons corrélés toutes les informations utiles permettant de construire le plus rapidement possible ces modifications de poids. L'association de ces deux méthodes peut donc agir significativement sur le suivi des particules et la génération des événements aléatoires en les supprimant de la plupart des simulations de transport. Le calcul d'un cœur de réacteur complet, et plus généralement celui d'une géométrie plus complexe que celle de l'assemblage REP, avec le schéma de perturbation aura donc probablement de **meilleurs gains sur les figures de mérite**.

Concernant les **améliorations** possibles du schéma de perturbation, on peut imaginer d'autres méthodes d'accélération des calculs Monte Carlo évoluant. Quatre d'entre elles ont été identifiées et sont présentées ici. Si elles n'ont pas été développées au sein de ces travaux, elles sont des pistes visant à permettre l'utilisation de la persistance des données de simulation à des fins d'accélération :

1. Accélération des schémas de couplage d'ordre N

Dans un schéma numérique d'ordre $N > 1$, plusieurs simulations Monte Carlo sont réalisées entre chaque pas de temps. Or, dans la pratique, le temps de simulation limite les calculs Monte Carlo évoluant à l'ordre 2. Mais pour améliorer la précision des calculs, il est nécessaire d'améliorer, entre autres, l'ordre du schéma temporel utilisé. De ce fait, entre deux pas de temps successifs, on peut perturber les N transports du schéma temporel de la même manière que cela a été fait jusqu'ici entre plusieurs pas de temps. Et comme a priori l'évolution des concentrations isotopiques est modérée entre deux pas de temps, la dégradation de la variance des résultats perturbés devrait être négligeable (même sans la méthode de réduction de variance). De plus, le temps de calcul des pas utilisant l'échantillonnage corrélé est très faible comparé à celui des pas sans perturbation. On peut donc approximer le temps de calcul entre deux pas de ce schéma de perturbation d'ordre N à celui de la génération du jeu de traces. Comme celui-ci est 140 % plus élevé qu'un calcul sans perturbation, le gain obtenu devrait être supérieur à 1 à partir de $N = 3$.

2. Prise en compte des incertitudes sur les données nucléaires (sections efficaces, ...)

Lors du transport Monte Carlo, les incertitudes sur les données nucléaires sont généralement ignorées. Pour les prendre en compte, il est envisageable par exemple de générer différentes évaluations échantillonnées à partir des données de variance/covariance présentes dans les principales bibliothèques (JEFF, ENDF, ...). À partir de chacune de ces évaluations, on réalise un calcul de transport indépendant. La distribution des résultats ainsi obtenus est alors cohérente vis à vis de ces incertitudes. Plus généralement, on peut procéder de manière similaire pour intégrer toutes les incertitudes des données d'entrée du calcul. Cette méthode est appelée Total Monte Carlo (TMC) [Roch2011].

Mais lors d'un calcul en évolution, la prise en compte de ces incertitudes par la méthode TMC augmente rapidement le nombre de transport Monte Carlo à effectuer. En effet, à chaque pas de temps, le schéma temporel utilisé nécessite alors N simulations Monte Carlo pour chacune des évaluations indépendantes. Cette méthode réduit donc fortement les performances du calcul. Pour pallier ce problème, on peut à chaque pas de temps remplacer les différents transports Monte Carlo utilisant des données différentes par la perturbation d'un unique transport avec l'échantillonnage corrélé. Le nombre de simulations de transport ne serait alors pas modifié par l'introduction de la méthode TMC dans les calculs en évolution. De plus, on remarque que les différentes évaluations indépendantes sont générées avant le calcul en évolution. Tous les paramètres des perturbations sont donc connus lors des différentes simulations Monte Carlo. Le post-traitement des traces n'est alors pas nécessaire dans ce cas, ce qui minimise l'impact sur le temps de calcul de la méthode TMC. On peut alors considérer que la prise en compte des incertitudes sur les données d'entrée avec la méthode TMC et le schéma de perturbation n'a quasiment aucun impact sur le temps de calcul.

Mais concernant la variance, il est plus difficile d'analyser a priori son comportement avec ce schéma. En effet, la variance dépend de l'amplitude des perturbations appliquées, et donc de la valeur des incertitudes sur les données d'entrée.

3. Mise en base de données des calculs (big data)

Dans le cadre des études en évolution (tout comme pour les calculs statiques), on recherche parfois à optimiser certains paramètres physiques du problème. Par exemple, on peut chercher à optimiser le taux d'enrichissement du combustible neuf. Dans ce cas, la recherche de la valeur optimale nécessite d'effectuer un grand nombre de calculs en évolution, ce qui a un coût très important en temps de calcul. Mais on remarque que seul un nombre limité de paramètres sont modifiés d'une simulation à une autre. Il est alors envisageable de remplacer les différentes simulations par des perturbations d'un unique transport de la même façon que précédemment. Mais dans ce type d'étude, l'utilisateur ne connaît pas toujours a priori les différentes valeurs des paramètres à optimiser. De ce fait, on peut aussi envisager de sauvegarder les traces des différents transports d'une simulation en évolution de façon permanente sur le disque dur. L'utilisateur pourra alors les ré-exploiter dans un second temps, lorsque la valeur des paramètres à optimiser sera définie. La recherche de l'optimum de paramètres physiques s'effectue donc en deux étapes. La première consiste à mettre en base de données une simulation, ce qui a un coût important en temps de calcul. Mais la seconde étape, qui perturbe la simulation sauvegardée, est beaucoup plus rapide qu'une simulation classique. De plus, si les paramètres à optimiser varient peu, alors la dégradation de la variance est faible, ce qui assure des gains en figure de mérite élevés.

4. Application à d'autres types de couplage

Enfin, on remarque qu'il existe d'autres types de couplage des codes Monte Carlo que celui de l'évolution dans lesquels le schéma de perturbation peut être utilisé. Par exemple, on peut coupler les simulations de transport des calculs de thermohydraulique pour tenir compte des variations de température des matériaux. Et généralement, ces couplages sont implémentés selon les mêmes schémas que ceux des codes Monte Carlo évoluant. Ils itèrent entre les phases de transport Monte Carlo et les phases de calculs déterministes. De ce fait, le schéma de perturbation peut y être aussi appliqué.

Enfin, sans modifier le schéma de perturbation existant, il est possible de l'**optimiser** encore un peu plus pour supprimer ses deux principales contraintes. La première est l'**espace mémoire** que la mise en œuvre de ce schéma requiert. L'importance de la taille des fichiers de traces influe sur le temps de calcul. Pour améliorer les performances du schéma de perturbation, il faut donc **diminuer la taille des informations** écrites dans les fichiers traces. Or, dans l'état actuel, ce sont les données nucléaires qui occupent la plus grande partie des traces. La factorisation de ces données en une information de plus petite taille permettrait au code de calcul de parcourir plus rapidement les traces et donc de diminuer le temps de la simulation.

Pour cela, l'utilisation d'une **grille universelle** des données nucléaires pourrait être extrêmement efficace [Haec2007a, Haec2007b]. Le principe de cette grille est le même que celui de l'unification (voir le chapitre 8), mais il s'applique aux sections efficaces microscopiques de tous les isotopes de la simulation. Cette méthode propose d'utiliser un **découpage énergétique unique** pour l'ensemble des données nucléaires. Ainsi, la recherche simultanée des sections efficaces de plusieurs isotopes à une même énergie est accélérée. En effet, les données de chaque noyau sont généralement associées à une grille énergétique qui leur est propre. Le calcul des sections efficaces de chaque isotope nécessite donc de rechercher la position de l'énergie dans chacune des grilles énergétiques. Cette étape pourrait être factorisée si toutes les données partageaient une grille énergétique commune (une telle grille est alors dite universelle). Or, ce type de recherche est effectué très souvent dans le code de transport et par la méthode des échantillons corrélés. Par exemple, c'est le cas lorsque la section efficace macroscopique totale doit être calculée⁴. L'avantage de cette méthode est d'accélérer significativement les calculs perturbés et non perturbés⁵ sans avoir besoin de stocker les sections efficaces dans les traces. En contrepartie, la grille universelle a un impact très important sur l'espace mémoire, car généralement les sections efficaces des grilles énergétiques ont peu de points en commun. Toutefois, les données nucléaires utilisant la grille universelle sont exactement les mêmes pour tous les simulateurs indépendants (ce qui n'est pas le cas des données écrites dans les traces). On peut donc factoriser ce coût **en partageant ces données** entre les différents simulateurs (data sharing).

L'autre contrainte du schéma de perturbation est de ne pas pouvoir empêcher **la dégradation de la variance** lorsque celle-ci varie au cours de l'irradiation. Mais cette contrainte peut être résolue en optimisant

4. On a vu au chapitre 8 que cette donnée est construite très fréquemment, que ce soit dans le schéma classique ou dans le schéma perturbé. C'est ce qui est à l'origine de l'utilisation du maillage unifiée et de l'insertion des sections efficaces dans la structure des traces.

5. On a vu dans le cas de la cellule que l'unification a un impact fort sur les calculs non-perturbés, et qui est encore plus important avec les perturbations.

les concentrations isotopiques qui servent à la génération des traces (celles du pré-calcul). Toutefois, un seul jeu de concentration ne permet peut être pas d'atteindre cet objectif. On peut alors envisager de scinder le fichier de traces en plusieurs parties. Chacune de ces parties peut être simulée avec des concentrations isotopiques différentes. Par exemple, on peut générer des traces pour chacun des pas de temps du pré-calcul (avec moins de particules) et **utiliser plusieurs fichiers de traces** (ceux dont les concentrations isotopiques sont les plus proches de celles du calcul en cours) **pour reconstruire chaque pas de temps** des calculs en évolution. De ce fait, on améliore grandement la représentativité des traces sur chaque pas de temps, puisque dans cette configuration l'amplitude des perturbations est toujours très faible pour une partie des fichiers de traces. On peut donc supposer que la variance des résultats perturbés soit plus proche de la variance des résultats non-perturbés.

Références

- [Haec2007a] W. HAECK, An optimal approach to Monte Carlo burnup. Thèse de doctorat, Ghent University, 2007.
- [Haec2007b] W. HAECK ET B. VERBOOMEN, An optimal approach to Monte Carlo burnup, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 156, p. 180-196, jun 2007.
- [Roch2011] D. ROCHMAN, A. J. KONING, S. C. VAN DER MARCK, A. HOGENBIRK ET C. M. SCIOLLA, "Nuclear data uncertainty propagation : Perturbation vs. Monte Carlo", *Annals of Nuclear Energy*, vol. 38, p. 942-952, mai 2011.

Sixième partie

RÉFÉRENCES ET ANNEXES

Table des matières de la partie VI

Liste des références consultées	145
A Démonstrations de différents calculs en simulation analogue, non-analogue et perturbée	149
A.1 Espérance de l'encaissement relatif	149
A.1.1 Dans le cas d'une simulation naturelle	149
A.1.2 Dans le cas d'une simulation non-analogue	150
A.2 Équation du transport avec carte d'importance	150
A.3 Corrections de poids dues à l'échantillonnage corrélé	151
A.4 Incertitude statistique relative pour des faibles perturbations	152
B Démonstration des résultats théoriques	155
B.1 Calculs à 1 isotope	155
B.1.1 Equivalence avec le modèle de perturbation en densité	155
B.1.2 Résolution du problème initial	156
B.1.3 Résolution du problème perturbé	157
B.2 Calculs à N isotopes	161
B.2.1 Résolution du problème initial	161
B.2.2 Résolution du problème perturbé	162

Liste des références consultées

- [1] M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, 9th edition*. Dover, NY, 1972.
- [2] I. ANTICHEVA, M. BALLINTIJN, B. BELLENOT, M. BISKUP, R. BRUN, N. BUNCIC, P. CANAL, D. CASADEI, O. COUET, V. FINE, L. FRANCO, G. GANIS, A. GHEATA, D. GONZALEZ MALINE, M. GOTO, J. IWASZ- KIEWICZ, A. KRESHUK, D. MARCOS SEGURA, R. MAUNDER, L. MONETA, A. NAUMANN, E. OFFERMANN, V. ONUCHIN, S. PANACEK, F. RADEMAKERS, P. RUSSO et M. TADEL, “ROOT - A C++ framework for petabyte data storage, statistical analysis and visualization”, juil 2009.
- [3] W. BERNNAT, “Monte Carlo technique for local perturbation in multiplying systems”, *Proceedings of the NEACRT meeting of a Monte Carlo study group, ANL-75-2*, p. 261-280, juil 1974.
- [4] E. BRUN, E. DUMONTEIL, Y. COBIGO, F.-X. HUGOT, N. HUOT, C. JOUANNE, Y.-K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT, J.-C. TRAMA et T. VISONNEAU, “TRIPOLI-4 Version 6 User Guide”, rapport technique, CEA Saclay, 2009.
- [5] E. BRUN, E. DUMONTEIL et F. MALVAGI, “Systematic uncertainty due to statistics in Monte Carlo burnup codes : Application to a simple benchmark with TRIPOLI-4-D”, *Progress in Nuclear Science and Technology*, vol. 2, p. 879-885, 2011.
- [6] E. BRUN ET E. DUMONTEIL, “Guide d’utilisation de TRIPOLI-4 Evoluant Version 1.1”, rapport technique, CEA Saclay, Référence DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD/RT/12-5307/A, 2012.
- [7] R. BRUN et F. RADEMAKERS, “ROOT - An Object Oriented Data Analysis Framework”, *Proceedings AIHENP’96 Workshop*, sep 1997. voir aussi <http://root.cern.ch/>.
- [8] G. DEJONGHE, *Études d’effets différentiels par la méthode de Monte Carlo dans le cadre de l’équation du transport. Applications aux calculs de protection et de neutronique*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1982.
- [9] J. M. DEPINAY, *Automatisation de méthodes de réduction de variance pour la résolution de l’équation de transport*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, mai 2000.
- [10] C. DIEUDONNÉ, E. DUMONTEIL, F. MALVAGI et C. M. DIOP, “Monte Carlo burnup code acceleration with the correlated sampling method. Preliminary test on an UOX cell with TRIPOLI-4”, *Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2013)*, Sun Valley, Idaho, USA, mai 2013.
- [11] C. DIEUDONNÉ, E. DUMONTEIL, F. MALVAGI et C. M. DIOP, “Depletion calculations based on perturbations. Application to the study of a REP-like assembly at beginning of cycle with TRIPOLI-4”, *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013)*, La Cité des Sciences et de l’Industrie, Paris, France, oct 2013.
- [12] C. M. DIOP, O. PETIT., E. DUMONTEIL, F.-X. HUGOT, Y.-K. LEE, A. MAZZOLO et J.-C. TRAMA, “TRIPOLI-4 : A 3D continuous-energy Monte Carlo transport code”, *First International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications*, 2007.
- [13] J. DUFEK ET J. E. HOOGENBOOM, “Numerical stability of existing Monte Carlo burnup codes in cycle calculations of critical reactors”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 162, p. 307-311, 2009
- [14] E. DUMONTEIL, F.-X. HUGOT, C. JOUANNE, Y.-K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT et J.-C. TRAMA, “An overview on the Monte Carlo particle transport code TRIPOLI-4”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 97, p. 694-695, nov 2007. Présenté par C. M. Diop.

- [15] E. DUMONTEIL et C. M. DIOP, “Unbiased minimum variance estimator of a matrix exponential function. Application to Boltzmann/Bateman coupled equations solving”, *International Conference on Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics*, 2009.
- [16] E. DUMONTEIL et C. M. DIOP, “Biases and statistical errors in Monte Carlo burnup calculations : An unbiased stochastic scheme to solve Boltzmann/Bateman coupled equations”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, p. 165-170, fév 2011.
- [17] J. A. FAVORITE, “An alternative implementation of the differential operator (Taylor series) perturbation method for Monte Carlo criticality problems”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 142, p. 327-341, nov 2002.
- [18] J. A. FAVORITE, “On the accuracy of the differential operator Monte Carlo perturbation method for eigenvalue problems”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 101, p. 460-462, nov 2009.
- [19] N. GARCÍA-HERRANZ, O. CABELLOS, J. SANZ, J. JUAN ET J. C. KUIJPER, “Propagation of statistical and nuclear data uncertainties in Monte Carlo burn-up calculations”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 35, p. 714-730, avr 2008.
- [20] M. C. HALL, *Monte Carlo perturbation theory in neutron transport calculations*. Thèse de doctorat, University of London, 1980.
- [21] M. C. HALL, “Cross-section adjustment with Monte Carlo sensitivities : application to the Winfrit iron benchmark”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 81, p. 423-431, 1982.
- [22] T. HE ET B. SU, “On using correlated sampling to simulate small changes in system response by MCNP”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 37, p. 34-42, jan 2010.
- [23] J. E. HOOGENBOOM, “Uncertainty propagation in Monte Carlo burn-up calculations - State of the art report”, rapport technique, DNC102/08, 2008.
- [24] E. A. IVANOV, “Method of estimating the sensitivity of a calculated nuclide vector to deviations in initial data”, rapport technique, IAEA report INDC(CCP)-418, déc 1998.
- [25] E. A. IVANOV, “Error propagation in Monte Carlo burn-up calculations”, *International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, 2005.
- [26] I. LUX et L. KOBLINGER, *Monte Carlo particle transport methods : neutron and photon calculations*. CRC Press, 1991.
- [27] H. METIVIER, *Radioprotection et ingénierie nucléaire*. EDP Science, 2006.
- [28] M. MORIWAKI ET M. AOYAMA, “Improvement of Monte Carlo lattice burnup calculation performance with the correlated sampling method”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 39, p. 587-596, juin 2002.
- [29] M. MORIWAKI, “Multi-assembly analysis with an advanced correlated sampling method”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 40, p. 905-917, nov 2003.
- [30] Y. NAGAYA ET T. MORI, “Impact of perturbed source on the effective multiplication factor in Monte Carlo perturbation calculations”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 42, p. 428-441, mai 2005.
- [31] Y. NAGAYA ET T. MORI, “Calculation of effective delayed neutron fraction with Monte Carlo perturbation techniques”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 38, p. 254-260, fév-mar 2011.
- [32] M. NAKAGAWA ET T. ASAOKA, “Improvement of correlated sampling Monte Carlo methods for reactivity calculations”, *Nuclear Science and Technology*, vol. 5, p. 400-410, juin 1978.
- [33] J. E. OLHOEFT, “The doppler effect for a non-uniform temperature distribution in reactor fuel elements”, rapport technique, WCAP-2048, Westinghouse Electric Corporation, Atomic Power Division, Pittsburgh, 1962.
- [34] O. PETIT, “Inventaire des techniques de biaisage dans les codes de transport de particules par la méthode Monte Carlo”, rapport technique, CEA Saclay, Rapport DM2S/SERMA/LTSD/RT/09-4680/A, 2009.
- [35] P. REUSS, *Précis de neutronique*. EDP Science, 2003.
- [36] H. RIEF, “Generalized Monte Carlo perturbation algorithms for correlated sampling and a second-order Taylor series approach”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 11, no. 9, p. 455-476, 1984.
- [37] H. RIEF, “Stochastic perturbation analysis applied to neutral particle transport”, *Advances in Nuclear Science and Technology*, vol. 23, p. 69-140, 2002.

- [38] D. ROCHMAN, A. J. KONING, S. C. VAN DER MARCK, A. HOGENBIRK ET C. M. SCIOLLA, “Nuclear data uncertainty propagation : Perturbation vs. Monte Carlo”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 38, p. 942-952, mai 2011.
- [39] H. J. SHIM, H. J. PARK ET C. H. KIM, “Error propagation in Monte Carlo depletion analysis”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 96, p. 582-584, 2007.
- [40] H. J. SHIM, H. J. PARK, H. G. JOO, Y. IL KIM ET C. H. KIM, “Uncertainty propagation in Monte Carlo depletion analysis”, *International Conference on the Physics of Reactors*, 2008.
- [41] H. J. SHIM, H. J. PARK ET C. H. KIM, “Uncertainty propagation in Monte Carlo depletion analysis”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, p. 196-208, 2011.
- [42] J. SPANIER ET E. M. GELBARD, *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Addison-Wesley Publishing Compagny, Massachusetts, 1969.
- [43] B. SU ET T. HE, “Enhanced correlated sampling by source biasing for pin diversion analysis”, *Transactions of the American Nuclear Society*, vol. 102, p. 220-221, juin 2010.
- [44] H. TAKAHASHI, “Monte Carlo method for geometrical perturbation and its application to the pulsed fast reactor”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 41, p. 259-270, 1970.
- [45] T. TAKEDA, N. HIROKAWA ET T. NODA, “Estimation of error propagation in Monte Carlo burnup calculations”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 36, p. 738-745, sep 1999.
- [46] H. KSCHWENDT ET H. RIEF, *TIMOC : a general purpose Monte Carlo code for stationary and time dependent neutron transport*. Commission of the European Communities, EUR 4519 e, 1970.
- [47] M. TOHJOH, T. ENDO, M. WATANABE ET A. YAMAMOTO, “Effect of error propagation of nuclide number densities on Monte Carlo burn-up calculations”, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 33, p. 1424-1436, 2006.
- [48] E. WOODCOCK, T. MURPHY, P. HEMMINGS AND T. LONGWORTH, “Monte Carlo technique for local perturbation in multiplying systems”, *Proceedings of the Conference on the Application of Computing Methods to Reactor Problems, ANL-7050*, p. 557-579, 1965.

Démonstrations de différents calculs en simulation analogue, non-analogue et perturbée

Les calculs présentés ici concernent les chapitres 1 et 2.

A.1 Espérance de l'encaissement relatif

A.1.1 Dans le cas d'une simulation naturelle

Proposition : L'espérance de i_0^n est égale à $\overline{I_0^n}$ avec, pour toute trace γ , la suite $\{i_0^n(\gamma)\}_{n \in \mathbb{N}}$ définie par 1.10 :

$$i_0^0(\gamma) = g(\mathbf{z}_1) \text{ et } \forall n \in \mathbb{N}^*, i_0^n(\gamma) = g(\mathbf{z}_{n+1}) \prod_{i=1}^n k_0(\mathbf{z}_i)$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{E}_0} [i_0^n] &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} i_0^n(\gamma) dp_0(\gamma) \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_{n+1}) \left[\prod_{i=1}^n k_0(\mathbf{z}_i) \right] S_0(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \prod_{i=1}^{\infty} p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) d\mathbf{z}_{i+1} \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_{n+1}) \left[\prod_{i=1}^n k_0(\mathbf{z}_i) p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) \right] T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) S_0(\mathbf{z}_0) \prod_{i=0}^n d\mathbf{z}_i \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_{n+1}) \left[\prod_{i=1}^n K_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) \right] T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) S_0(\mathbf{z}_0) \prod_{i=0}^n d\mathbf{z}_i \\ &= \langle K_0^n T_0 S_0, g \rangle_0 \\ &= \langle \psi_n, g \rangle_0 \\ &= \overline{I_0^n} \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{E}_0} [i_0^0] &= \int_{\mathcal{E}_0} i_0^0(\gamma) dp_0(\gamma) \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_1) S_0(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \\ &= \langle T_0 S_0, g \rangle_0 \\ &= \overline{I_0^0} \end{aligned}$$

A.1.2 Dans le cas d'une simulation non-analogue

Proposition : L'espérance de $i_0^{n*}(\gamma)$ est égale à $\overline{I_0^n}$ avec la suite $\{i_0^{n*}(\gamma)\}_{n \in \mathbb{N}}$ définie par 1.11 :

$$i_0^{0*}(\gamma) = g(\mathbf{z}_1) \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \text{ et } \forall n \in \mathbb{N}^*, i_0^n(\gamma) = g(\mathbf{z}_{n+1}) \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \frac{T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{p_0^*(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} k_0(\mathbf{z}_i)$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{E}_0} [i_0^{n*}] &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} i_0^{n*}(\gamma) dp_0^*(\gamma) \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_{n+1}) \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \frac{T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \left[\prod_{i=1}^n \frac{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{p_0^*(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} k_0(\mathbf{z}_i) \right] \dots \\ &\quad \dots S_0^*(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \prod_{i=1}^{\infty} p_0^*(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) d\mathbf{z}_{i+1} \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_{n+1}) \left[\prod_{i=1}^n p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) k_0(\mathbf{z}_i) \right] T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) S_0(\mathbf{z}_0) \prod_{i=0}^n d\mathbf{z}_i \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_{n+1}) \left[\prod_{i=1}^n K_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) \right] T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) S_0(\mathbf{z}_0) \prod_{i=0}^n d\mathbf{z}_i \\ &= \langle K_0^n T_0 S_0, g \rangle_0 \\ &= \langle \psi_n, g \rangle_0 \\ &= \overline{I_0^n} \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{E}_0} [i_0^{0*}] &= \int_{\mathcal{E}_0} i_0^{0*}(\gamma) dp_0^*(\gamma) \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} g(\mathbf{z}_1) \frac{S_0(\mathbf{z}_0)}{S_0^*(\mathbf{z}_0)} \frac{T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} S_0^*(\mathbf{z}_0) d\mathbf{z}_0 T_0^*(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1) d\mathbf{z}_1 \\ &= \langle T_0 S_0, g \rangle_0 \\ &= \langle \psi_0, g \rangle_0 \\ &= \overline{I_0^0} \end{aligned}$$

A.2 Équation du transport avec carte d'importance

Proposition :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^*(P) + \Sigma_t^*(\vec{r}, E) \phi^*(P) = \iint_{04\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S^*(P)$$

avec :

$$\begin{cases} \phi^*(P) = \mathfrak{S}(P) \phi(P) \\ \Sigma_t^*(\vec{r}, E) = \Sigma_t(P) - \frac{|\vec{\nabla}_{\mathfrak{S}(P)}|}{\mathfrak{S}(P)} \vec{\Omega}(P) \cdot \frac{\vec{\nabla}_{\mathfrak{S}(P)}}{|\vec{\nabla}_{\mathfrak{S}(P)}|} \\ S^*(P) = \mathfrak{S}(P) S(P) \\ K^*(P' \rightarrow P) = \frac{\mathfrak{S}(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\mathfrak{S}(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} K(P' \rightarrow P) \end{cases}$$

Démonstration :

$$\begin{aligned}
\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(P) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(P) &= \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \frac{\phi^*(P)}{\mathfrak{S}(P)} + \Sigma_t(\vec{r}, E) \frac{\phi^*(P)}{\mathfrak{S}(P)} \\
&= \vec{\Omega} \cdot \frac{\mathfrak{S}(P) \vec{\nabla} \phi^*(P) - \phi^*(P) \vec{\nabla} \mathfrak{S}(P)}{\mathfrak{S}(P)^2} + \Sigma_t(\vec{r}, E) \frac{\phi^*(P)}{\mathfrak{S}(P)} \\
&= \frac{1}{\mathfrak{S}(P)} \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^*(P) + \left(\Sigma_t(P) - \frac{|\vec{\nabla} \mathfrak{S}(P)|}{\mathfrak{S}(P)} \vec{\Omega}(P) \cdot \frac{\vec{\nabla} \mathfrak{S}(P)}{|\vec{\nabla} \mathfrak{S}(P)|} \right) \phi^*(P) \right] \\
&= \frac{1}{\mathfrak{S}(P)} \left[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^*(P) + \Sigma_t^*(\vec{r}, E) \phi^*(P) \right]
\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
\iint \Sigma_s \phi d\vec{\Omega} dE' + S(P) &= \iint_{0\ 4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S(P) \\
&= \iint_{0\ 4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \frac{\phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')}{\mathfrak{S}(P)} d\vec{\Omega}' dE' + S(P) \\
&= \frac{1}{\mathfrak{S}(P)} \left[\iint_{0\ 4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \frac{\mathfrak{S}(P)}{\mathfrak{S}(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} \phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' \right] + S(P) \\
&= \frac{1}{\mathfrak{S}(P)} \left[\iint_{0\ 4\pi}^{\infty} \frac{\mathfrak{S}(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\mathfrak{S}(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S^*(P) \right]
\end{aligned}$$

donc en modifiant l'opérateur de transition par :

$$K^*(P' \rightarrow P) = \frac{\mathfrak{S}(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\mathfrak{S}(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} K(P' \rightarrow P)$$

le deuxième membre de l'égalité devient :

$$\iint \Sigma_s \phi d\vec{\Omega} dE' + S(P) = \frac{1}{\mathfrak{S}(P)} \left[\iint_{0\ 4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S^*(P) \right]$$

et on trouve alors :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi^*(P) + \Sigma_t^*(\vec{r}, E) \phi^*(P) = \iint_{0\ 4\pi}^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + S^*(P)$$

A.3 Corrections de poids dues à l'échantillonnage corrélé

Proposition 1 : La correction de poids de l'échantillonnage corrélé vaut :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{\omega_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma)}{\omega_0^n(\gamma) dp_0^n(\gamma)}$$

Démonstration : A partir de l'expression suivante :

$$\forall n \in \mathbb{N}, i_1^n(\tilde{\gamma}) dp_0^{n*}(\tilde{\gamma}) = i_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma)$$

où l'on a :

- $i_1^n(\tilde{\gamma}) = \omega_0^{n*}(\tilde{\gamma}) g(\mathbf{z}_{n+1}) = \kappa_{cs}^n(\gamma) \omega_0^{n*}(\gamma) g(\mathbf{z}_{n+1}) = \kappa_{cs}^n(\gamma) c_0^n(\gamma) \omega_0^n(\gamma) g(\mathbf{z}_{n+1}) = \kappa_{cs}^n(\gamma) \frac{dp_0^n(\tilde{\gamma})}{dp_0^{n*}(\tilde{\gamma})} \omega_0^n(\gamma) g(\mathbf{z}_{n+1})$
- $i_1^n(\gamma) = \omega_1^n(\gamma) g(\mathbf{z}_{n+1})$

on établit facilement l'expression de $\kappa_{cs}^n(\gamma)$.

Proposition 2 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \kappa_{cs}^0(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0)T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0)T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \\ \forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{S_1(\mathbf{z}_0)T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0)T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{K_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{K_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} = \frac{\omega_1^n(\gamma)}{\omega_0^n(\gamma)} \frac{S_1(\mathbf{z}_0)T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0)T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{p_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

Démonstration : A partir de la définition de la correction de poids de la méthode des échantillons corrélés :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \kappa_{cs}^n(\gamma) = \frac{\omega_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma)}{\omega_0^n(\gamma) dp_0^n(\gamma)}$$

on établit son expression :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \kappa_{cs}^n(\gamma) &= \frac{\omega_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma)}{\omega_0^n(\gamma) dp_0^n(\gamma)} \\ &= \frac{\omega_1^n(\gamma) S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{\omega_0^n(\gamma) S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{p_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} \\ &= \frac{S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{p_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) k_1(\mathbf{z}_i)}{p_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1}) k_0(\mathbf{z}_i)} \\ &= \frac{S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \prod_{i=1}^n \frac{K_1(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})}{K_0(\mathbf{z}_i \rightarrow \mathbf{z}_{i+1})} \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} \kappa_{cs}^0(\gamma) &= \frac{\omega_1^0(\gamma) dp_1^0(\gamma)}{\omega_0^0(\gamma) dp_0^0(\gamma)} \\ &= \frac{S_1(\mathbf{z}_0) T_1(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)}{S_0(\mathbf{z}_0) T_0(\mathbf{z}_0 \rightarrow \mathbf{z}_1)} \end{aligned}$$

Proposition 3 : L'espérance de $i_1^n[\tilde{\gamma}]$ dans (\mathcal{M}_0) , notée $E_{\mathcal{E}_0}[i_1^n[\tilde{\gamma}]]$, est égale à $\overline{I_1^n}$, où $\tilde{\gamma}$ est une trace de (\mathcal{M}_0) dont le poids a été modifié de telle sorte que :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad i_1^n(\tilde{\gamma}) dp_0^{n*}(\tilde{\gamma}) = i_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma)$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{E}_0}[i_1^n[\tilde{\gamma}]] &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} i_1^n(\tilde{\gamma}) dp_0^{n*}(\tilde{\gamma}) \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} i_1^n(\tilde{\gamma}) dp_0^{n*}(\tilde{\gamma}) \\ &= \int_{\mathcal{E}_0} \dots \int_{\mathcal{E}_0} i_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma) \\ &= \int_{\mathcal{E}_1} \dots \int_{\mathcal{E}_1} i_1^n(\gamma) dp_1^n(\gamma) \\ &= \int_{\mathcal{E}_1} \dots \int_{\mathcal{E}_1} i_1^n(\gamma) dp_1(\gamma) \\ &= E_{\mathcal{E}_1}[i_1^n] (= E_{\mathcal{E}_1}[i_1^{n*}]) \\ &= \overline{I_1^n} \end{aligned}$$

A.4 Incertitude statistique relative pour des faibles perturbations

Proposition : L'incertitude relative d'une réponse différentielle établie par deux simulations Monte Carlo indépendantes diverge dans le cas de faibles perturbations.

Démonstration : La moyenne et la variance de la réponse différentielle $\delta R = R_1 - R_0$ sont définies par :

$$\begin{aligned} E_\varepsilon [\delta R] &= E_\varepsilon [R_1] - E_\varepsilon [R_0] \\ \text{Var}_\varepsilon [\delta R] &= \text{Var}_\varepsilon [R_0] + \text{Var}_\varepsilon [R_1] - 2\text{CoV}_\varepsilon [R_0, R_1] \end{aligned}$$

Or, dans le cas de simulations indépendantes, on a :

$$\text{CoV}_\varepsilon [R_0, R_1] = 0$$

De plus, si la taille des perturbations, $\delta\alpha$, est faible, la réponse différentielle :

$$\begin{aligned} E_\varepsilon [\delta R] &\xrightarrow{\delta\alpha \rightarrow 0} 0 \\ \text{Var}_\varepsilon [R_1] &\xrightarrow{\delta\alpha \rightarrow 0} \text{Var}_\varepsilon [R_0] \end{aligned}$$

et concernant l'écart type relatif :

$$\begin{aligned} e(\delta R) &= \frac{\sqrt{\text{Var}_\varepsilon [\delta R]}}{E_\varepsilon [\delta R]} \\ &= \frac{\sqrt{\text{Var}_\varepsilon [R_0] + \text{Var}_\varepsilon [R_1]}}{E_\varepsilon [\delta R]} \\ &\underset{\delta\alpha \rightarrow 0}{\sim} \frac{\sqrt{2\text{Var}_\varepsilon [R_0]}}{E_\varepsilon [\delta R]} \end{aligned}$$

L'incertitude statistique relative est donc divergente.

Démonstration des résultats théoriques

Les calculs présentés ici concerne les chapitres 6 et 7.

B.1 Calculs à 1 isotope

B.1.1 Equivalence avec le modèle de perturbation en densité

Proposition : Dans le modèle du chapitre 5, la perturbation de la densité d'un matériau à N isotopes est équivalente à la perturbation en concentration d'un matériau ayant un unique isotope avec les caractéristiques moyenne du milieu multi-isotopique, c'est-à-dire dont la concentration et les sections efficaces macroscopiques sont respectivement égales à la somme des concentrations et des sections efficaces macroscopiques de chaque isotope.

Démonstration : On note $X_{[\rho]}$ la grandeur X dans le matériau à N isotopes dont on perturbe la densité et $X_{[c]}$ la grandeur X dans le matériau mono-isotopique. D'après l'annoncé, on a :

$$\sum_{i=1}^N N_{[\rho]}^i = N_{[c]}^1, \quad (\text{B.1})$$

$$\forall r, \Sigma_{r[\rho]} \equiv \sum_{i=1}^N \Sigma_{r[\rho]}^i = \Sigma_{r[c]}^1, \quad (\text{B.2})$$

ce qui implique, entre autres, que :

$$\Sigma_{t[\rho]} = \Sigma_{t[c]}. \quad (\text{B.3})$$

Dans le premier cas, celui traité dans la littérature, on perturbe la densité du matériau par un facteur¹ que l'on note λ . Les concentrations, ainsi que les sections efficaces macroscopiques partielles, de chaque isotope sont donc corrigées par ce même facteur dans le système perturbé. Ainsi, d'après les conditions B.1 et B.2, ceci entraîne la perturbation de la concentration (et donc des sections efficaces macroscopiques partielles) de l'isotope du matériau mono-isotopique par le facteur λ :

$$\sum_{i=1}^N N_{[\rho]}^{i*} = \sum_{i=1}^N \lambda N_{[\rho]}^i = \lambda N_{[c]}^1 = N_{[c]}^{1*},$$

$$\forall r, \Sigma_{r[\rho]}^* = \sum_{i=1}^N \Sigma_{r[\rho]}^{i*} = \sum_{i=1}^N \lambda \Sigma_{r[\rho]}^i = \lambda \sum_{i=1}^N \Sigma_{r[\rho]}^i = \lambda \Sigma_{r[c]}^1 = \Sigma_{r[c]}^{1*} = \Sigma_{r[c]}^*,$$

ce qui implique, entre autres, que :

$$\Sigma_{t[\rho]}^* = \Sigma_{t[c]}^*. \quad (\text{B.4})$$

1. On montre facilement que ce facteur λ est égale à α .

Dans le modèle théorique (défini au chapitre 5), les seules grandeurs d'intérêt pour le calcul du score sont les distances parcourues entre chaque collision, la liste des isotopes rencontrés et le poids des particules avant chaque collision. Or, la probabilité de parcourir une certaine distance puis d'effectuer une collision ne dépend que de la section efficace macroscopique totale du matériau rencontré, qui est toujours la même dans les deux cas (voir les égalités B.3 et B.4). De plus, lorsque l'on simule un neutron (dans le système non-perturbé), comme les sections efficaces partielles du matériau multi-isotopique sont égales à celles du matériau mono-isotopique (d'après la condition B.2) la liste des interactions subies par ce neutron est identique dans les deux milieux (multi- et mono- isotopique). Les traces des particules sont donc les mêmes dans les deux cas. En particulier, on a :

$$\gamma_{n[\rho]} = \gamma_{n[c]}. \quad (\text{B.5})$$

Pour prouver l'équivalence des deux situations, il suffit donc de prouver que les poids perturbés sont identiques. D'après la définition de la correction de poids due à l'échantillonnage corrélé (Eq. 2.4) appliquée au modèle mono-cinétique en volume infini sans perturbation de la densité de source, on a² :

$$\kappa_{cs}^n(\gamma) = \prod_{0 \leq k \leq n}^{\text{collisions}} \left\{ \frac{X^{iso_{k^*}}}{X^{iso_k}} e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \|x_{k+1} - x_k\|} \right\},$$

où X^{iso_k} vaut Σ_t si $k = n$ ou N^{iso_k} sinon. Dans tous les cas, le rapport $X^{iso_{k^*}}/X^{iso_k}$ vaut λ et la correction de poids s'écrit plus simplement :

$$\kappa_{cs}^n(\gamma) = \lambda^n e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_n}.$$

Les égalités B.3, B.4 et B.5 prouvent que cette correction de poids est strictement identique dans les deux situations.

B.1.2 Résolution du problème initial

B.1.2.1 Le moment d'ordre 1

Comme $\Sigma_t > 0$, l'intégrale $\overline{R_{m1}}$ existe et vaut :

$$\begin{aligned} \overline{R_{m1}} &= \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{i=1}^m \omega_1^i \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{m}{\Sigma_t} \int_{\mathbb{R}_+^m} (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t} m p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

car $\forall \lambda > 0$ on a : $\int_{\mathbb{R}_+} \lambda e^{-\lambda l} dl = [-e^{-\lambda l}]_0^{+\infty} = 1$. Or la série de terme générale $\{m p^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[$) est convergente, de somme $\frac{1}{(1-q)^2}$, donc la série de terme général $\overline{R_{m1}}$ l'est aussi, de somme :

$$\overline{R_1} = \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R_{m1}} = \frac{1-p}{\Sigma_t} \sum_{m=1}^{\infty} m p^{m-1} = \frac{1}{\Sigma_t} \frac{1-p}{(1-p)^2} = \frac{1}{\Sigma_t} \frac{1}{1-p} = \frac{1}{\Sigma_a}$$

B.1.2.2 Le moment d'ordre 2

De même, l'intégrale $\overline{R_{m1}^2}$ existe et vaut :

$$\begin{aligned} \overline{R_{m1}^2} &= \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{i=1}^m \omega_1^i \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{m^2}{\Sigma_t^2} \int_{\mathbb{R}_+^m} (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^2} m^2 p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

2. Voir les chapitres 6 et 7 pour plus de détails.

Or la série de terme générale $\{m^2 q^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[$) est convergente, de somme $\frac{1+q}{(1-q)^3}$, donc la série de terme général \overline{R}_{m1}^2 l'est aussi, de somme :

$$\overline{R}_{m1}^2 = \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{m1}^2 = \frac{1-p}{\Sigma_t^2} \sum_{m=1}^{\infty} m^2 p^{m-1} = \frac{1}{\Sigma_t^2} \frac{1+p}{(1-p)^2} = (1+p) \overline{R}_1^2$$

B.1.2.3 La variance

Finalement, on trouve que la variance vaut :

$$\sigma_1^2 = \overline{R}_{m1}^2 - \overline{R}_1^2 = p \overline{R}_1^2$$

B.1.3 Résolution du problème perturbé

B.1.3.1 Le moment d'ordre 1

Soit une trace $\hat{\gamma}_m$ quelconque, on a :

$$\begin{aligned} R_1^{cs}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) &= \left(\frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \omega_1^{i,cs} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \left(\sum_{i=1}^m \alpha^i e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \alpha^i (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t^* \gamma_i} e^{-\Sigma_t (\gamma_m - \gamma_i)} p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

Et comme $\Sigma_t > 0$ et $\Sigma_t^* > 0$, l'intégrale \overline{R}_{m1}^{cs} existe et vaut :

$$\begin{aligned} \overline{R}_{m1}^{cs} &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \int_{\mathbb{R}_+^m} \sum_{i=1}^m \alpha^i (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t^* \gamma_i} e^{-\Sigma_t (\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \alpha^i (\Sigma_t)^m \int_{\mathbb{R}_+^m} e^{-\Sigma_t^* \gamma_i} e^{-\Sigma_t (\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \alpha^i (\Sigma_t)^m (\Sigma_t^*)^{-i} (\Sigma_t)^{-m+i} p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \alpha^i \alpha^{-i} p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} m p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

Or la série de terme générale $\{m q^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[$) est convergente, de somme $\frac{1}{(1-q)^2}$, donc la série de terme général \overline{R}_{m1}^{cs} l'est aussi, de somme :

$$\overline{R}_1^{cs} = \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{m1}^{cs} = \frac{1-p}{\Sigma_t^*} \sum_{m=1}^{\infty} m p^{m-1} = \frac{1}{\Sigma_t^*} \frac{1-p}{(1-p)^2} = \frac{1}{\Sigma_t^*} \frac{1}{1-p}$$

Comme il n'y a qu'un seul isotope dans le milieu \mathcal{M}_1 , la probabilité de survie à une interaction dans le milieu \mathcal{M}_1^* est égale à celle du milieu \mathcal{M}_1^* :

$$p^* = \frac{\Sigma_s^*}{\Sigma_t^*} = \frac{N^{1*} \sigma_s^1}{N^{1*} \sigma_t^1} = p_1 = p$$

On retrouve bien le résultat annoncé au chapitre 2 : le score perturbé converge vers le bon résultat :

$$\overline{R}_1^{cs} = \frac{1}{\Sigma_t^*} \frac{1}{1-p^*} = \frac{1}{\Sigma_a^*} = \overline{R}_1^*$$

B.1.3.2 Le moment d'ordre 2

Soit une trace $\hat{\gamma}_m$ quelconque, on a :

$$\begin{aligned} R_1^{cs2}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) &= \left(\frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \omega_1^{i,cs} \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{1}{(\Sigma_t^*)^2} \left(\sum_{i=1}^m \alpha^i e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

et avec la décomposition suivante :

$$\left(\sum_{i=1}^m a_i \right)^2 = \sum_{i=1}^m a_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m a_i a_j$$

on trouve :

$$\begin{aligned} R_1^{cs2}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) (\Sigma_t^*)^2 &= \left(\sum_{i=1}^m \alpha^{2i} e^{-2(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} p^{m-1} (1-p) + \dots \\ &\quad \dots + 2 \left(\sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha^{i+j} e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t)(\gamma_i + \gamma_j)} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} p^{m-1} (1-p) \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha^{2i} (\Sigma_t)^m e^{-2(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_i)} p^{m-1} (1-p) + \dots \\ &\quad \dots + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha^{i+j} (\Sigma_t)^m e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} e^{-\Sigma_t^*(\gamma_j - \gamma_i)} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_j)} p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

Comme $\Sigma_t > 0$ et $\Sigma_t^* > 0$, l'intégrale $\overline{R_{m1}^{cs2}}$ existe si et seulement si $2\Sigma_t^* - \Sigma_t > 0$, c'est-à-dire si et seulement si $\alpha > \frac{1}{2}$. Et dans ce cas, cette intégrale vaut :

$$\begin{aligned} \overline{R_{m1}^{cs2}}(\Sigma_t^*)^2 &= \int_{\mathbb{R}_+^m} \sum_{i=1}^m \alpha^{2i} (\Sigma_t)^m e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) + \dots \\ &\quad \dots + 2 \int_{\mathbb{R}_+^m} \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha^{i+j} (\Sigma_t)^m e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} e^{-\Sigma_t^*(\gamma_j - \gamma_i)} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_j)} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha^{2i} (\Sigma_t)^m \int_{\mathbb{R}_+^m} e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) + \dots \\ &\quad \dots + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha^{i+j} (\Sigma_t)^m \int_{\mathbb{R}_+^m} e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} e^{-\Sigma_t^*(\gamma_j - \gamma_i)} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_j)} dl_1 \dots dl_m p^{m-1} (1-p) \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha^{2i} (\Sigma_t)^m (2\Sigma_t^* - \Sigma_t)^{-i} (\Sigma_t)^{-m+i} p^{m-1} (1-p) + \dots \\ &\quad \dots + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha^{i+j} (\Sigma_t)^m (2\Sigma_t^* - \Sigma_t)^{-i} (\Sigma_t^*)^{-j+i} (\Sigma_t)^{-m+j} p^{m-1} (1-p) \\ &= \sum_{i=1}^m \varepsilon^i p^{m-1} (1-p) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \varepsilon^i p^{m-1} (1-p) \\ &= \sum_{i=1}^m \varepsilon^i p^{m-1} (1-p) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} (m-i) \varepsilon^i p^{m-1} (1-p) \\ &= \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} (1-\varepsilon^m) p^{m-1} (1-p) + \frac{2\varepsilon}{1-\varepsilon} \left(m - \frac{1-\varepsilon^m}{1-\varepsilon} \right) p^{m-1} (1-p) \end{aligned}$$

soit :

$$\overline{R_{m1}^{2cs}} = \frac{1}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \left[2m - \frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon} (1-\varepsilon^m) \right] p^{m-1} (1-p)$$

Or la série de terme générale $\{mq^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[$) est convergente, de somme $\frac{1}{(1-q)^2}$, donc la série de terme général $\overline{R_{m1}^{2cs}}$ l'est aussi si et seulement si :

$$p\varepsilon < 1$$

et dans ce cas, la série de terme général $\overline{R_{m1}^{2cs}}$ a pour somme :

$$\begin{aligned} \overline{R_1^{2cs}} &= \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R_{m1}^{2cs}} \\ &= \frac{\varepsilon}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{1-p}{1-\varepsilon} \sum_{m=1}^{\infty} \left[2m - \frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon} (1-\varepsilon^m) \right] p^{m-1} \\ &= \frac{\varepsilon}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{1-p}{1-\varepsilon} \left[\frac{2}{(1-p)^2} - \frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon} \left(\frac{1}{1-p} - \frac{\varepsilon}{1-p\varepsilon} \right) \right] \\ &= \frac{1}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \left(\frac{2}{1-p} - \frac{1+\varepsilon}{1-p\varepsilon} \right) \\ &= \frac{1}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{\varepsilon(1-p^2)}{(1-p)^2} \frac{1-p\varepsilon}{1-p\varepsilon} \\ &= \frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} \overline{R_1^{*2}} \end{aligned}$$

B.1.3.3 La variance

Finalement, on trouve que la variance vaut :

$$\sigma_1^{cs2} = \overline{R_1^{2cs}} - \overline{R_1^{cs}}^2 = \left[\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right] \overline{R_1^{*2}}$$

Remarque :

On montre que si on ne perturbe pas la système, c'est-à-dire si :

$$\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1$$

alors on retrouve les résultats du calcul initial :

- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \Sigma_t^* = \sum_{i=1}^N \eta_i \Sigma_t^k = \sum_{i=1}^N \Sigma_t^k = \Sigma_t$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \alpha = \sum_{i=1}^N \eta_i q_i = \sum_{i=1}^N q_i = 1$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \varepsilon = \frac{\alpha^2}{2\alpha-1} = 1$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow p^* = \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^N \eta_i q_i p_i = \sum_{i=1}^N q_i p_i = p$

ce qui donne :

$$\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \begin{cases} \overline{R_1^{cs}} &= \frac{1}{\Sigma_a} = \overline{R_1} \\ \sigma_1^{cs2} &= \left[\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right] \overline{R_1^{*2}} = \sigma_1^2 \end{cases}$$

B.1.3.4 Domaine de validité

Lors du calcul du moment d'ordre 2 perturbé, on a rencontré deux conditions :

$$\begin{cases} \alpha > \frac{1}{2} \\ p\varepsilon < 1 \end{cases}$$

On sait que nos formules sont exactes si et seulement si ces conditions sont vraies et que la variance perturbée est infinie dans le cas contraire. Mais pour mieux comprendre la seconde, nous allons la modifier pour nous ramener à un condition sur α , en supposant que la première est vérifiée :

$$p\varepsilon < 1 \Leftrightarrow \frac{p\alpha^2}{2\alpha - 1} < 1 \Leftrightarrow p\alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \quad (\text{car } \alpha > \frac{1}{2})$$

Il faut alors distinguer deux cas :

- si $p = 0$, alors :

$$p\alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \Leftrightarrow -2\alpha + 1 < 0 \Leftrightarrow \alpha \in \left] \frac{1}{2}; +\infty \right[$$

- si $p \neq 0$, alors :

$$p\alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \Leftrightarrow p \left(\alpha - \frac{1 - \sqrt{1-p}}{p} \right) \left(\alpha - \frac{1 + \sqrt{1-p}}{p} \right) < 0 \Leftrightarrow \alpha \in \left] \frac{1 - \sqrt{1-p}}{p}; \frac{1 + \sqrt{1-p}}{p} \right[$$

Or, pour $p \neq 0$, l'intervalle $\left] \frac{1 - \sqrt{1-p}}{p}; \frac{1 + \sqrt{1-p}}{p} \right[$ est inclus dans $\left] \frac{1}{2}; +\infty \right[$. Au final, nos deux conditions sont équivalentes à :

$$\alpha \in \mathcal{D}_1$$

avec :

$$\mathcal{D}_1 = \begin{cases} \left] \frac{1}{2}; +\infty \right[& \text{pour } p = 0 \\ \left] \frac{1 - \sqrt{1-p}}{p}; \frac{1 + \sqrt{1-p}}{p} \right[& \text{pour } p \neq 0 \end{cases}$$

B.1.3.5 Comparaison des variances

On a vu que la moyenne du score perturbé est toujours égale au score non-perturbé, mais ce n'est pas le cas de sa variance. On se propose donc ici de comparer la variance du score initiale (σ_1^2) à celle du score perturbé (σ_1^{cs2}) :

$$\forall \alpha \in \mathcal{D}_1, \left(\frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1} \right)^2 = \frac{1}{p} \left(\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right) \left(\frac{\bar{R}_1^*}{\bar{R}_1} \right)^2 = \frac{1-p^2}{p(2\alpha-1-p\alpha^2)} - \frac{1}{p\alpha^2}$$

Ce rapport de variance est une fonction de α dérivable sur \mathcal{D}_1 , de dérivée :

$$\frac{d}{d\alpha} \left[\left(\frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1} \right)^2 \right] = \frac{2(1-p^2)(p\alpha-1)}{p(2\alpha-1-p\alpha^2)^2} + \frac{2}{p\alpha^3}$$

qui vaut -2 en $\alpha = 1$. Et comme le rapport des variances vaut 1 en $\alpha = 1$, on sait qu'il existe au moins un intervalle compris dans $\left] \frac{1}{2}; +\infty \right[$ tel que $\left(\frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1} \right)^2 < 1$. On peut donc diminuer la variance lorsque l'on utilise la méthode des échantillons corrélés.

Toutefois, on peut aussi montrer que la variance perturbée reste toujours supérieure à la variance d'une autre simulation Monte Carlo qui serait effectuée à partir des conditions de la perturbation (c'est-à-dire σ_1^{*2}) :

$$\forall \alpha \in \mathcal{D}_1, \left(\frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1^*} \right)^2 = \frac{1}{p} \left(\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right) \left(\frac{\bar{R}_1^*}{\bar{R}_1^*} \right)^2 = \frac{1-p^2}{p} \frac{\alpha^2}{2\alpha-1-p\alpha^2} - \frac{1}{p}$$

Cette fonction de α est dérivable sur \mathcal{D}_1 , de dérivée :

$$\frac{d}{d\alpha} \left[\left(\frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1^*} \right)^2 \right] = \frac{2\alpha(1-p^2)(\alpha-1)}{p(2\alpha-1-p\alpha^2)^2}$$

Comme cette dérivée ne s'annule qu'en $\alpha = 1$, le minimum du rapport de variance $\left(\frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1^*} \right)^2$ est atteint en $\alpha = 1$. La variance perturbée est donc toujours supérieure à celle d'une simulation faite dans les conditions de la perturbation.

De plus, on remarque aussi que le rapport des erreurs statistiques relatives (entre les simulations initiale et perturbée) est égal à la racine du rapport de variance précédent :

$$\frac{\sigma_1^{cs}/\overline{R}_1^{cs}}{\sigma_1/\overline{R}_1} = \sqrt{\frac{1}{p} \left(\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right)} = \frac{\sigma_1^{cs}}{\sigma_1^*}$$

L'erreur statistique relative perturbée est donc toujours supérieur à l'erreur statistique relative non-perturbée.

B.2 Calculs à N isotopes

B.2.1 Résolution du problème initial

B.2.1.1 Le moment d'ordre 1

Comme $\Sigma_t > 0$, l'intégrale \overline{R}_{mN} existe et vaut :

$$\begin{aligned} \overline{R}_{mN} &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{i=1}^m \omega_N^i \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{m}{\Sigma_t} \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{m}{\Sigma_t} \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{m}{\Sigma_t} \left[\prod_{k=1}^{m-1} \sum_{iso(k)=1}^N q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \sum_{iso(m)=1}^N q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{m}{\Sigma_t} p^{m-1} (1 - p) \end{aligned}$$

Or la série de terme général $\{mq^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[$) est convergente, de somme $\frac{1}{(1-q)^2}$, donc la série de terme général \overline{R}_{mN} l'est aussi, de somme :

$$\overline{R}_N = \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{mN} = \frac{1-p}{\Sigma_t} \sum_{m=1}^{\infty} mp^{m-1} = \frac{1}{\Sigma_a}$$

B.2.1.2 Le moment d'ordre 2

De même, l'intégrale \overline{R}_{mN}^2 existe et vaut :

$$\begin{aligned} \overline{R}_{mN}^2 &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \left(\frac{1}{\Sigma_t} \sum_{i=1}^m \omega_N^i \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{m^2}{(\Sigma_t)^2} \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{m^2}{(\Sigma_t)^2} p^{m-1} (1 - p) \end{aligned}$$

Or la série de terme général $\{m^2 q^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[$) est convergente, de somme $\frac{1+q}{(1-q)^3}$, donc la série de terme général \overline{R}_{mN}^2 l'est aussi, de somme :

$$\overline{R}_N^2 = \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{mN}^2 = \frac{1-p}{(\Sigma_t)^2} \sum_{m=1}^{\infty} m^2 p^{m-1} = (1+p) \overline{R}_N^2$$

B.2.1.3 La variance

Finalement, on trouve que la variance vaut :

$$\sigma_N^2 = \overline{R^2}_N - \overline{R}_N^2 = p\overline{R}_N^2$$

B.2.2 Résolution du problème perturbé

B.2.2.1 Le moment d'ordre 1

Soit une trace $\hat{\gamma}_m$ quelconque, on a :

$$\begin{aligned} R_N^{cs}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) &= \left(\frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \omega_N^{i,cs} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \left(\sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t^* \gamma_i} e^{-\Sigma_t (\gamma_m - \gamma_i)} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \end{aligned}$$

Et comme $\Sigma_t > 0$ et $\Sigma_t^* > 0$, l'intégrale \overline{R}_{mN}^{cs} existe et vaut³ :

$$\begin{aligned} \overline{R}_{mN}^{cs}(\Sigma_t^*) &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t^* \gamma_i} e^{-\Sigma_t (\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m \dots \\ &\quad \dots \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha (\Sigma_t)^m \int_{\mathbb{R}_+^m} e^{-\Sigma_t^* \gamma_i} e^{-\Sigma_t (\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m \dots \\ &\quad \dots \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha (\Sigma_t)^m (\Sigma_t^*)^{-i} (\Sigma_t)^{-m+i} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^m \alpha^{-i+1} \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=i+1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha^{-i+1} \left[\prod_{k=1}^{i-1} \sum_{iso(k)=1}^N \eta_{iso(k)} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=i}^{m-1} \sum_{iso(k)=1}^N q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \sum_{iso(m)=1}^N q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha^{-i+1} \left[\prod_{k=1}^{i-1} \alpha p^* \right] \left[\prod_{k=i}^{m-1} p \right] (1 - p) \end{aligned}$$

3. On rappelle que $\left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right]$ est une contraction de $\sum_{iso(1)=1}^N \sum_{iso(2)=1}^N \dots \sum_{iso(m)=1}^N$

$$\begin{aligned}
\overline{R}_{mN}^{cs}(\Sigma_t^*) &= \sum_{i=1}^m \alpha^{-i+1} (\alpha p^*)^{i-1} p^{m-i} (1-p) \\
&= \sum_{i=1}^m \left(\frac{p^*}{p}\right)^{i-1} p^{m-1} (1-p) \\
&= \frac{1 - \left(\frac{p^*}{p}\right)^m}{1 - \frac{p^*}{p}} p^{m-1} (1-p) \frac{1-p}{p-p^*} (p^m - p^{*m}) \\
&= \frac{1-p}{p-p^*} (p^m - p^{*m})
\end{aligned}$$

Or la série de terme général $\{q^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[)$ est convergente, de somme $\frac{1}{1-q}$, donc la série de terme général \overline{R}_{mN}^{cs} l'est aussi, de somme :

$$\begin{aligned}
\overline{R}_N^{cs}(\Sigma_t^*) &= \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R}_{mN}^{cs}(\Sigma_t^*) \\
&= \frac{1-p}{p-p^*} \left(p \sum_{m=1}^{\infty} p^{m-1} - p^* \sum_{m=1}^{\infty} p^{*m-1} \right) \\
&= \frac{1-p}{p-p^*} \left(\frac{p}{1-p} - \frac{p^*}{1-p^*} \right) \\
&= \frac{1}{1-p^*}
\end{aligned}$$

On retrouve bien le résultat annoncé au chapitre 2 : le score perturbé converge vers le bon résultat :

$$\overline{R}_N^{cs} = \frac{1}{\Sigma_a^*} = \overline{R}_N^*$$

B.2.2.2 Le moment d'ordre 2

Soit une trace $\hat{\gamma}_m$ quelconque, on a :

$$\begin{aligned}
R_N^{cs2}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) &= \left(\frac{1}{\Sigma_t^*} \sum_{i=1}^m \omega_N^{i,cs} \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= \frac{1}{(\Sigma_t^*)^2} \left(\sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} \right)^2 (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\quad \dots q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)})
\end{aligned}$$

et avec la décomposition suivante :

$$\left(\sum_{i=1}^m a_i \right)^2 = \sum_{i=1}^m a_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m a_i a_j$$

on trouve :

$$\begin{aligned}
R_N^{cs2}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) (\Sigma_t^*)^2 &= \left(\sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)}^2 \right] \alpha^2 e^{-2(\Sigma_t^* - \Sigma_t) \gamma_i} \right) (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\quad \dots q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) + 2 \left(\sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=1}^{j-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha e^{-(\Sigma_t^* - \Sigma_t)(\gamma_i + \gamma_j)} \right) \dots \\
&\quad \dots (\Sigma_t)^m e^{-\Sigma_t \gamma_m} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_N^{cs^2}(\hat{\gamma}_m) p(\hat{\gamma}_m) (\Sigma_t^*)^2 &= \sum_{i=1}^m \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)}^2 \right] \alpha^2 (\Sigma_t)^m e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_i)} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\dots q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)}^2 \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha (\Sigma_t)^m \dots \\
&\dots e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_j - \gamma_i)} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_j)} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)})
\end{aligned}$$

Comme $\Sigma_t > 0$ et $\Sigma_t^* > 0$, l'intégrale $\overline{R_{mN}^{cs}}$ existe si et seulement si $2\Sigma_t^* - \Sigma_t > 0$, c'est-à-dire si et seulement si $\alpha > \frac{1}{2}$. Et dans ce cas, cette intégrale vaut :

$$\overline{R_{mN}^{cs}} = A_{m,N} + B_{m,N}$$

avec :

$$\begin{aligned}
A_{m,N}(\Sigma_t^*)^2 &= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \sum_{i=1}^m \alpha^2 \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)}^2 \right] (\Sigma_t)^m e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m \dots \\
&\dots \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^m \alpha^2 \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)}^2 \right] (\Sigma_t)^m \int_{\mathbb{R}_+^m} e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_i} e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_i)} dl_1 \dots dl_m \dots \\
&\dots \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^m \alpha^2 \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)}^2 \right] (\Sigma_t)^m (2\Sigma_t^* - \Sigma_t)^{-i} (\Sigma_t)^{-m+i} \dots \\
&\dots \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^m \alpha^2 \left(\frac{\varepsilon}{\alpha^2} \right)^i \left[\prod_{k=1}^{i-1} \eta_{iso(k)}^2 q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=i}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= \sum_{i=1}^m \alpha^2 \left(\frac{\varepsilon}{\alpha^2} \right)^i \left[\prod_{k=1}^{i-1} \sum_{iso(k)=1}^N \eta_{iso(k)}^2 q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=i}^{m-1} \sum_{iso(k)=1}^N q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\dots \sum_{iso(m)=1}^N q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= \sum_{i=1}^m \alpha^2 \left(\frac{\varepsilon}{\alpha^2} \right)^i \left[\prod_{k=1}^{i-1} a \alpha^2 p \right] \left[\prod_{k=i}^{m-1} p \right] (1 - p) \\
&= \sum_{i=1}^m \varepsilon (a\varepsilon)^{i-1} p^{m-1} (1 - p) \\
&= \varepsilon \frac{1 - (a\varepsilon)^m}{1 - a\varepsilon} p^{m-1} (1 - p) \\
&= \frac{\varepsilon}{1 - a\varepsilon} \left(p^{m-1} - a\varepsilon (ap\varepsilon)^{m-1} \right) (1 - p)
\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
B_{m,N}(\Sigma_t^*)^2 &= 2 \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \int_{\mathbb{R}_+^m} \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)}^2 \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha(\Sigma_t)^m e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_i} e^{-\Sigma_t^*(\gamma_j - \gamma_i)} \dots \\
&\quad \dots e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_j)} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= 2 \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)}^2 \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha(\Sigma_t)^m \int_{\mathbb{R}_+^m} e^{-(2\Sigma_t^* - \Sigma_t)\gamma_i} e^{-\Sigma_t^*(\gamma_j - \gamma_i)} \dots \\
&\quad \dots e^{-\Sigma_t(\gamma_m - \gamma_j)} dl_1 \dots dl_m \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= 2 \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)}^2 \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha(\Sigma_t)^m (2\Sigma_t^* - \Sigma_t)^{-i} (\Sigma_t^*)^{-j+i} \dots \\
&\quad \dots (\Sigma_t)^{-m+j} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= 2 \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)}^2 \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \eta_{iso(k)} \right] \alpha \left(\frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^i \alpha^{-j} \left[\prod_{k=1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\quad \dots q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= 2 \left[\prod_{k=1}^m \sum_{iso(k)=1}^N \right] \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha \left(\frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^i \alpha^{-j} \left[\prod_{k=1}^i \eta_{iso(k)}^2 q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \eta_{iso(k)} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\quad \dots \left[\prod_{k=j+1}^{m-1} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha \left(\frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^i \alpha^{-j} \left[\prod_{k=1}^i \sum_{iso(k)=1}^N \eta_{iso(k)}^2 q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \sum_{iso(k)=1}^N \eta_{iso(k)} q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \dots \\
&\quad \dots \left[\prod_{k=j}^{m-1} \sum_{iso(k)=1}^N q_{iso(k)} p_{iso(k)} \right] \sum_{iso(m)=1}^N q_{iso(m)} (1 - p_{iso(m)}) \\
&= 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \alpha \left(\frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^i \alpha^{-j} \left[\prod_{k=1}^i a \alpha^2 p \right] \left[\prod_{k=i+1}^{j-1} \alpha p^* \right] \left[\prod_{k=j}^{m-1} p \right] (1 - p) \\
&= 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m (a\varepsilon)^i \left(\frac{p^*}{p} \right)^{j-i-1} p^{m-1} (1 - p) \\
&= 2 \sum_{i=1}^{m-1} (a\varepsilon)^i \frac{1 - \left(\frac{p^*}{p} \right)^{m-i}}{1 - \frac{p^*}{p}} p^{m-1} (1 - p) \\
&= 2 \frac{1-p}{p-p^*} \sum_{i=1}^{m-1} (a\varepsilon)^i \left(p^m - p^{*m} \left(\frac{p}{p^*} \right)^i \right) \\
&= 2 \frac{1-p}{p-p^*} \left(p^{m-1} \sum_{i=1}^{m-1} p (a\varepsilon)^i - p^{*m-1} \sum_{i=1}^{m-1} p^* \left(\frac{ap\varepsilon}{p^*} \right)^i \right) \\
&= 2 \frac{1-p}{p-p^*} \left(\frac{ap\varepsilon}{1-a\varepsilon} \left(p^{m-1} - (ap\varepsilon)^{m-1} \right) - \frac{app^*\varepsilon}{p^* - ap\varepsilon} \left(p^{*m-1} - (ap\varepsilon)^{m-1} \right) \right)
\end{aligned}$$

donc on trouve :

$$\begin{aligned} \overline{R_{mN}^{cs}} &= \frac{1}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{\varepsilon(1-p)}{1-a\varepsilon} \left(p^{m-1} - a\varepsilon (ap\varepsilon)^{m-1} \right) + \dots \\ &\dots + \frac{2}{(\Sigma_t^*)^2} \frac{1-p}{p-p^*} \left(\frac{ap\varepsilon}{1-a\varepsilon} \left(p^{m-1} - (ap\varepsilon)^{m-1} \right) - \frac{app^*\varepsilon}{p^*-ap\varepsilon} \left(p^{*m-1} - (ap\varepsilon)^{m-1} \right) \right) \end{aligned}$$

Or la série de terme général $\{q^{m-1}\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ (avec $q \in [0; 1[)$ est convergente, de somme $\frac{1}{1-q}$, donc, de manière analogue au calcul de $\overline{R_{mN}^{cs}}$, on trouve que la série de terme général $\overline{R_{mN}^{cs}}$ est convergente si et seulement si :

$$ap\varepsilon < 1$$

et dans ce cas, la série de terme général $\overline{R_{mN}^{cs}}$ a pour somme :

$$\begin{aligned} \overline{R_N^{cs}} (\Sigma_t^*)^2 &= \sum_{m=1}^{\infty} \overline{R_{mN}^{cs}} (\Sigma_t^*)^2 \\ &= \frac{\varepsilon(1-p)}{1-a\varepsilon} \left(\sum_{m=1}^{\infty} p^{m-1} - a\varepsilon \sum_{m=1}^{\infty} (ap\varepsilon)^{m-1} \right) + 2 \frac{1-p}{p-p^*} \dots \\ &\dots \left(\frac{ap\varepsilon}{1-a\varepsilon} \left(\sum_{m=1}^{\infty} p^{m-1} - \sum_{m=1}^{\infty} (ap\varepsilon)^{m-1} \right) - \frac{app^*\varepsilon}{p^*-ap\varepsilon} \left(\sum_{m=1}^{\infty} p^{*m-1} - \sum_{m=1}^{\infty} (ap\varepsilon)^{m-1} \right) \right) \\ &= \frac{\varepsilon(1-p)}{1-a\varepsilon} \left(\frac{1}{1-p} - \frac{a\varepsilon}{1-ap\varepsilon} \right) + \dots \\ &\dots + 2 \frac{1-p}{p-p^*} \left(\frac{ap\varepsilon}{1-a\varepsilon} \left(\frac{1}{1-p} - \frac{1}{1-ap\varepsilon} \right) - \frac{app^*\varepsilon}{p^*-ap\varepsilon} \left(\frac{1}{1-p^*} - \frac{1}{1-ap\varepsilon} \right) \right) \\ &= \frac{\varepsilon}{1-ap\varepsilon} + \frac{2ap\varepsilon}{(1-ap\varepsilon)(1-p^*)} \\ &= \frac{\varepsilon(1+2ap-p^*)}{(1-ap\varepsilon)(1-p^*)} \\ &= \frac{\varepsilon(1+2ap-p^*)(1-p^*)}{(1-ap\varepsilon)} \overline{R_N^{*2}} (\Sigma_t^*)^2 \end{aligned}$$

B.2.2.3 La variance

Finalement, on trouve que la variance vaut :

$$\sigma_N^{cs2} = \overline{R_N^{cs}} - \overline{S_N^{cs}}^2 = \left[\frac{\varepsilon(1+2ap-p^*)(1-p^*)}{(1-ap\varepsilon)} - 1 \right] \overline{R_N^{*2}}$$

Remarque :

On montre que si on ne perturbe pas la système, c'est-à-dire si :

$$\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1$$

alors on retrouve les résultats du calcul initial :

- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \Sigma_t^* = \sum_{i=1}^N \eta_i \Sigma_t^i = \sum_{i=1}^N \Sigma_t^i = \Sigma_t$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \alpha = \sum_{i=1}^N \eta_i q_i = \sum_{i=1}^N q_i = 1$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow a = \frac{1}{\alpha^2 p} \sum_{i=1}^N \eta_i^2 q_i p_i = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^N q_i p_i = 1$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \varepsilon = \frac{\alpha^2}{2\alpha-1} = 1$
- $\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow p^* = \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^N \eta_i q_i p_i = \sum_{i=1}^N q_i p_i = p$

ce qui donne :

$$\forall k \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_k = 1 \Rightarrow \begin{cases} \overline{R_N^{cs}} &= \frac{1}{\Sigma_a} &= \overline{R_N} \\ \sigma_N^{cs2} &= \left[\frac{\varepsilon(1-p^2)}{1-p\varepsilon} - 1 \right] \overline{R_N^{*2}} &= \sigma_N^2 \end{cases}$$

B.2.2.4 Domaine de validité

Lors du calcul du moment d'ordre 2 perturbé, on a rencontré deux conditions :

$$\begin{cases} \alpha > \frac{1}{2} \\ ap\varepsilon < 1 \end{cases}$$

On sait que nos formules sont exactes si et seulement si ces conditions sont vraies et que la variance perturbée est infinie dans le cas contraire. Mais pour mieux comprendre la seconde, nous allons la modifier pour nous ramener à une condition sur α , en supposant que la première soit vérifiée :

$$ap\varepsilon < 1 \Leftrightarrow \frac{ap\alpha^2}{2\alpha - 1} < 1 \Leftrightarrow ap\alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \quad (\text{car } \alpha > \frac{1}{2})$$

Il faut alors distinguer deux cas :

- si $ap = 0$, alors :

$$ap\alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \Leftrightarrow -2\alpha + 1 < 0 \Leftrightarrow \alpha \in \left] \frac{1}{2}; +\infty \right[$$

- si $ap \neq 0$, alors :

$$ap\alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \Leftrightarrow p \left(\alpha - \frac{1 - \sqrt{1 - ap}}{ap} \right) \left(\alpha - \frac{1 + \sqrt{1 - ap}}{ap} \right) < 0 \Leftrightarrow \alpha \in \left] \frac{1 - \sqrt{1 - ap}}{ap}; \frac{1 + \sqrt{1 - ap}}{ap} \right[$$

Or, pour $ap \neq 0$, l'intervalle $\left] \frac{1 - \sqrt{1 - ap}}{ap}; \frac{1 + \sqrt{1 - ap}}{ap} \right[$ est inclus dans $\left] \frac{1}{2}; +\infty \right[$, donc nos deux conditions sont équivalentes à :

$$\alpha \in \mathcal{D}_N$$

avec :

$$\mathcal{D}_N = \begin{cases} \left] \frac{1}{2}; +\infty \right[& \text{pour } ap = 0 \\ \left] \frac{1 - \sqrt{1 - ap}}{ap}; \frac{1 + \sqrt{1 - ap}}{ap} \right[& \text{pour } ap \neq 0 \end{cases}$$

Mais ici, contrairement au cas $N = 1$, le domaine de validité \mathcal{D}_N dépend directement de l'amplitude des perturbations (à travers le terme a) et pas uniquement des caractéristiques du milieu.

Remarque :

On peut aussi trouver un intervalle pour chaque isotope qui ne dépend pas de a :

$$\begin{aligned} ap\varepsilon < 1 &\Leftrightarrow ap \frac{\alpha^2}{2\alpha - 1} < 1 \\ &\Leftrightarrow \alpha p \alpha^2 - 2\alpha + 1 < 0 \\ &\Leftrightarrow \sum_{i=1}^N \eta_i^2 q_i p_i - 2\eta_i q_i + q_i < 0 \\ &\Leftrightarrow \sum_{i=1}^N q_i (\eta_i^2 p_i - 2\eta_i + 1) < 0 \\ &\Leftrightarrow \sum_{i=1}^N q_i p_i \left(\eta_i - \frac{1 - \sqrt{1 - p_i}}{p_i} \right) \left(\eta_i - \frac{1 + \sqrt{1 - p_i}}{p_i} \right) < 0 \\ &\Leftrightarrow \forall i \in \llbracket 1; N \rrbracket, \eta_i \in \left] \frac{1 - \sqrt{1 - p_i}}{p_i}; \frac{1 + \sqrt{1 - p_i}}{p_i} \right[\end{aligned}$$

Le domaine ainsi défini ne dépend pas de l'amplitude des perturbations, mais il est aussi moins étendu que le domaine de validité \mathcal{D}_N .

B.2.2.5 Cas particulier : $N = 2$

Dans le cas où l'on a que deux isotopes, on trouve :

$$ap\varepsilon < 1 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N \eta_i^2 q_i p_i - 2 \sum_{i=1}^N \eta_i q_i + 1 < 0 \Leftrightarrow \eta_2^2 q_2 p_2 - 2\eta_2 q_2 + 1 + \eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 < 0 \quad (\text{B.6})$$

Et comme $q_2 p_2 > 0$, cela revient à résoudre l'équation (d'inconnue η_2) suivante :

$$\eta_2^2 q_2 p_2 - 2\eta_2 q_2 + \eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1 = 0$$

et à garder toutes les valeurs (de η_2) qui se trouvent entre les solutions de cette équation. Or, cette équation admet deux solutions si et seulement si :

$$(2q_2)^2 - 4q_2 p_2 (\eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1) > 0$$

c'est-à-dire :

$$\eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1 - \frac{q_2}{p_2} < 0 \quad (\text{B.7})$$

De même, cela nous mène à résoudre l'équation (d'inconnue η_1) suivante :

$$\eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1 - \frac{q_2}{p_2} = 0$$

qui admet deux solutions si et seulement si :

$$(2q_1)^2 - 4q_1 p_1 \left(1 - \frac{q_2}{p_2}\right) > 0$$

c'est-à-dire :

$$\frac{q_1}{p_1} + \frac{q_2}{p_2} > 1$$

Or $p_{1,2} < 1$ et $q_1 + q_2 = 1$, donc la relation précédente est toujours vraie. On peut alors établir les solutions de (B.7) :

$$\begin{aligned} & \eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1 - \frac{q_2}{p_2} < 0 \\ & \Leftrightarrow \left(\eta_1 - \frac{2q_1 - \sqrt{(2q_1)^2 - 4q_1 p_1 \left(1 - \frac{q_2}{p_2}\right)}}{2q_1 p_1} \right) \left(\eta_1 - \frac{2q_1 + \sqrt{(2q_1)^2 - 4q_1 p_1 \left(1 - \frac{q_2}{p_2}\right)}}{2q_1 p_1} \right) < 0 \\ & \Leftrightarrow \left(\eta_1 - \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{p_1}{q_1} \left(1 - \frac{q_2}{p_2}\right)}}{p_1} \right) \left(\eta_1 - \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{p_1}{q_1} \left(1 - \frac{q_2}{p_2}\right)}}{p_1} \right) < 0 \\ & \Leftrightarrow \eta_1 \in]\eta_1^-; \eta_1^+ [\end{aligned}$$

avec :

$$\eta_1^- = \frac{1 - \sqrt{1 - p_1 - \frac{q_2 p_1}{q_1} \left(1 - \frac{1}{p_2}\right)}}{p_1} \quad \text{et} \quad \eta_1^+ = \frac{1 + \sqrt{1 - p_1 - \frac{q_2 p_1}{q_1} \left(1 - \frac{1}{p_2}\right)}}{p_1}$$

Finalement, si (et seulement si) $\eta_1 \in]\eta_1^-; \eta_1^+[$, l'équation (B.6) admet des solutions :

$$\begin{aligned}
& \eta_2^2 q_2 p_2 - 2\eta_2 q_2 + \eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1 < 0 \\
& \Leftrightarrow \\
& \left(\eta_2 - \frac{2q_2 - \sqrt{(2q_2)^2 - 4q_2 p_2 (1 + \eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1)}}{2q_2 p_2} \right) \left(\eta_2 - \frac{2q_2 + \sqrt{(2q_2)^2 - 4q_2 p_2 (1 + \eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1)}}{2q_2 p_2} \right) < 0 \\
& \Leftrightarrow \\
& \left(\eta_2 - \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{p_2}{q_2} (\eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1)}}{p_2} \right) \left(\eta_2 - \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{p_2}{q_2} (\eta_1^2 q_1 p_1 - 2\eta_1 q_1 + 1)}}{p_2} \right) < 0 \\
& \Leftrightarrow \\
& \eta_2 \in]\eta_2^- (\eta_1); \eta_2^+ (\eta_1)[
\end{aligned}$$

avec :

$$\eta_2^- = \frac{1 - \sqrt{1 - p_2 - \frac{q_1 p_2}{q_2} (\eta_1^2 p_1 - 2\eta_1 + 1)}}{p_2} \quad \text{et} \quad \eta_2^+ = \frac{1 + \sqrt{1 - p_2 - \frac{q_1 p_2}{q_2} (\eta_1^2 p_1 - 2\eta_1 + 1)}}{p_2}$$

