THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS SUD

Spécialité

Physique

École Doctorale 534

Modélisation et Instrumentation en Physique, Énergies, Géosciences et Environnement

Thèse réalisée au

CEA Saclay DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Présentée par

Benjamin DEHAYE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS SUD

Sujet de la thèse :

Accélération de la convergence dans le code de transport de particules Monte-Carlo TRIPOLI-4® en criticité

Soutenue le 5 décembre 2014

Devant le jury composé de :

M.	Pierre Desesquelles	Président du jury
Mme.	Elsa Merle-Lucotte	Rapporteur
M.	Piero Ravetto	Rapporteur
M.	Cheikh M'Backé Diop	Directeur de thèse
M.	François-Xavier Hugot	Examinateur
M.	Christos Trakas	Examinateur
M.	Fausto Malvagi	Invité

Accélération de la convergence dans le code de transport de particules Monte-Carlo TRIPOLI-4® en criticité

Benjamin DEHAYE

23 décembre 2014

Résumé

Un certain nombre de domaines tels que les études de criticité requièrent le calcul de certaines grandeurs neutroniques d'intérêt. Il existe deux types de codes : les codes déterministes et les codes stochastiques. Ces derniers sont réputés simuler la physique de la configuration traitée de manière exacte. Toutefois, le temps de calcul nécessaire peut s'avérer très élevé.

Le travail réalisé dans cette thèse a pour but de bâtir une stratégie d'accélération de la convergence de la criticité dans le code de calcul TRIPOLI-4®. Dans ce but, une approche adjointe est préconisée et explorée. Pour ce faire, le flux adjoint est ainsi obtenu par une simulation Monte-Carlo directe sans passer par un code externe, grâce à l'utilisation de la matrice de fission. Ce flux adjoint est destiné à être utilisé pour construire la carte d'importance reprise pour accélérer la convergence de la simulation dans le cadre d'une mise en œuvre de la technique de la transformation exponentielle.

Mots clefs : Monte-Carlo, neutronique, criticité, convergence, réduction de variance

Abstract

Fields such as criticality studies need to compute some values of interest in neutron physics. Two kinds of codes may be used: deterministic ones and stochastic ones. The stochastic codes do not require approximation and are thus more exact. However, they may require a lot of time to converge with a sufficient precision.

The work carried out during this thesis aims to build an efficient convergence acceleration strategy in the TRIPOLI-4® Monte-Carlo code. An adjoint flux approach is recommended and explored to this end. The adjoint flux is then computed from a direct Monte-Carlo simulation without using external codes, thanks to the use of the fission matrix. This adjoint flux is intended to build the importance map used to accelerate the simulation convergence, in the frame of an implementation of the exponential transformation technique.

Keywords: Monte-Carlo, neutronic, criticality, convergence, variance reduction

Table des matières

Table des matières iii

Table des figures viii

Liste des tableaux xi

Remerciements xiii

Introduction xviii

I La méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons. Calcul critique et convergence. 1

1 Neutronique 5
- 1.1 Notations et quantités usuelles associées aux neutrons 6
- 1.2 Équation du transport des neutrons 6
  - 1.2.1 Cas général en régime stationnaire 7
  - 1.2.2 Cas de la criticité – Facteur de multiplication 9
- 1.3 Conclusion 10

2 Présentation générale de la méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons 11
- 2.1 Principes généraux 12
- 2.2 Décomposition en série de Neumann 14
- 2.3 Résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo 15
- 2.4 Lois de tirage des événements - construction du processus statistique 17
- 2.5 Notion de poids d'un neutron 22

2.6 Estimateurs de grandeurs physiques dans une simulation Monte-Carlo . . . 23
2.6.1 Estimateurs du flux . . . 23
2.6.2 Estimateur du courant neutronique . . . 24
2.6.3 Estimateur d'un taux de réaction . . . 24
2.6.4 Estimateurs du k_{eff} . . . 24
2.7 Le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® . . . 26
2.7.1 Présentation du code . . . 26
2.7.2 Parallélisme . . . 27
2.8 Conclusion . . . 27

3 Calcul critique **29**
3.1 La méthode de Monte-Carlo en neutronique . . . 30
3.2 Méthode de la puissance itérée . . . 30
3.3 Convergence et rapport de dominance . . . 32
3.4 Déroulement d'une simulation en mode critique . . . 33
3.4.1 Phase 1 : convergence des sources . . . 33
3.4.2 Phase 2 : convergence statistique . . . 35
3.5 Problématique de la convergence dans un calcul critique utilisant la méthode de l'itération de la puissance . . . 35
3.6 Tests de convergence . . . 39
3.6.1 Tests classiques . . . 39
3.6.2 Entropie . . . 40
3.6.3 Méthode du sandwich . . . 41
3.6.4 Ponts browniens . . . 42
3.6.5 Projection sur les vecteurs propres . . . 42
3.7 Conclusion . . . 42

4 Techniques d'accélération des simulations Monte-Carlo **45**
4.1 Généralités sur l'accélération d'un calcul Monte-Carlo . . . 46
4.1.1 Problématique . . . 46
4.1.2 Figure de mérite . . . 46
4.1.3 Simulations biaisées . . . 47
4.2 Techniques usuelles de réduction de la variance . . . 50
4.2.1 Roulette russe . . . 50
4.2.2 *Splitting* . . . 51
4.2.3 Capture implicite . . . 51
4.2.4 Collision forcée . . . 52
4.2.5 Transformation exponentielle . . . 53
4.2.6 Absorption continue . . . 54
4.2.7 Fenêtre de poids . . . 55
4.2.8 Échantillonnage stratifié . . . 56
4.3 Techniques d'accélération dans les codes Monte-Carlo en criticité 56
4.3.1 Méthode de Woodcock (δ-*tracking*) . . . 56

4.3.2 Méthode de Wielandt 58
4.3.3 Méthode de la *super histoire* 60
4.3.4 Matrice de fission 60
4.4 Conclusion 61

II Accélération de la convergence dans le code TRIPOLI-4® 63

5 Calcul théorique du k_{eff} en milieu homogène infini dans le cas monocinétique 67
5.1 Notations 68
5.2 Nombre de collisions 68
5.2.1 Nombre de collisions avant la première roulette russe . 68
5.2.2 Nombre de collisions au sein d'un « cycle » de roulette russe 69
5.3 Poids avant la roulette russe 69
5.3.1 Poids de déclenchement de la première roulette russe . 69
5.3.2 Poids de déclenchement des roulettes russes suivantes . 70
5.4 Nombre de roulettes russes 70
5.5 Poids de fission 71
5.5.1 Nombre de neutrons générés 71
5.5.2 Poids de fission généré avant la première roulette russe 72
5.5.3 Poids de fission généré au sein d'un cycle de roulette russe 73
5.5.4 Poids total des neutrons de fission 73
5.6 KSTEP 74
5.7 Temps de simulation t 74
5.8 *FoM* 75
5.9 Calcul de la distribution de sources au batch suivant 75
5.10 Exemple 75
5.11 Optimisation 77
5.12 Conclusion 78

6 Méthode de la matrice de fission 79
6.1 Présentation 80
6.2 Estimateur de TRIPOLI-4® 82
6.3 Étude comparative entre le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® et deux approches analytiques 82
6.3.1 Modèle de la diffusion 82
6.3.2 Transport approché 86
6.3.3 Exemple : configuration fissile sphérique 87
6.3.4 Conclusion 91
6.4 Obtention d'un écart-type 93

6.4.1 Problème de la convergence de la matrice de fission . . 93
6.4.2 *Jackknife* 94
6.4.3 URANIE 99
6.5 Accélération de la convergence 100
6.5.1 Sphère critique 100
6.5.2 Crayon combustible 107
6.5.3 Cœur de réacteur simplifié 112
6.6 Conclusion 117

7 Biaisage par carte d'importance 119
7.1 Transformation exponentielle avec source fixe de fission 120
7.1.1 Carte d'importance 120
7.1.2 Méthode de la transformation exponentielle 122
7.2 Calcul du flux adjoint à partir de la matrice de fission 123
7.2.1 Théorie 123
7.2.2 Exemple 125
7.2.3 Développements supplémentaires de la matrice de fission 129
7.3 Principe de mise en œuvre 130
7.3.1 Utilisation d'une carte d'importance dans le cas d'une simulation à source fixe 130
7.3.2 Stratégies de biaisage 133
7.4 Conclusion 142

Conclusion et perspectives 143

Bibliographie 148

Annexes 157

A Introduction à la méthode de Monte-Carlo 161
A.1 Nombres aléatoires et rappels de statistiques 162
A.2 Échantillonnage 164
A.3 Génération de nombres aléatoires 165
A.4 Intervalle de confiance 166

B Construction du jeu à variance nulle 169
B.1 Calcul théorique de l'adjoint 170
B.1.1 Définitions et notations 170
B.1.2 Rappels mathématiques sur les opérateurs adjoints . . 171
B.1.3 Réponse d'un détecteur 171
B.1.4 Densités adjointes 172
B.2 Biaisage par l'adjoint 175

B.2.1 Biaisage des noyaux et des densités . . . 175
B.2.2 Fonction d'importance idéale . . . 177
B.2.3 Biaisage de l'estimateur collision . . . 177
B.2.4 Biaisage des sources . . . 179
B.3 Variance de l'estimateur collision . . . 180
B.3.1 Notations et définitions . . . 180
B.3.2 Moments statistiques . . . 181
B.4 Schéma de calcul pour le jeu à variance nulle en criticité . . . 183
B.4.1 Notations et définitions . . . 183
B.4.2 Poids de biaisage . . . 184

C Présentation de quelques codes de simulation Monte-Carlo en criticité 187
C.1 MCNP . . . 188
C.2 MONK . . . 188
C.3 SCALE/KENO-VI . . . 188
C.4 MERCURY . . . 188
C.5 MVP . . . 189
C.6 MCU . . . 189
C.7 VIM . . . 189
C.8 SERPENT . . . 189
C.9 MORET . . . 189

D Biaisage et codes de simulation 191
D.1 Résumé des techniques . . . 192
D.2 Présence et implémentation des techniques dans les codes de simulation Monte-Carlo en criticité . . . 193
D.2.1 MCNP . . . 193
D.2.2 MONK . . . 194
D.2.3 SCALE . . . 195
D.2.4 MORET . . . 195
D.2.5 TRIPOLI-4® . . . 195
D.2.6 Autres codes . . . 195

E Calcul du coefficient de biaisage k pour la méthode de la transformation exponentielle avec utilisation d'une carte d'importance 197
E.1 Équation de Placzek . . . 198
E.1.1 Hypothèses . . . 198
E.1.2 Résolution . . . 198
E.1.3 Discussion sur k . . . 200
E.1.4 Cas multi-groupe . . . 200
E.2 Calcul des coefficients de Placzek . . . 201
E.2.1 État originel du code . . . 201

E.2.2 Approximation de Weinberg et Wigner 201
E.2.3 Approximation de Case, De Hoffmann et Placzek . . . 202
E.2.4 Méthode de Newton 202
E.2.5 Résultats 203

F Matrice de vacance **207**

Table des figures

1 Schéma de principe d'un réacteur nucléaire à eau sous pression montrant où se situe le cœur contenant le combustible nucléaire à base d'oxyde d'uranium [CEA]. xxi
2 Photographie d'une cuve (en acier) de réacteur nucléaire [SFE]. xxii
3 Photographie d'un cœur de réacteur nucléaire [CEA]. On distingue le motif géométrique des assemblages combustibles. . . xxii
4 Schéma d'un assemblage combustible [CEA]. xxiv

2.1 Illustration de la décomposition en série de Neumann. (n) : numéro d'ordre de la collision ou nombre de collisions subies par un neutron issu de la région source avant d'arriver dans la zone résultat. 15
2.2 Schéma de la vie d'un neutron. 20
2.3 Principe de la simulation de l'histoire d'un neutron par la méthode de Monte-Carlo. 21

3.1 Principe d'une simulation Monte-Carlo en criticité pour calculer le k_{eff}. σ : écart-type sur le k_{eff}. σ_0 : écart-type cible. . . 31
3.2 Étude d'une configuration critique : sphère d'uranium. Évolution des valeurs du k_{eff} (estimateur KTRACK) en fonction du numéro du batch (les points bleus correspondent à l'estimation du k_{eff} du batch en cours et les rouges au k_{eff} moyen). 34

4.1 Schéma de la méthode de la collision forcée. 53
4.2 Schéma de principe de la méthode de la transformation exponentielle. $\vec{\Omega}_{\text{int}}$ représente la direction d'intérêt. 53

5.1 Recherche de la valeur optimale du seuil de la roulette russe vis-à-vis de la FoM à partir du modèle analytique du KSTEP en milieu infini. 78

6.1 Schéma de principe de la matrice de fission (discrétisation spatiale). 82
6.2 Visualisation de la configuration sphérique étudiée. 88
6.3 Premier vecteur propre. 91

6.4 Deuxième vecteur propre. 92
6.5 Cinquième vecteur propre. 93
6.6 Configuration du jeu de données sphérique critique pour le calcul des écarts-types. 97
6.7 Schéma de principe de la validation de la démarche du *jackknife*. 98
6.8 Configuration sphérique critique utilisée pour la comparaison de la convergence de l'estimateur K_{ij} aux autres estimateurs du code. 101
6.9 Convergence du k_{eff} moyen. 103
6.10 Erreur absolue commise sur le k_{eff} moyen 103
6.11 Convergence du k_{eff} batch à batch. 104
6.12 Erreur absolue commise sur le k_{eff} batch à batch. 104
6.13 Erreur absolue commise sur la distribution de sources moyenne. 105
6.14 Erreur absolue commise sur la distribution de sources batch à batch. 105
6.15 Comparaison de la convergence des différents estimateurs du k_{eff} pour la configuration sphérique. 107
6.16 Erreur absolue commise par les différents estimateurs du k_{eff} pour la configuration sphérique. 108
6.17 Erreur absolue commise par l'estimateur TRACK et la matrice de fission sur la distribution de sources pour la configuration sphérique. 109
6.18 Crayon combustible : visualisation du jeu de données. 109
6.19 Comparaison de la convergence des différents estimateurs du k_{eff} pour le crayon combustible. 110
6.20 Erreur absolue commise par les différents estimateurs du k_{eff} pour le crayon combustible. 111
6.21 Spectre de fission pour le crayon combustible. L'énergie E est exprimée en MeV. 112
6.22 Erreur maximale commise par l'estimateur spectre de fission et la matrice de fission. 113
6.23 Cœur de réacteur utilisé pour la comparaison de la convergence de l'estimateur K_{ij} aux autres estimateurs du code. Les volumes en bleu et en vert correspondent à de l'eau. Les volumes en rouges correspondent aux assemblages homogénéisés. 114
6.24 Comparaison de la convergence de l'estimateur TRACK et de l'estimateur KIJ pour le k_{eff} dans le cas du cœur simplifié. . . 115
6.25 Erreur absolue commise par les différents estimateurs du k_{eff} dans le cas du cœur simplifié. 116
6.26 Erreur maximale commise par les différents estimateurs de la distribution de sources dans le cas du cœur simplifié. 117

7.1 Cellule. 125

7.2 Flux adjoint en fonction de l'énergie. La référence Apollo 2.8 provient de [Lec13]. 127
7.3 Sections efficaces d'absorption et de fission de l'^{238}U exprimées en barns en fonction de l'énergie exprimée en eV. 128
7.4 Sections efficaces de production microscopique de l'^{238}U exprimées en barns en fonction de l'énergie exprimée en eV d'une cellule. Deux résonances, à 6 et 20 eV, sont reconnaissables. On remarque également la structure à deux bosses à haute énergie. 129
7.5 Comparaison des flux issus de la simulation de référence et de celle avec carte d'importance dans le mode à source fixe de TRIPOLI-4®. 131
7.6 Carte d'importance dans le cadre de la simulation à source fixe. Les zones en rouge correspondent aux mailles où l'importance tend vers zéro, celles en bleu foncé correspondent aux zones où l'importance est la plus élevée. 132
7.7 Flux COLL dans la cellule. 135
7.8 Écart-type absolu dans la cellule. 136
7.9 Écart-type relatif dans la cellule. 137
7.10 Écart-type relatif dans la cellule pour la simulation de référence et la simulation biaisée. 138
7.11 FoM dans la cellule pour la simulation de référence et la simulation biaisée. 139
7.12 Flux en énergie dans la cellule. 140
7.13 Écart-type relatif en énergie dans la cellule. 141
7.14 FoM dans la cellule. 142

B.1 Schéma du transport d'une particule. 170

Liste des tableaux

6.1 Valeurs propres. 90
6.2 Rapports de dominance. 90
6.3 Comparaison des résultats obtenus avec le *jackknife* pour la première valeur propre. 98
6.4 Écarts-types des autres modes que le fondamental obtenus par la méthode du *jackknife*. 99

D.1 Tableau récapitulatif des techniques de réduction de la variance. 192
D.2 Tableau récapitulatif des techniques d'accélération dans les codes Monte-Carlo en criticité. 193

E.1 Coefficients k^g et temps de calcul pour un matériau à quatre isotopes. 203
E.2 Coefficients k^g et temps de calcul pour un matériau à trente-six isotopes. 204

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier le CEA de m'avoir permis de réaliser une thèse au sein du SERMA (Service d'Étude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées).

Je tiens à exprimer plus particulièrement ma reconnaissance à François-Xavier Hugot et Cheikh M'Backé Diop d'avoir respectivement encadré et dirigé ma thèse.

Je remercie les rapporteurs, Madame Elsa Merle-Lucotte et Monsieur Piero Ravetto, d'avoir évaluer mon travail ainsi que les membres du jury : Monsieur Pierre Desesquelles et Monsieur Christos Trakas.

Un grand merci à Fausto Malvagi pour ses conseils très avisés et d'une manière générale au LTSD (Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe) : Éric, Émeric, Andrea, etc.

Je remercie également Sylvie Naury et Franck Gabriel, chefs successifs du LTSD de m'avoir accueilli au sein de leur laboratoire.

Je n'oublierai pas non plus les bon moments passés avec l'ensemble des permanents, doctorants et des stagiaires qui sont passés ou sont encore présents au SERMA : Jérôme, Laurent, Sébastien, Olga, Oriane, Lucile, Karim, Arthur, Xavier, Henri, Clélia...

Merci à ma famille et ma belle-famille de m'avoir encouragé au cours de ces longues années. Merci également d'être venus me soutenir le jour de la soutenance. Merci également à Julien et Idhir d'avoir fait le déplacement pour ce jour particulier.

Enfin, et pour terminer ces remerciements, je tiens à exprimer ma gratitude envers ma compagne, Charlotte, sans qui je pense les choses auraient été très différentes. Merci pour ton soutien, le temps que tu as passé à me relire et à m'encourager.

Introduction

Contexte

La conception et l'exploitation d'un réacteur nucléaire requièrent la connaissance de grandeurs physiques qui caractérisent le comportement des neutrons dans son cœur. Deux d'entre elles peuvent être citées d'emblée : la distribution de la source de neutrons produits par les réactions de fission en tout point du cœur et le facteur de multiplication des neutrons (noté k_{eff}). Ce facteur de multiplication des neutrons est un indicateur de l'état de criticité du cœur, directement lié à la réaction en chaîne :

- si $k_{\text{eff}} < 1$: le cœur est en état sous-critique ;
- si $k_{\text{eff}} = 1$: le cœur est à l'état critique, donc en équilibre ;
- si $k_{\text{eff}} > 1$: le cœur est surcritique, la multiplication des neutrons pouvant alors conduire à une excursion de puissance.

Les installations et opérations du cycle du combustible demandent également que des études de criticité (calcul du k_{eff} et analyse de sûreté) soient entreprises afin de s'assurer de la sous-criticité : fabrication du combustible nucléaire, transport, retraitement, stockage/entreposage...

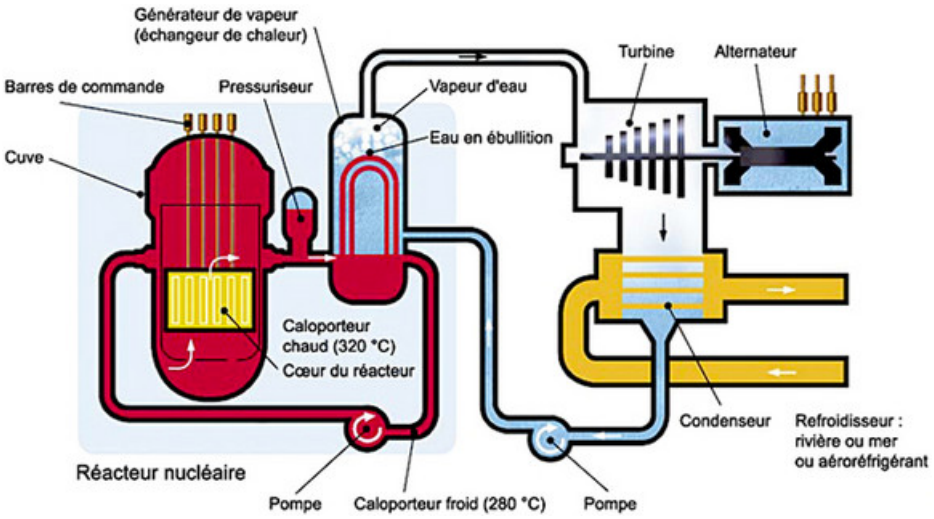


FIGURE 1 – Schéma de principe d'un réacteur nucléaire à eau sous pression montrant où se situe le cœur contenant le combustible nucléaire à base d'oxyde d'uranium [CEA].



FIGURE 2 – Photographie d'une cuve (en acier) de réacteur nucléaire [SFE].

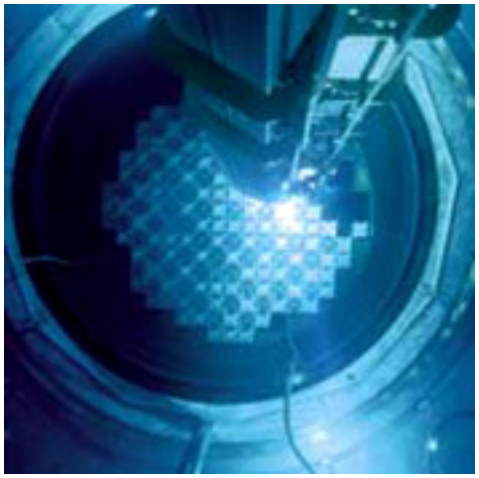


FIGURE 3 – Photographie d'un cœur de réacteur nucléaire [CEA]. On distingue le motif géométrique des assemblages combustibles.

Enjeux et objectifs

Un enjeu majeur associé à la connaissance du comportement des neutrons dans un système physique comportant de la matière fissile est celui de la sûreté de l'installation nucléaire concernée. Les systèmes nucléaires font aussi l'objet d'études d'optimisation qui se rattachent à un enjeu économique.

L'ensemble de ces études de physique des réacteurs nucléaires sont con-

duites à l'aide d'outils de calcul composés de bibliothèques de données physiques – les données nucléaires de base notamment (sections efficaces, constantes de décroissance radioactive)– et de logiciels de simulation numérique de la propagation des neutrons dans la matière, ainsi que de la transmutation de celle-ci sous l'effet des réactions nucléaires induites par les neutrons.

Pour répondre aux enjeux précités, les outils de calcul doivent non seulement être prédictifs (par exemple fournir une valeur du k_{eff} avec une incertitude maîtrisée, aussi raisonnablement petite possible), mais également performants en temps de calcul, satisfaisant ainsi des exigences industrielles.

L'étude du comportement des neutrons s'effectue en résolvant l'équation de Boltzmann ou équation du transport des neutrons. Deux voies de résolution existent : la voie déterministe et la voie probabiliste Monte-Carlo. Ces deux voies sont respectivement illustrées par les codes APOLLO2 et TRIPOLI-4® développés au CEA, et qui sont utilisés en particulier par les industriels AREVA et EDF.

La voie Monte-Carlo est considérée comme étant la voie de référence. En effet, les avantages de la méthode Monte-Carlo sont de traiter des géométries réelles tridimensionnelles et d'utiliser une représentation continue des sections efficaces des interactions neutron-matière en fonction de l'énergie (pas d'approximation multigroupe). Toutefois, l'inconvénient principal de cette méthode réside dans le temps de calcul nécessaire pour simuler un nombre statistiquement suffisant d'histoires de neutrons, en particulier dans les grands systèmes physiques comme les cœurs de réacteurs de puissance. Par exemple, pour le calcul d'un cœur REP [1] composé de 157 assemblages avec le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4®, pour une précision de quelques dizaines de pcm [2] sur le k_{eff} et une précision de quelques pourcents sur la puissance moyenne d'un assemblage, 48 heures de calcul ont été nécessaires sur 20 processeurs cadencés à 1 GHz.

Certaines applications requièrent une modélisation plus fine des cœurs. La discrétisation de l'exemple précédent s'arrête à l'assemblage. Or, un utilisateur peut souhaiter utiliser une modélisation à l'échelle du crayon voire celle de la pastille. À titre illustratif, les assemblages précédents sont constitués de 17×17 crayons (voir figure 4)... On conçoit donc aisément que plus la finesse de discrétisation augmente, plus le temps de calcul nécessaire pour obtenir la variance cible sur la grandeur physique d'intérêt est important.

C'est cette problématique d'optimisation du couple temps de calcul /

1. Réacteur à Eau sous Pression
2. pcm = pour cent mille

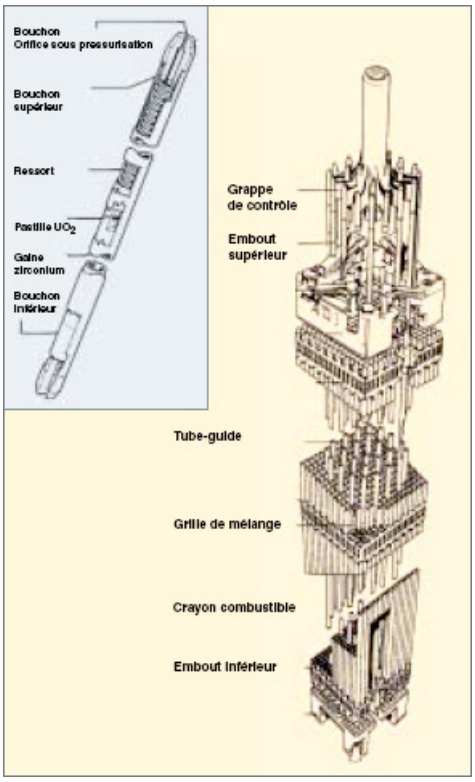


FIGURE 4 – Schéma d'un assemblage combustible [CEA].

variance dans un calcul critique Monte-Carlo – calcul du k_{eff} et distribution de la puissance – qui est au centre de cette thèse.

En termes mathématiques, le calcul critique de détermination du k_{eff} consiste à résoudre un problème à valeurs propres par la méthode de Monte-Carlo.

Mettant en œuvre la méthode de l'itération de la puissance, un calcul critique Monte-Carlo se décompose en deux parties itératives. La première vise à atteindre l'équilibre de la population des neutrons dans l'espace des phases à partir d'une source de neutrons initiale arbitraire (on dit aussi « atteindre la stationnarité ») et la deuxième à cumuler statistiquement les valeurs estimées du k_{eff} pour un nombre suffisant de lots (on dit aussi « batchs ») simulés de neutrons issus de la fission.

Le but de cette thèse est de bâtir une stratégie d'accélération de la convergence afin de calculer, entre autres, le k_{eff} et la distribution des sources de neutrons (ou distribution de puissance) dans le cœur.

L'approche privilégiée ici est d'utiliser la méthode dite « de la matrice de fission » pour calculer les valeurs propres du problème dès les premières étapes de la simulation. Nous chercherons ensuite à mettre en place des techniques de réduction de la variance en vue d'accélérer la convergence statistique de la seconde phase de nos calculs.

Plan

Le mémoire est scindé en deux parties. La première rappelle quelques-unes des notions de neutronique essentielles pour le travail présenté (chapitre 1), les principes de la méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons (chapitre 2), puis au cas de la criticité (chapitre 3) et enfin recense de manière synthétique les méthodes d'accélération usuelles mises en œuvre dans les calculs Monte-Carlo de criticité (chapitre 4).

La seconde partie du mémoire rassemble les principaux travaux réalisés dans le cadre de cette thèse, visant à implémenter dans le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® développé au CEA une méthode d'accélération efficace pour traiter des problèmes critiques. Un premier chapitre (chapitre 5) est consacré à une analyse approfondie des mécanismes de simulation au cours d'un batch d'un calcul critique. Un modèle analytique du calcul du k_{eff} en milieu infini dans le cas monocinétique est proposé afin d'étudier la distribution de sources de fission qui contribue directement à la variance de l'estimateur du k_{eff} étudié. Il est ensuite possible d'optimiser cette variance. Ce modèle analytique permet également de s'intéresser au mécanisme de contrôle de la population des neutrons issus de la fission au cours de la simulation de leur propagation dans le milieu fissile considéré. En effet, un tel mécanisme de contrôle est rendu nécessaire dans la pratique afin que la population de neutrons reste stable d'un lot de neutrons simulés au suivant (problématique de la renormalisation des sources de fission). Le chapitre suivant (chapitre 6) étudie la « méthode de la matrice de fission » à la fois comme technique d'obtention du k_{eff} et comme technique d'accélération de la convergence. On y propose une solution inédite, dans ce cadre, pour déterminer la variance sur le k_{eff}. En second lieu, on montre comment construire le flux adjoint du problème critique avec la méthode de la matrice de fission, dans la perspective d'accélérer la convergence y compris lorsque la stationnarité des sources est atteinte (chapitre 7).

La conclusion du mémoire fait un bilan des résultats obtenus et propose quelques pistes pour des travaux futurs intéressant cette délicate problématique de l'accélération d'un calcul Monte-Carlo en mode critique.

Première partie

La méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons. Calcul critique et convergence.

Introduction

Après quelques rappels sur l'équation du transport des neutrons et des grandeurs physiques qui y sont associées, nous rappelons les principes de la méthode de Monte-Carlo appliquée à sa résolution. La problématique de la convergence de cette méthode est ensuite présentée dans le cadre d'un calcul critique mettant en œuvre la méthode dite de l'itération de la puissance. Enfin, nous dressons un recensement des techniques de réduction de la variance et d'accélération de la convergence présentes dans les codes Monte-Carlo, en criticité.

Chapitre 1

Neutronique

Sommaire

1.1 Notations et quantités usuelles associées aux neutrons 6

1.2 Équation du transport des neutrons 6

1.2.1 Cas général en régime stationnaire 7

1.2.2 Cas de la criticité – Facteur de multiplication . . . 9

1.3 Conclusion 10

1.1 Notations et quantités usuelles associées aux neutrons

On notera, de manière usuelle, dans la thèse :
- $\vec{r}$ la position (usuellement en cm) ;
- E l'énergie (en eV, keV ou MeV) ;
- $\vec{v}$ le vecteur vitesse et v son module (usuellement en cm.s^{-1}) ;
- $\vec{\Omega}$ le vecteur direction (angle solide en stéradians (sr)) ;
- t le temps (en s) ;
- L l'opérateur de disparition par fuite et collision ;
- H l'opérateur de diffusion ;
- F l'opérateur de fission agissant sur les flux ;
- K l'opérateur de fission agissant sur les sources ;
- T l'opérateur de transport ;
- C l'opérateur de collision ;
- $\Psi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ le flux angulaire de neutrons (en cm^{-2}.MeV^{-1}.sr^{-1}.s^{-1}) ;
- $\psi\left(\vec{r},E\right)$ ou $\zeta\left(\vec{r},E\right)$ la densité de collision entrante (en cm^{-3}.MeV^{-1}.s^{-1}) ;
- $\phi\left(\vec{r},E\right)$ le flux de neutrons (en cm^{-2}.MeV^{-1}.s^{-1}) ;
- $J\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ le courant de neutrons (en cm^{-2}.MeV^{-1}.sr^{-1}.s^{-1}) ;
- $\chi\left(\vec{r},E,t\right)$ le densité d'émission (en cm^{-3}.MeV^{-1}.s^{-1}) ;
- $\chi_f\left(E,E'\right)$ le spectre d'émission (en MeV^{-1}) ;
- $\Sigma_X\left(\vec{r},E\right)$ la section efficace macroscopique pour l'interaction X (en cm^{-1}) :
  - $\Sigma_t \equiv \Sigma_t(\vec{r},E)$ est la section macroscopique totale ;
  - $\Sigma_s \equiv \Sigma_s(\vec{r},E' \rightarrow E,\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ est la section macroscopique totale de diffusion ;
  - $\Sigma_f \equiv \Sigma_f(\vec{r},E' \rightarrow E)$ est la section macroscopique de fission ;
- $\sigma_X\left(E\right)$ la section efficace microscopique pour l'interaction X (en barn (b)) ;
- $\vec{\nabla}$ le gradient ;
- $S\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ la source (en cm^{-3}.MeV^{-1}.sr^{-1}.s^{-1}) ;
- $A\left(\vec{r},E\right)$ les absorptions (en cm^{-3}.MeV^{-1}.s^{-1}) ;
- k_{eff} le facteur de multiplication effectif de neutrons.

1.2 Équation du transport des neutrons

On présente dans cette section l'équation de Boltzmann ou équation du transport des neutrons, sous sa forme intégro-différentielle puis sous sa forme intégrale en régime stationnaire. L'équation de Boltzmann est introduite et présentée par de nombreux auteurs [WW58, Bus63, BR85, MDH12].

1.2.1 Cas général en régime stationnaire

Forme intégro-différentielle

L'équation de Boltzmann, sous sa forme intégro-différentielle établit un bilan des neutrons au point $\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)$ de l'espace des phases à un instant quelconque par unité de temps :

$$L\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = H\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) + F\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) + Q\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right), \tag{1.1}$$

avec :

- $L\Psi = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) + \Sigma_t\left(\vec{r}, E\right)\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)$: disparitions par fuite et réactions nucléaires ;
- $H\Psi = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s\left(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right)\Psi\left(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'\right)$: arrivées par réactions de diffusion et (n,xn) ;
- $F\Psi = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty dE' \Sigma_f\left(\vec{r}, E' \to E\right) \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Psi\left(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'\right)$: source de neutrons par fission.

$Q(\vec{r},E,\vec{\Omega})$ est ici une source externe de neutrons. Il est démontrable que cette équation, pour des conditions données, admet une solution unique à laquelle satisfait le flux angulaire.

Nous verrons que cette équation intégro-différentielle sera aussi utilisée à plusieurs reprises parallèlement à la forme intégrale présentée ci-après et sur laquelle s'appuie la méthode Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons.

Forme intégrale

Le flux angulaire s'écrit directement comme la somme de deux contributions : la première, le flux dû aux particules directement issues de la source et n'ayant pas encore subi de collision, la seconde, le flux dû aux particules ayant déjà subi une diffusion [BR85]. On a alors

$$\begin{aligned}\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) &= \int_0^\infty e^{-\int_0^s \Sigma_t\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega}, E\right)ds'} S\left(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}\right) ds \\ &+ \int_0^\infty e^{-\int_0^s \Sigma_t\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega}, E\right)ds'} \\ &\times \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s\left(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right)\Psi\left(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}'\right) d\vec{\Omega}' dE' ds.\end{aligned} \tag{1.2}$$

Cette équation peut être réécrite en introduisant la densité de collision entrante ψ, comme inconnue, définie comme

$$\psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = \Sigma_t\left(\vec{r}, E\right)\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right). \tag{1.3}$$

L'introduction de la densité de collision conduit à une formulation de l'équation du transport particulièrement appropriée pour simuler la propagation des neutrons par la méthode de Monte-Carlo. Ce changement de variable conduit à la définition de deux opérateurs :

– l'opérateur de transition $\mathscr{T}$:

$$\mathscr{T} = \Sigma_t\left(\vec{r}, E\right) \int_0^\infty e^{-\int_0^s \Sigma_t\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega}, E\right) ds'} ds \tag{1.4}$$

et en posant $\vec{r'} = \vec{r} - s\vec{\Omega}$, on note le noyau de cet opérateur :

$$T = T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E\right) d\vec{r} = \Sigma_t\left(\vec{r}, E\right) e^{\int_{\vec{r'}\to\vec{r}} \Sigma_t\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega}\right) ds'} ds. \tag{1.5}$$

Cet opérateur correspond au déplacement de la particule du point $\vec{r'}$ au point $\vec{r}$.

– l'opérateur collision $\mathscr{C}$:

$$\mathscr{C} = \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\Sigma_s\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right)}{\Sigma_t\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E'\right)} d\vec{\Omega'} dE' ds. \tag{1.6}$$

On note C son noyau défini comme :

$$C = C\left(\vec{r'}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right) = \frac{\Sigma_s\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right)}{\Sigma_t\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E'\right)} \tag{1.7}$$

qui correspond à la collision au point $\vec{r'}$ qui fait passer la particule d'une énergie E' à E et d'une direction $\vec{\Omega'}$ à une direction $\vec{\Omega}$.

Le produit

$$\mathcal{T} = TC \tag{1.8}$$

représente le noyau de l'opérateur de transport.

On trouve couramment, dans la littérature, la notation K pour $\mathcal{T}$. Nous n'utiliserons pas cette notation pour éviter de potentielles confusions avec les notations usuelles employées pour la matrice de fission (K_{ij}). On a alors

$$\mathcal{T}\left(P' \to P\right) = T\left(\vec{r'} \to \vec{r}\right) C\left(\vec{r'}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right), \tag{1.9}$$

où P' et P désignent des points de l'espace des phases : $P' \equiv \left(\vec{r'}, E', \vec{\Omega'}\right)$ et $P \equiv \left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)$.

On peut donc réécrire l'équation de Boltzmann sous la forme intégrale compacte suivante en faisant appel à la densité de collisions entrantes ainsi :

$$\psi(P) = \int \mathcal{T}(P' \to P)\,\psi(P')\,dP' + \int S(P_0)\,\mathcal{T}(P_0 \to P)\,dP_0, \qquad (1.10)$$

où P_0 est un point de l'espace des phases du domaine source de neutrons.

La forme générale de $T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E\right)$ à trois dimensions s'écrit :

$$T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E\right) = \Sigma_t(\vec{r}, E)\left[e^{\int_{\vec{r'}\to\vec{r}} \Sigma_t\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega}\right)ds'}\right]\frac{\delta\left(\vec{\Omega'}\cdot\vec{\Omega}-1\right)}{\|\vec{r}-\vec{r'}\|^2}. \qquad (1.11)$$

1.2.2 Cas de la criticité – Facteur de multiplication

Dans cette thèse, nous nous intéressons à des configurations physiques critiques [BR85], sans source externe, $Q\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = 0$, et où les neutrons sont essentiellement issus des réactions nucléaires de fission. Le k_{eff} s'interprète ainsi comme le nombre par lequel diviser les sources de fission pour obtenir un équilibre entre la production et la disparition des neutrons.

L'équation associée à l'état critique s'écrit alors :

$$L\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = H\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) + \frac{1}{k_{\text{eff}}}F\Psi\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right). \qquad (1.12)$$

Le cas où $k_{\text{eff}} = 1$ mène à :

$$\text{Productions} = \text{Absorptions} + \text{Fuites}, \qquad (1.13)$$

c'est le cas critique correspondant à une solution stationnaire.

Dans le cas où

$$\text{Productions} < \text{Absorptions} + \text{Fuites}, \qquad (1.14)$$

le $k_{\text{eff}} < 1$ (cas sous-critique), la solution tend vers zéro.

Dans le dernier cas,

$$\text{Productions} > \text{Absorptions} + \text{Fuites}, \qquad (1.15)$$

le $k_{\text{eff}} > 1$ (cas sur-critique), la solution diverge.

Par la suite, quand nous évoquerons l'équation de Boltzmann, il s'agira de l'équation de Boltzmann dans le cas de la criticité, c'est-à-dire de l'équation (1.12).

1.3 Conclusion

Plusieurs méthodes de résolution existent pour résoudre le problème critique, déterministe et stochastique. C'est cette dernière méthode qui nous intéresse dans la suite et qui fait l'objet d'une présentation dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Présentation générale de la méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons

Sommaire

2.1 Principes généraux 12
2.2 Décomposition en série de Neumann 14
2.3 Résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo 15
2.4 Lois de tirage des événements - construction du processus statistique 17
2.5 Notion de poids d'un neutron 22
2.6 Estimateurs de grandeurs physiques dans une simulation Monte-Carlo 23
2.6.1 Estimateurs du flux 23
2.6.2 Estimateur du courant neutronique 24
2.6.3 Estimateur d'un taux de réaction 24
2.6.4 Estimateurs du k_{eff} 24
2.7 Le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® 26
2.7.1 Présentation du code 26
2.7.2 Parallélisme 27
2.8 Conclusion 27

On reprend ici les grandes lignes de la présentation de la méthode de Monte-Carlo qui est faite dans la référence [Ba13].

L'approche probabiliste de type Monte Carlo permet de simuler la « réalité » à l'échelle microscopique pour remonter aux grandeurs macroscopiques : les neutrons sont suivis individuellement et les événements considérés sont les interactions auxquelles ils donnent lieu avec les différents noyaux des atomes qui constituent le milieu traversé : diffusions, capture, fission, réactions (n,2n), etc. Cette suite d'événements est désignée par le terme d'histoire. C'est en simulant suffisamment d'histoires de neutrons que l'on peut quantifier la grandeur physique macroscopique d'intérêt. La population de neutrons dans le cœur d'un REP en fonctionnement normal produits à un instant donné est de quelques 10^{19}. La technologie actuelle ne permet pas encore de suivre autant de particules. Avec un échantillon de quelques milliards d'histoires on détermine ainsi le facteur de multiplication effectif d'un cœur de REP avec une précision statistique de quelques *pcm* (parties pour cent mille : 10^{-5}).puissance par assemblage à 1 % à un écart-type.

La méthode de Monte Carlo appliquée à la résolution de l'équation du transport des neutrons est réputée « exacte » car capable de reproduire « sans approximations » les phénomènes d'interaction particule-matière par opposition aux modélisations des méthodes déterministes (par exemple, pas d'approximation multigroupe), dans des systèmes physiques de géométrie tridimensionnelle quelconque. La contrepartie en est cependant son « coût temporel » : la lenteur de la convergence statistique de la simulation qui induit une contrainte forte sur la taille des régions dans lesquelles les résultats sont recherchés, même si dans certaines situations il est possible d'obtenir une estimation sans biais du flux en un point de l'espace.

Les codes de transport des neutrons fondés sur la méthode de Monte Carlo simulent la propagation des neutrons à partir des données nucléaires ponctuelles en énergie (sections efficaces, transferts énergétiques et angulaires, spectres d'émission de particules, ...) fournies dans les évaluations internationales. C'est la raison pour laquelle on les qualifie souvent de codes de transport Monte Carlo à énergie continue et qu'ils ont acquis le statut de code de transport de référence vis-à-vis des codes de transport déterministes.

2.1 Principes généraux

L'application de la méthode de Monte Carlo pour résoudre l'équation de Boltzmann s'appuie sur la forme intégrale de celle-ci, rappelée au chapitre précédent.

L'intérêt de cette forme intégrale est de permettre de faire apparaître les

opérateurs utilisés pour effectuer la simulation des histoires des neutrons.

La réponse d'un détecteur, notée ici $R(Z)$, est l'expression couramment utilisée pour spécifier une grandeur physique d'intérêt (flux, un taux de réaction, par exemple) intégrée dans une zone circonscrite de l'espace des phases. Par définition $R(Z)$ s'écrit :

$$R(Z) = \int_Z s_R(P)\,\Psi(P)\,dP, \tag{2.1}$$

où $\Psi(P)$ est le flux angulaire des neutrons au point P de l'espace des phases, défini par le triplet $\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$, et $s_R(P)$ est la fonction réponse ou sensibilité qui caractérise la grandeur $R(Z)$: $s_R(P) = 1$ pour le calcul du flux et $s_R(P) = \Sigma(\vec{r},E)$ pour le calcul d'un taux de réaction.

Il est commode de réécrire l'expression donnant $R(Z)$ en introduisant la densité de collision des neutrons entrant en collision :

$$R(Z) = \int_Z \frac{s_R(P)}{\Sigma(P)}\psi(P)\,dP. \tag{2.2}$$

L'équation intégrale (2.1) peut être réécrite avec la densité de collision $\zeta(P)$ sous la forme ci-après :

$$\zeta(P) = \int_D K\left(P' \to P\right)\zeta\left(P'\right)dP' + Q(P), \tag{2.3}$$

où $K(P' \to P)$ est le noyau de l'opérateur intégral de transport qui fait passer la particule du point P' au point P de l'espace des phases D couvert par le système physique étudié.

Cet opérateur intégral est le produit de deux opérateurs déplacement et collision dont les noyaux sont notés respectivement $T\left(\vec{r'} \to \vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ et $C\left(\vec{r},E' \to E,\vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right)$:

– le noyaux de l'opérateur déplacement $T\left(\vec{r'} \to \vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$:

$$T\left(\vec{r'} \to \vec{r},E,\vec{\Omega}\right)d\vec{r} = \left[\exp\left(-\int_0^s \Sigma\left(\vec{r}+s'\vec{\Omega},E\right)ds'\right)\right]\Sigma(\vec{r},E)\,ds, \tag{2.4}$$

avec $\vec{r} = \vec{r'} + s'\vec{\Omega}$.

En interprétant la section efficace macroscopique $\Sigma(\vec{r},E)$ comme une densité de probabilité (probabilité d'interaction par unité de longueur

(en cm^{-1})), l'expression (2.4) s'interprète comme le produit de la probabilité, $\exp\left(-\int_0^s \Sigma\left(\vec{r}+s'\vec{\Omega},E\right)ds'\right)$, pour un neutron de ne pas avoir de collision sur le trajet de longueur s par la probabilité $\Sigma\left(\vec{r},E\right)ds$ d'avoir une collision sur le trajet élémentaire compris entre s et $s+ds$. Autrement dit, $\left[\exp\left(-\int_0^s \Sigma\left(\vec{r}+s'\vec{\Omega},E\right)ds'\right)\right]\Sigma\left(\vec{r},E\right)$ s'interprète comme la densité de probabilité pour le neutron de franchir la distance $s=\|\vec{r}-\vec{r'}\|$ sans subir de collision et d'avoir une collision en $\vec{r}$;

- le noyau de l'opérateur collision $C\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)$:

$$C\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)=\frac{\Sigma_s\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)}{\Sigma\left(\vec{r},E'\right)}, \tag{2.5}$$

où $\Sigma_s\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)$ est la section efficace macroscopique différentielle de diffusion des neutrons en énergie et en direction ;

- $Q\left(P\right)$ représente les particules sources arrivant directement en P sans avoir subi de collisions :

$$Q\left(P\right)=\int_{DS} S\left(P_0\right)T\left(P_0\to P\right)dP_0, \tag{2.6}$$

où DS désigne le domaine source dans l'espace des phases.

2.2 Décomposition en série de Neumann

On montre que $\psi\left(P\right)$ solution de l'équation intégrale (1.10) peut être exprimée par un développement en série appelé décomposition en série de Neumann :

$$\psi\left(P\right)=\sum_n^{\infty}\psi_n\left(P\right) \tag{2.7}$$

dont chacun des termes $\psi_n\left(P\right)$ a une interprétation physique (voir figure 2.1) :

- $\psi_0\left(P\right)=Q\left(P\right)$ est la contribution à $\psi\left(P\right)$ des neutrons directement issus de la source ;
- $\psi_1\left(P\right)$ est la contribution à $\psi\left(P\right)$ des neutrons ayant subi une collision et une seule ;
- $\psi_2\left(P\right)$ est la contribution à $\psi\left(P\right)$ des neutrons ayant subi deux collsions ;
- ...
- $\psi_n\left(P\right)$ est la contribution à $\psi\left(P\right)$ des neutrons ayant subi n collisions et s'écrit :

$$\begin{aligned}\psi_n\left(P\right)=\int_{DS}\int_D\ldots\int_D S\left(P_0\right)T\left(P_0\to P_1\right)\\ K\left(P_1\to P_2\right)\ldots K\left(P_n\to P\right)dP_0dP_1\ldots dP_n,\end{aligned} \tag{2.8}$$

pour $n\geq 1$, les intégrations se faisant sur l'espace des phases.

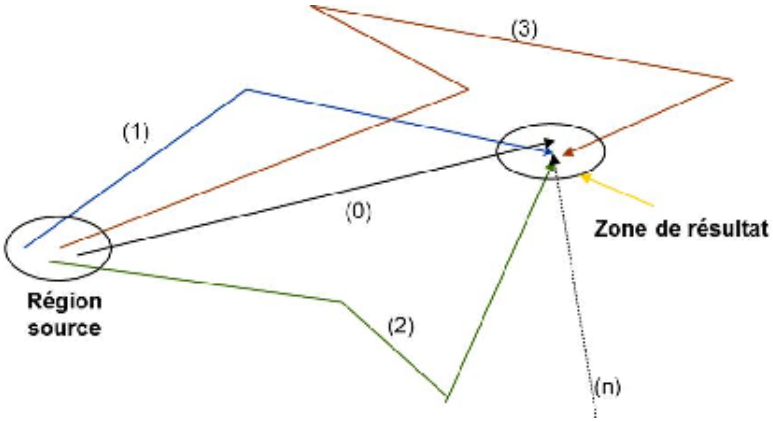


FIGURE 2.1 – Illustration de la décomposition en série de Neumann. (n) : numéro d'ordre de la collision ou nombre de collisions subies par un neutron issu de la région source avant d'arriver dans la zone résultat.

On remarquera que le processus aléatoire de propagation des neutrons est un *processus discret* de type *markovien* : l'état de la particule à l'étape n est déterminé à partir de la connaissance de son état à l'étape immédiatement antérieure $n-1$, l'histoire d'une particule constituant une *chaîne de Markov*.

Cette décomposition de $\psi(P)$ en série de Neumann, montre donc que les histoires de toute longueur arrivant dans la zone de résultat contribuent à la grandeur cherchée $R(Z)$.

Elle conduit naturellement à la résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo, c'est-à-dire en simulant (sur ordinateur) la chaîne des événements constituant l'histoire de chaque neutron source : diffusions, absorption, multiplication, fuite hors du système physique étudié.

2.3 Résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo

Cette résolution de l'équation du transport par la méthode de Monte-Carlo consiste ainsi :

a à construire un processus statistique appelé « jeu » qui reproduit, à partir d'une source, l'histoire des particules représentée par un ensemble de trajectoires et de collisions bornant chaque trajectoire (diffusions, absorptions, ...). On obtient alors une chaîne de sites d'événements (émission de particules sources, collisions, disparition) : P_1, P_2, ..., P_n, ...

b à définir une variable aléatoire $X(Z)$ que l'on associe à la grandeur cherchée $R(Z)$: $X(Z)$ est appelée « estimateur » de $R(Z)$. Lorsque qu'au cours de son histoire, un neutron pénètre dans la zone de résultat Z, on enregistre ce fait par l'attribution d'une valeur w à $X(Z)$. Par exemple, en considérant l'expression (2.2), si une interaction a lieu en un point P de Z alors on attribue à w la valeur égale à : $1 \times \frac{s_R(P)}{\Sigma(P)}$. La quantité est appelée « encaissement » ou « score ». Si au cours de son histoire le neutron n'a pas pénétré la zone de résultat alors le score correspondant est $w = 0$;

c à fixer des « règles du jeu », c'est-à-dire définir les densités de probabilité avec lesquelles les événements sont choisis. Cela revient à choisir pour les particules leur parcours, la nature de l'interaction subie, leur énergie et leur direction après choc dans le cas d'une diffusion. Ceci est réalisé aléatoirement et en conformité avec les caractéristiques physiques de la source de particules et les lois physiques qui régissent leurs interactions avec la matière. Les densités de probabilité utilisées pour simuler l'histoire des particules doivent être telles que $\mathbb{E}[X(Z)]$, espérance mathématique de $X(Z)$, satisfasse :

$$\mathbb{E}[X(Z)] = R(Z) \; ; \tag{2.9}$$

d à réaliser le jeu M fois de manière indépendante : on simule M $(m = 1,M)$ histoires de particules. Dans la pratique on simule N « batchs » (ou « lots » ou « cycles » ou « générations ») de M particules d'où résulte une estimation correspondante $\tilde{X}_\nu(Z)$ de $R(Z)$, $\nu = 1nN$. La quantité $\tilde{X}_\nu(Z)$ est obtenue par la moyenne empirique :

$$\tilde{X}_\nu(Z) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} w_{m,\nu}(Z) \, , \tag{2.10}$$

où $w_{m,\nu}(Z)$ est le score associé à l'histoire m du batch ν ;

e à estimer la grandeur $R(Z)$ cherchée en appliquant la loi des grands nombres (N doit être suffisamment grand). $R(Z)$ est approchée par la moyenne empirique $\bar{X}_N(Z)$ des quantités $\tilde{X}_\nu(Z)$:

$$\bar{X}_N(Z) = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^{N} \tilde{X}_\nu(Z) \, , \; \lim_{N\to\infty} \bar{X}_N(Z) = R(Z) \, . \tag{2.11}$$

Le théorème central limite stipule que les quantités $\tilde{X}_\nu(Z)$ sont distribuées selon une gaussienne et la variance $\epsilon^2_{\bar{X}_N(Z)}$ associée à leur moyenne, $\bar{X}_N(Z)$, est estimée sans biais par :

$$\epsilon^2_{\bar{X}_N(Z)} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{\nu=1}^{N} \left(X_\nu(Z) - \bar{X}_N(Z)\right)^2 . \tag{2.12}$$

L'intervalle de confiance est défini par :

$$c(e) = \text{probabilité}\left\{\bar{X}_N(Z) - e \leq X(Z) \leq \bar{X}_N(Z) + e\right\}, \qquad (2.13)$$

où e est un réel positif, $c(e)$ étant calculé pour une densité de probabilité gaussienne compte tenu du théorème central limite.

Il est d'usage d'utiliser les valeurs suivantes de e et les valeurs correspondantes de l'intervalle de confiance :
- $e = \epsilon_{\bar{X}_N(Z)}$, $c(e) = 0{,}689$ (68,9 % de confiance) ;
- $e = 2\epsilon_{\bar{X}_N(Z)}$, $c(e) = 0{,}954$ (95,4 % de confiance) ;
- $e = 3\epsilon_{\bar{X}_N(Z)}$, $c(e) = 0{,}997$ (99,7 % de confiance).

En particulier, dans le domaine de la sûreté-criticité, la valeur calculée du facteur de multiplication effectif k_{eff} est donné *a minima* à $3\epsilon_{\bar{X}_N(Z)}$.

Dans la pratique, les histoires de neutrons sont simulées par batch de particules (de 10^3 à 10^5 neutrons). Chaque batch fournit une estimation de la grandeur physique recherchée, le flux de neutrons dans un volume donné du système physique étudié, en appliquant la loi des grands nombres, par exemple. À l'ensemble de ces estimations par batch, obtenues en nombre suffisant, on peut alors appliquer de nouveau la loi des grands nombres puis le théorème central limite, ce qui conduit à une estimation moyenne de la grandeur recherchée et son écart-type associé, conformément à l'exposé ci-dessus.

2.4 Lois de tirage des événements - construction du processus statistique

On a indiqué plus haut que la construction de l'histoire d'un neutron s'effectue à l'aide d'un échantillonnage des événements successifs auxquels donne lieu ce neutron de sa naissance à sa disparition. Ce choix des événements s'effectue à partir des lois de probabilité qui les régissent. De manière formelle ces densités de probabilité sont définies comme indiqué ci-après.

Le premier événement d'une histoire est la naissance d'un neutron. Faire naître un neutron, c'est déterminer le point P_0 de l'espace des phases appartenant à la zone source d'où on le fait surgir. Ce point P_0 est choisi à l'aide d'une densité de probabilité $f_0(P_0)$ construite à partir de la distribution de la source $S_0(P_0)$ normalisée sur son domaine de définition DS dans l'espace des phases :

$$f_0(P_0) = \frac{S_0(P_0)}{\int_{DS} S_0(P_0)\, dP_0}. \qquad (2.14)$$

Dans la pratique la source se présente souvent comme un produit de fonctions dépendant respectivement de l'espace, de l'énergie et de la direction, voire du temps. Ces variables sont donc successivement échantillonnées à l'aide des densités de probabilité construites selon le principe indiqué ci-dessus. Sont ainsi fixées les caractéristiques physiques initiales du neutron requises pour amorcer sa propagation.

Le point P_0 étant connu, on choisit le point suivant P_1 de la chaîne d'événements à l'aide de la densité de probabilité $f_1(P_1)$ déduite du noyau de l'*opérateur intégral de transport* :

$$f_1(P_1) = \frac{K(P_0 \to P_1)}{\int_{DS} K(P_0 \to P_1)\, dP_1}. \tag{2.15}$$

Et ainsi de suite : le point P_i de la chaîne d'événements est choisi connaissant le point P_{i-1} avec la densité de probabilité $f_i(P_i)$:

$$f_i(P_i) = \frac{K(P_{i-1} \to P_i)}{\int_{DS} K(P_{i-1} \to P_i)\, dP_i}. \tag{2.16}$$

Dans la pratique, les densités $f_i(P_i)$ se présentent sous forme factorisée conformément aux expressions (2.4) et (2.5) : on effectue le choix du parcours du neutron, puis le choix de l'interaction et s'il s'agit d'une diffusion ou d'une fission, celui des caractéristiques du neutron réémis (direction et énergie). L'expression (2.4) se prête directement à un échantillonnage conduisant au choix du parcours du neutron entre deux collisions successives.

Dans le cas d'une propagation dans un milieu homogène la loi du parcours (densité de probabilité) déduite de (2.4) prend la forme simple suivante :

$$f(s) = \Sigma(E)\, e^{-\Sigma(E)s}, \tag{2.17}$$

où s est la longueur du parcours. Cette longueur est échantillonnée en inversant la fonction de répartition de la densité (2.17) :

$$s = -\frac{1}{\Sigma(E)} \ln(1-\xi), \tag{2.18}$$

où ξ est un nombre aléatoire uniformément choisi entre 0 et 1.

L'expression (2.5) relative au noyau de l'opérateur de collision peut être explicitée de manière à faire apparaître les probabilités des différents événements associés à une collision : choix du nucléide, choix du type d'interaction, choix de la direction et éventuellement de l'énergie du neutron après diffusion si l'interaction choisie est une diffusion. Considérant un milieu constitué

d'un mélange homogène de nucléides j, le noyau de l'opérateur de collision s'écrit :

$$C\left(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right) = \sum_j \frac{\Sigma_j\left(\vec{r}, E'\right)}{\Sigma\left(\vec{r}, E'\right)} \times \sum_i \left[\frac{\sigma_{sj}\left(E'\right)}{\sigma_j\left(E'\right)}\right] \frac{\sigma_{ij}\left(E'\right)}{\sigma_{sj}\left(E'\right)} \nu_{ij} f_{ij}\left(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right), \tag{2.19}$$

avec :

- $\sigma_{sj}\left(E'\right)$: section efficace microscopique totale de diffusion à l'énergie E' relative au nucléide j ;
- $\sigma_j\left(E'\right)$: section efficace microscopique totale à l'énergie E' relative au nucléide j ;
- $\sigma_{ij}\left(E'\right)$: section efficace microscopique totale de diffusion à l'énergie E' relative à la réaction nucléaire de type i (diffusion élastique, diffusions inélastiques, (n,2n), fission) sur le noyau atomique j ;
- $\Sigma_j\left(\vec{r}, E'\right)$: section efficace macroscopique totale au point $\vec{r}$ à l'énergie E' relative au nucléide j ;
- $\Sigma\left(\vec{r}, E'\right) = \sum_j \Sigma_j\left(\vec{r}, E'\right)$: section efficace macroscopique totale du milieu de propagation des neutrons, mélange homogène des nucléides j, au point $\vec{r}$ à l'énergie E' ;
- ν_{ij} : multiplicité des neutrons produits lors de l'interaction i sur le nucléide j : réaction (n,2n), ...
- $f_{ij}\left(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right)$: densité de probabilité de renvoi en énergie et en angle de la particule lors de l'interaction de type i sur le nucléide j.

Une simulation Monte-Carlo consiste à simuler l'histoire des neutrons par lots appelés « batchs ». La simulation d'un batch de neutrons correspond à une « itération externe » d'un algorithme de résolution déterministe.

Dans le cas d'un calcul critique, ce sont les neutrons issus des fissions qui constituent les sources du batch suivant (voir section 3.2). Lorsqu'un neutron sort du système simulé ou est absorbé, il est considéré comme « mort » et n'est plus suivi. On dit que son histoire est terminée. Ceci est résumé par la figure 2.2.

D'un point de vue algorithmique, en reprenant les notations définies dans la section 1.1, nous effectuons, à partir d'une source S un déplacement T. Dans le cas où la particule sort du système, soit il y a fuite et l'histoire de la particule est terminée, soit il y a réflexion et dans ce cas, on échantillonne un nouveau déplacement pour cette particule. Dans le cas où la particule franchit une interface, la particule est positionnée à l'interface puis un nou-

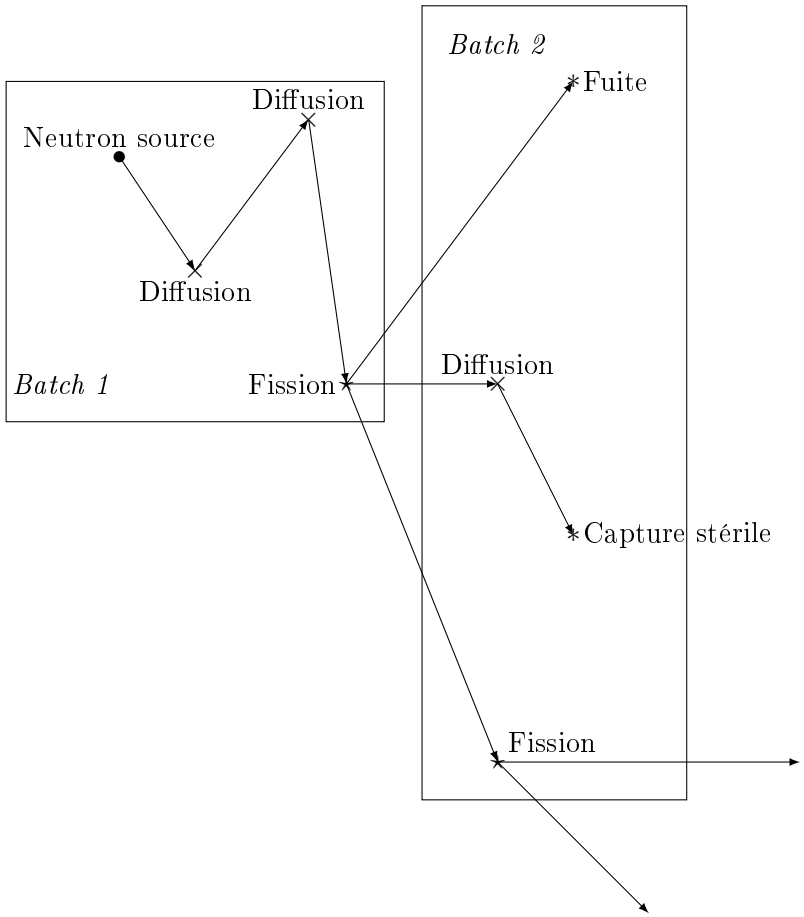


FIGURE 2.2 – Schéma de la vie d'un neutron.

veau déplacement est échantillonné pour ce neutron. Enfin, dans le cas où la collision suivante du neutron a lieu dans le milieu dans lequel il se déplace, on échantillonne une interaction selon C. Il y a tirage de l'isotope choqué puis tirage du type d'interaction (diffusion, absorption...). Dans le cas d'une absorption, la vie du neutron suivi est terminée s'il s'agit d'une capture stérile. Dans le cas d'une diffusion, son énergie et sa direction sont calculées puis on procède à l'échantillonnage d'un nouveau déplacement. Ceci est résumé par la figure 2.3 [Reu03].

L'intérêt de (2.19) est de faire apparaître les probabilités et densité de probabilité suivantes, directement utilisées pour réaliser la simulation Monte-Carlo :

- $\frac{\Sigma_j(\vec{r},E')}{\Sigma(\vec{r},E')}$: probabilité de choix du nucléide j ;
- $\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}$: probabilité de non absorption (ou de survie) du neutron ;

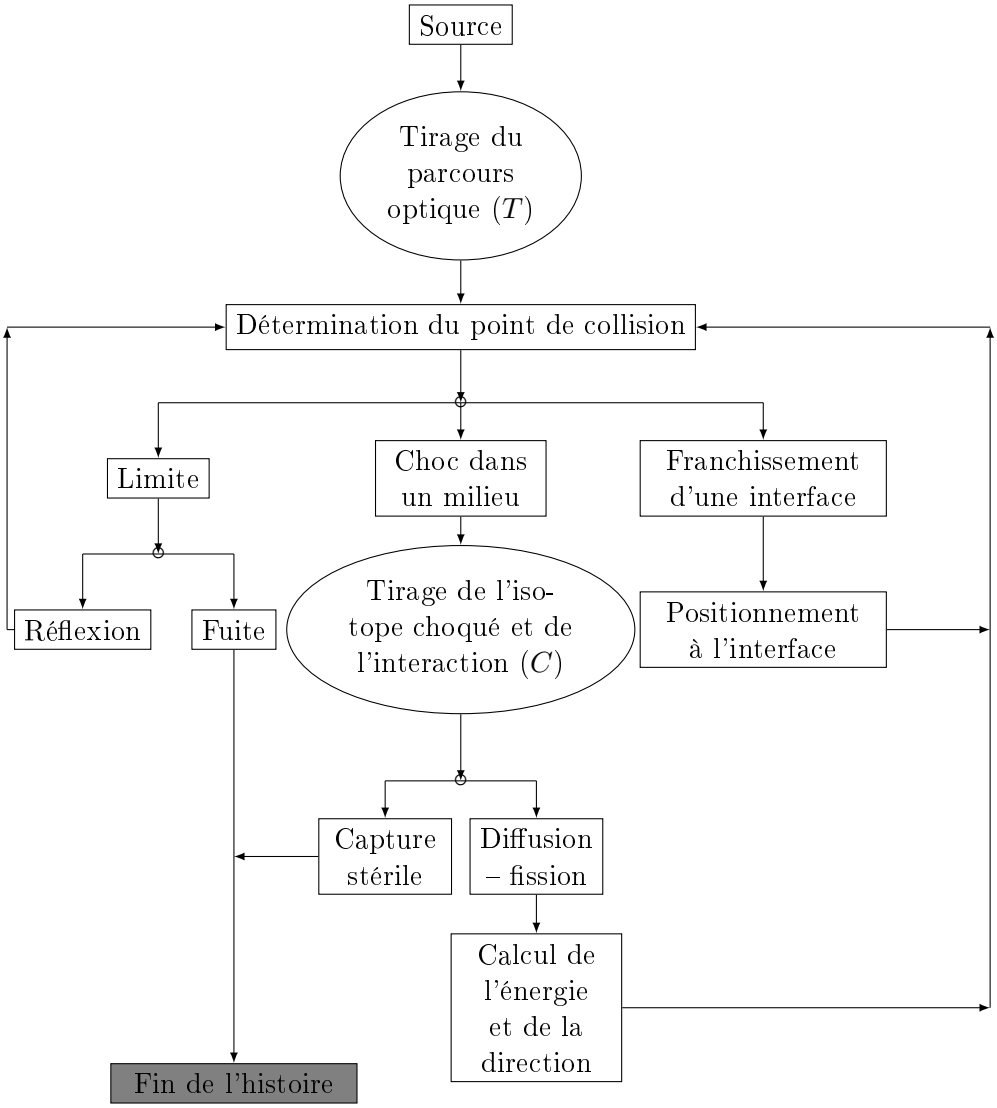


FIGURE 2.3 – Principe de la simulation de l'histoire d'un neutron par la méthode de Monte-Carlo.

- $\frac{\sigma_{ij}(E')}{\sigma_{sj}(E')}$: probabilité de choix du type de diffusion (diffusion élastique, diffusion inélastique, ...) ;
- $f_{ij}\left(E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right)$: densité de probabilité de renvoi en énergie et en angle de la particule lors de l'interaction de type i sur le nucléide j.

Dans les trois premiers cas, on a affaire à des probabilités discrètes.

2.5 Notion de poids d'un neutron

Dans une simulation strictement naturelle *analogue*, le poids du neutron est égal à l'unité : un neutron représente un neutron et on le comptabilise pour un lorsqu'il atteint la zone de résultat.

Pour des raisons d'optimisation de temps de calcul, au lieu de simuler explicitement l'éventualité de l'absorption d'une particule on préfère multiplier son poids valant l'unité au départ de la simulation par sa probabilité de survie égale au rapport de la section efficace de diffusion à la section efficace totale, $\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}$, et ce à chaque collision. Ce procédé justifie que le rapport $\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}$ soit souvent appelé *facteur de capture implicite* (voir section 4.2.3).

Comme $\sigma_{sj}(E') < \sigma_j(E')$, le poids w du neutron diminue au fur et à mesure des collisions qu'il subit et tend vers zéro lorsque le nombre de collisions tend vers l'infini. En effet, considérons pour simplifier le transport monocinétique dans un milieu infini monoatomique. Dans ce cas, le poids du neutron après n collisions s'écrit $w_n = \left[\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}\right]^n$. En faisant tendre le nombre de collisions vers l'infini on a :

$$w_\infty = \lim_{n\to\infty} \left[\frac{\sigma_{sj}(E')}{\sigma_j(E')}\right]^n = 0. \tag{2.20}$$

Autrement dit, le neutron voit son « potentiel vital » et/ou « potentiel d'information » décroître de collision en collision. Pour un nombre de collisions suffisamment élevé le neutron n'apporte donc plus de contribution significative au résultat cherché, et au regard du critère d'optimisation du temps de calcul, on le fait disparaître par un procédé statistique adéquat, appelé roulette russe (voir section 4.2.1, lorsque son poids passe en dessous d'un seuil fixé.

L'estimateur d'une réponse $R(Z)$ cherchée dépend donc du poids du neutron.

L'application de cette technique de simulation fournit un premier exemple d'une simulation qui n'est plus strictement naturelle puisque l'on ne simule

pas explicitement la capture conduisant donc à réaliser une *simulation non analogue*.

Cette notion de poids sera souvent utilisée dans la suite.

2.6 Estimateurs de grandeurs physiques dans une simulation Monte-Carlo

À une réponse $R(Z)$ donnée, on peut associer différentes formes mathématiques d'estimateurs dont le choix est dicté par leur « vitesse » de convergence vers la valeur cherchée. Par exemple, dans un milieu peu dense l'« estimateur corde » converge plus vite que l' « estimateur collision ». Dans certaines situations, grâce à un « estimateur ponctuel »(dénommé en anglais « *point kernel estimator* ») une grandeur physique peut être calculée en un point de l'espace des phases : c'est le cas des milieux vides ou très peu denses.

Nous rappelons dans les sous-sections suivantes les estimateurs correspondants disponibles tels que définis dans le code Monte-Carlo TRIPOLI-4® [Tea13, DPD+07].

2.6.1 Estimateurs du flux

Estimateur collision

TRIPOLI-4® définit l'estimateur « COLL », estimateur collision du flux intégré dans un volume, de la manière suivante :

$$\Theta_{\text{COLL}} = \frac{1}{\Sigma_t}. \tag{2.21}$$

Nous constatons qu'intrinsèquement cet estimateur s'avère peu efficace dans des milieux peu denses.

Estimateur corde

L'estimateur corde, appelé « TRACK » pour *tracklength*, du flux intégré dans le volume, se définit ainsi :

$$\Theta_{\text{TRACK}} = l, \tag{2.22}$$

où l correspond à la longueur du vol de la particule dans le volume considéré.

Estimateur surface

TRIPOLI-4® permet également d'estimer la valeur du flux intégré sur une surface. Il s'agit de l'estimateur surface, SURF, qui se définit de la sorte :

$$\Theta_{\text{SURF}} = \frac{1}{\vec{\Omega}.\vec{n}}. \tag{2.23}$$

Lorsqu'une particule traverse la surface considérée, nous encaissons l'inverse du produit scalaire entre sa direction $\vec{\Omega}$ et la normale à la surface $\vec{n}$.

2.6.2 Estimateur du courant neutronique

Physiquement, le courant neutronique se définit comme le nombre de neutrons traversant une surface donnée. Il suffit donc, du point de vue de l'estimation du courant, de compter les neutrons traversant la surface en question. L'estimateur se définit alors simplement de la façon suivante :

$$\Theta = 1. \tag{2.24}$$

2.6.3 Estimateur d'un taux de réaction

Considérons la réaction X, par exemple l'absorption ou la diffusion élastique. Soit R_X le taux de réaction associé. On a

$$R_X = \Sigma_X \phi. \tag{2.25}$$

Du point de vue de la simulation Monte-Carlo, calculer un taux de réaction revient à calculer le flux. Les estimateurs du taux de réaction de la réaction X sont donc de même nature que ceux utilisés pour calculer le flux.

2.6.4 Estimateurs du k_{eff}

Estimateur « KSTEP »

L'estimateur « KSTEP » du k_{eff}, est défini par le nombre de neutrons générés ν lors d'une fission. L'estimateur associé s'écrit donc

$$\Theta_{\text{KSTEP}} = \nu. \tag{2.26}$$

Estimateur « KCOLL »

Le « KCOLL » est un estimateur du k_{eff} fondé sur le nombre moyen de neutrons générés à chaque interaction avec un isotope fissile i. Lors d'une interaction, nous encaissons

$$\Theta_{\text{KCOLL}} = \frac{\nu_i \sigma_{f_i}}{\sigma_{t_i}}. \tag{2.27}$$

Estimateur « MACRO KCOLL »

Le « MACRO KCOLL » est un estimateur du k_{eff} fondé sur le nombre moyen de neutrons générés par chaque isotope fissile i lors d'une interaction dans le milieu considéré. Nous encaissons à chaque interaction

$$\Theta_{\text{MACRO KCOLL}} = \frac{\sum_i \nu_i N_i \sigma_{f_i}}{\Sigma_t}. \tag{2.28}$$

Estimateur « KTRACK »

Le KTRACK, quant à lui, est basé sur le nombre de neutrons générés par tous les isotopes lors d'un vol dans le milieu considéré. Nous encaissons alors

$$\Theta_{\text{KTRACK}} = l \sum_{i=1}^{n} \nu_i N_i \sigma_{f_i}, \tag{2.29}$$

où l correspond à la longueur du vol.

Estimateur combiné

Un quatrième estimateur – combinaison des estimateurs KSTEP, KCOLL et KTRACK – est présent dans le code. Cet estimateur vise à tenir compte des corrélations existantes entre les estimateurs classiques du k_{eff} [HLM08].

À titre d'exemple, on considère l'estimateur de la moyenne suivant :

$$\hat{k} = \alpha k_a + \beta k_b, \tag{2.30}$$

où k_a et k_b sont deux variables aléatoires de même moyenne. La variance de l'estimateur considéré s'écrit, en tenant compte des corrélations entre k_a et k_b ($C_{a,b}$),

$$\sigma^2 = \alpha^2 \sigma_a^2 + \beta^2 \sigma_b^2 + 2\alpha\beta C_{a,b}. \tag{2.31}$$

On impose la condition

$$\alpha + \beta = 1 \tag{2.32}$$

afin de conserver la moyenne.

On en déduit donc, en cherchant à minimiser la variance, que l'estimateur de la moyenne optimal vaut

$$\hat{k} = \frac{\left(\sigma_b^2 - C_{a,b}\right) k_a + \left(\sigma_a^2 - C_{a,b}\right) k_b}{\sigma_a^2 + \sigma_b^2 - 2C_{a,b}}. \tag{2.33}$$

La variance de cet estimateur vaut alors

$$\sigma^2 = \frac{\sigma_a^2 \sigma_b^2 - C_{a,b}^2}{\sigma_a^2 + \sigma_b^2 - 2C_{a,b}}. \tag{2.34}$$

Par récurrence, il est possible d'étendre le problème à n variables aléatoires.

TRIPOLI-4® propose un estimateur du k_{eff} fondé sur une combinaison des estimateurs STEP, COLL et TRACK. Cet estimateur permet de réaliser une synthèse des estimateurs KSTEP, KCOLL et KTRACK et d'obtenir une estimation avec une variance plus faible.

Estimateur « K_{ij} »

Nous proposons, dans le cadre de cette thèse, d'utiliser un estimateur du k_{eff} qui donne également accès aux autres modes propres du système : il s'agit de la détermination de la matrice K_{ij} (voir section 6.1). Le système fissile est discrétisé en volumes (ou cellules) repérés par un indice. Les éléments (i,j) de la matrice K_{ij} représentent le nombre moyen de neutrons issus d'une fission dans le volume i causée par un neutron provenant du volume j.

2.7 Le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4®

2.7.1 Présentation du code

Le code TRIPOLI-4® [Tea13] est un code de calcul du transport de particules tridimensionnel et polycinétique basé sur la méthode de Monte-Carlo. Les particules traitées sont les neutrons, les photons, les électrons et les positrons.

TRIPOLI-4® a pour but de traiter deux grandes classes de problèmes : les problèmes de protection et les problèmes de neutronique. Les problèmes de protection sont des problèmes de propagation sur de longues distances et avec de fortes atténuations de flux. Ce sont des problèmes à source en milieu non multiplicateur, en régime stationnaire ou dépendant du temps. Les problèmes de neutronique concernent le comportement des particules dans un milieu fissile critique ou sous-critique à source, sans ou avec source fixe en régime stationnaire.

Le code fait suite aux versions précédentes de TRIPOLI : TRIPOLI-1, TRIPOLI-2 et TRIPOLI-3 [tri01, NV90a, NV90b, Ver93], dont le développement a été entrepris à la fin des années 1960 et au début des années 1970. Il se distingue des versions antérieures par une réécriture complète dans des langages de développement plus récents (le langage C et le langage C++), une description plus complète des éléments géométriques (en surfacique et/ou combinatoire) et une représentation plus exacte des données nucléaires de base (représentation ponctuelle des sections efficaces, mais le code permet aussi des sections homogénéisées multigroupes).

2.7.2 Parallélisme

De par leur nature, les méthodes Monte-Carlo en neutronique se parallélisent très bien. En effet, chaque simulation de la vie d'une particule peut être effectuée de manière indépendante. Il est donc avantageux, dans le cas de l'utilisation de telles méthodes, d'avoir recours aux capacités des ordinateurs actuels.

Une mesure de l'efficacité du parallélisme, le *speed-up* (accélération), peut être réalisée grâce à la loi d'Amdahl [Amd67] :

$$\text{Speed-up} = \frac{1}{1 - F + \frac{F}{N}}, \tag{2.35}$$

où F correspond à la fraction du travail réalisé en parallèle et N au nombre de CPU [1]. Dans le cas d'un calcul Monte-Carlo, l'accélération peut atteindre jusque 99,5 % [Chr10].

Dans TRIPOLI-4®, le parallélisme est effectué par trois types de process différents : le moniteur, le collecteur et les simulateurs [Tea13].

Le moniteur, comme son nom l'indique, a pour rôle de surveiller l'exécution de la simulation en parallèle. C'est le process lancé par l'utilisateur.

Le collecteur a pour rôle de rassembler les différents résultats en provenance des simulateurs qui, eux, exécutent de manière indépendante les simulations, à partir des mêmes données d'entrée mais en utilisant des graines différentes pour la génération des nombres aléatoires. À la fin de chaque batch, chaque simulateur envoie au collecteur ses résultats. Quand le collecteur a recueilli les résultats du nombre de batches demandé par l'utilisateur, il demande au moniteur d'arrêter les simulateurs.

Chaque simulateur effectue sa propre convergence des sources. C'est pourquoi le parallélisme est une manière efficace d'accélérer la convergence statistique mais n'en est pas une pour la convergence des sources.

2.8 Conclusion

On a présenté, dans ce chapitre, les principes généraux de la simulation Monte-Carlo du transport des neutrons.

Les différents estimateurs des différentes grandeurs physiques étudiées ont également été exposés.

1. Central Processing Unit

Enfin, le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® ainsi que son fonctionnement en parallèle ont été présentés.

Chapitre 3

Calcul critique

Sommaire

3.1 La méthode de Monte-Carlo en neutronique . . 30
3.2 Méthode de la puissance itérée 30
3.3 Convergence et rapport de dominance 32
3.4 Déroulement d'une simulation en mode critique 33
3.4.1 Phase 1 : convergence des sources 33
3.4.2 Phase 2 : convergence statistique 35
3.5 Problématique de la convergence dans un calcul critique utilisant la méthode de l'itération de la puissance 35
3.6 Tests de convergence 39
3.6.1 Tests classiques 39
3.6.2 Entropie 40
3.6.3 Méthode du sandwich 41
3.6.4 Ponts browniens 42
3.6.5 Projection sur les vecteurs propres 42
3.7 Conclusion 42

Nous abordons dans ce chapitre l'application de la méthode de Monte-Carlo à la neutronique et plus particulièrement au cas de la criticité. Les problèmes liés à la convergence du calcul stochastique y sont abordés.

La notion de convergence est en effet centrale dans le cadre d'une simulation Monte-Carlo. En criticité, cette convergence présente deux aspects :

- l'atteinte de la « stationnarité » des sources de neutrons ;
- la convergence statistique du calcul du k_{eff} une fois la stationnarité des sources atteinte.

La phase transitoire fait l'objet d'une étude particulière, l'enjeu étant de pouvoir atteindre et détecter le plus tôt possible la stationnarité.

3.1 La méthode de Monte-Carlo en neutronique

Contrairement à une résolution de l'équation du transport par une méthode déterministe, la méthode de Monte-Carlo ne nécessite que très peu d'approximations. Il est possible de simuler la propagation des neutrons dans des géométries complexes en trois dimensions et de simuler les processus physiques d'interaction en énergie continue. Au cours de leur propagation, les neutrons subissent diverses interactions physiques comme des diffusions élastiques ou inélastiques, des captures stériles ou encore des fissions.

3.2 Méthode de la puissance itérée

La résolution de l'équation critique (1.12) est communément effectuée par la méthode de la puissance itérée (ou de l'itération de la puissance) [LM84, GB08, MDH12]. Cette méthode utilisée par les solveurs déterministes de l'équation du transport est également applicable dans le cas des solveurs probabilistes.

Pour en rappeler le principe, réécrivons de manière formelle l'équation à valeurs propres à résoudre :

$$K \underbrace{s\left(\vec{r},\vec{v}\right)}_{\text{vecteur propre}} = \underbrace{k}_{\text{valeur propre}} s\left(\vec{r},\vec{v}\right), \tag{3.1}$$

où s correspond à la distribution de sources, K à l'opérateur qui prend en entrée les sources du batch n et donne en sortie les sources du batch $n+1$, $\vec{v}$ le vecteur vitesse des neutrons.

Concrètement, partant d'une distribution de source à l'étape n, $s^{(n)}$, on cherche à déterminer la distribution de sources à l'étape $n+1$, $s^{(n+1)}$.

Chaque batch correspond au suivi d'une source de neutrons pour laquelle on stocke les neutrons qui sont créés lors des fissions, afin de servir de nouvelle source au batch suivant.

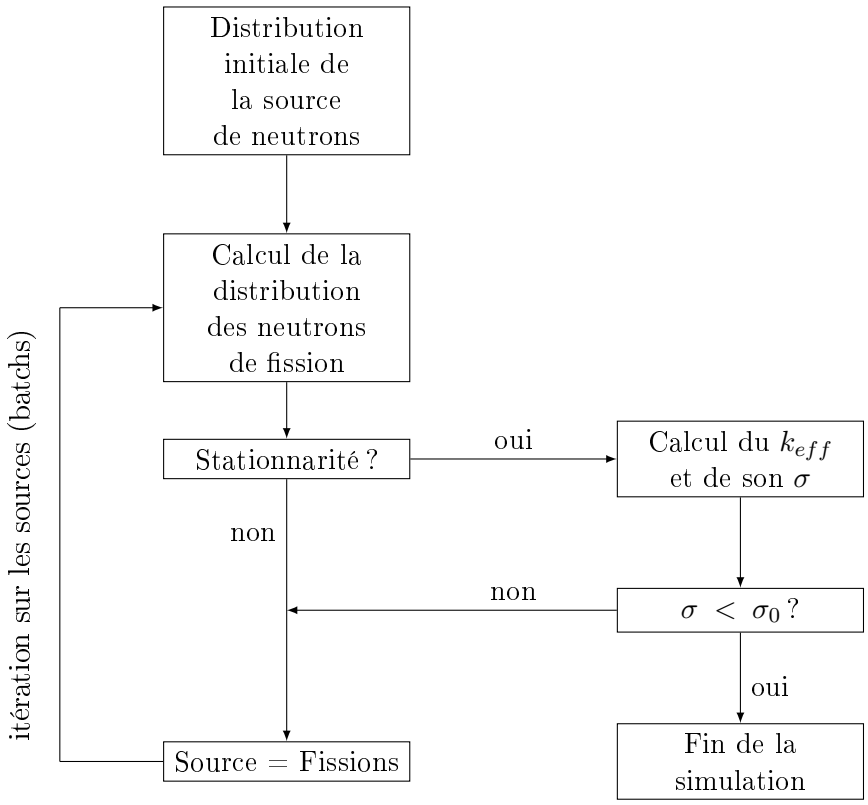


FIGURE 3.1 – Principe d'une simulation Monte-Carlo en criticité pour calculer le k_{eff}. σ : écart-type sur le k_{eff}. σ_0 : écart-type cible.

De manière explicite, on a [KT01, Duf09] :

$$Ks(\vec{r},\vec{v}) \equiv \int d\vec{v'} \int_V d^3r' f(\vec{r'},\vec{v'} \to \vec{r},\vec{v}) s(\vec{r'},\vec{v'}), \tag{3.2}$$

où $f(\vec{r'},\vec{v'} \to \vec{r},\vec{v}) d\vec{v} d^3r$ correspond au nombre moyen de neutrons de fission de première génération produits dans le volume d'élément d^3r autour de $\vec{r}$, à la vitesse d'élément $d\vec{v}$ autour de $\vec{v}$, générés par un neutron de fission né en $\vec{r'}$ avec une vitesse $\vec{v'}$.

Le mode fondamental, correspondant à la distribution de source fonda-

mentale à l'équilibre, est obtenu par itérations :

$$s_0^{(n)}(\vec{r},\vec{v}) = \frac{K s_0^{(n-1)}(\vec{r},\vec{v})}{k_0^{(n)}}. \tag{3.3}$$

Le k_{eff}, défini comme la plus grande valeur propre k_0, peut se calculer de la sorte :

$$k_{\text{eff}}^{(n)} \equiv k_0^{(n)} = \frac{\int d\vec{v} \int_V d^3r K s_n(\vec{r},\vec{v})}{\int d\vec{v} \int_V d^3r s_n(\vec{r},\vec{v})}. \tag{3.4}$$

Cette méthode consiste ainsi à initier le processus itératif avec une distribution de sources arbitraire de neutrons $s^{(0)}$ que l'utilisateur fixe. Cette distribution $s^{(0)}$ est communément appelée *initial guess* (figure 3.1). Son influence dans l'étude de la convergence des sources sera abordée dans la section 6.4.1.

3.3 Convergence et rapport de dominance

Définissons ρ_i comme le rapport de la i-ème valeur propre associée à l'équation critique (3.1) à la première valeur propre :

$$\rho_i = \frac{k_i}{k_0}. \tag{3.5}$$

On rappelle que

$$k_0 > k_1 \geq k_2 \geq \dots \tag{3.6}$$

On a donc

$$\frac{k_1}{k_0} > \frac{k_2}{k_0} \geq \frac{k_3}{k_0} \geq \dots \tag{3.7}$$

On peut montrer que la convergence de la méthode de la puissance itérée est directement reliée aux rapports ρ_i et en particulier à ρ_1 appelé rapport de dominance (« dominant ratio » en anglais). Pour ce faire, on développe sur la base de vecteurs propres, $s_i(\vec{r},\vec{v})$, de K, la distribution de sources s [Duf07] :

$$\exists \alpha_i \in \mathbb{R},\ i = 0,1,\dots,\ s^{(0)}(\vec{r},\vec{v}) = \sum_i \alpha_i s_i(\vec{r},\vec{v}). \tag{3.8}$$

En faisant appel à l'équation (3.1), on a :

$$\begin{aligned} s^{(n)}(\vec{r},\vec{v}) &= K^n \sum_i \alpha_i s_i(\vec{r},\vec{v}), \\ &= \sum_i \alpha_i K^n s_i(\vec{r},\vec{v}), \\ &= \sum_i \alpha_i k_i^n s_i(\vec{r},\vec{v}), \end{aligned} \tag{3.9}$$

d'où

$$\frac{s^{(n)}(\vec{r},\vec{v})}{k_0^n} = \alpha_0 s_0(\vec{r},\vec{v}) + \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^n \alpha_1 s_1(\vec{r},\vec{v}) + \left(\frac{k_2}{k_0}\right)^n \alpha_2 s_2(\vec{r},\vec{v}) + \dots \quad (3.10)$$

et

$$k_{\text{eff}}^{(n)} = k_0 \left[1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_0}\rho_1^{n-1}(1-\rho_1)\frac{\int s_1(\vec{r},\vec{v})\, d\vec{r}d\vec{v}}{\int s_0(\vec{r},\vec{v})\, d\vec{r}d\vec{v}} + \cdots\right]. \quad (3.11)$$

On peut constater que $s^{(n)}$ converge vers s avec un taux de convergence $O\left(\left(\frac{k_1}{k_0}\right)^n\right)$. L'étude de ρ_1 permet donc de statuer quant à la vitesse de convergence de la méthode de la puissance itérée.

De ceci, nous pouvons tirer quelques remarques. La première, on constate que la distribution de sources converge bien vers le mode fondamental. Deuxièmement, on remarque que la distribution de sources d'un système ayant un rapport de dominance élevé, très proche de 1, convergera moins rapidement vers s qu'un système ayant un faible rapport de dominance (ρ_1). Les systèmes faiblement couplés ou les systèmes de grande taille possèdent un rapport de dominance proche de 1 rendant difficile le calcul de leur état critique [Duf07, DC10]. Enfin, le k_{eff} converge plus vite que la distribution de source. En effet, la distribution de source est une valeur locale tandis que le k_{eff} est une valeur intégrée sur l'ensemble du système fissile étudié.

3.4 Déroulement d'une simulation en mode critique

La figure 3.2, relative à un calcul critique par la méthode de Monte-Carlo d'une sphère d'uranium critique, montre l'existence de deux phases distinctes. On peut mettre cette figure en relation avec la figure 3.1. La première phase consiste en une phase de mise à l'équilibre de la distribution de sources tandis que la seconde consiste en une convergence statistique.

Comme nous l'avons montré dans la section 3.3, le mode fondamental est constamment perturbé par les modes supérieurs. La convergence du problème est directement liée au rapport de dominance. Ainsi, pour une erreur fixée ϵ, on déduit de (3.10) le nombre d'itérations n nécessaires :

$$\rho_1^n \leq \epsilon \implies n \geq \frac{\ln \epsilon}{\ln \rho_1}. \quad (3.12)$$

Pour $\epsilon = 10^{-5}$ et $\rho_1 = 0{,}9$, $n = 110$; pour $\epsilon = 10^{-5}$ et $\rho_1 = 0{,}99$, $n = 1146$.

3.4.1 Phase 1 : convergence des sources

La première phase, appelée atteinte de la stationnarité, correspond à une phase transitoire pendant laquelle la distribution de sources se rapproche

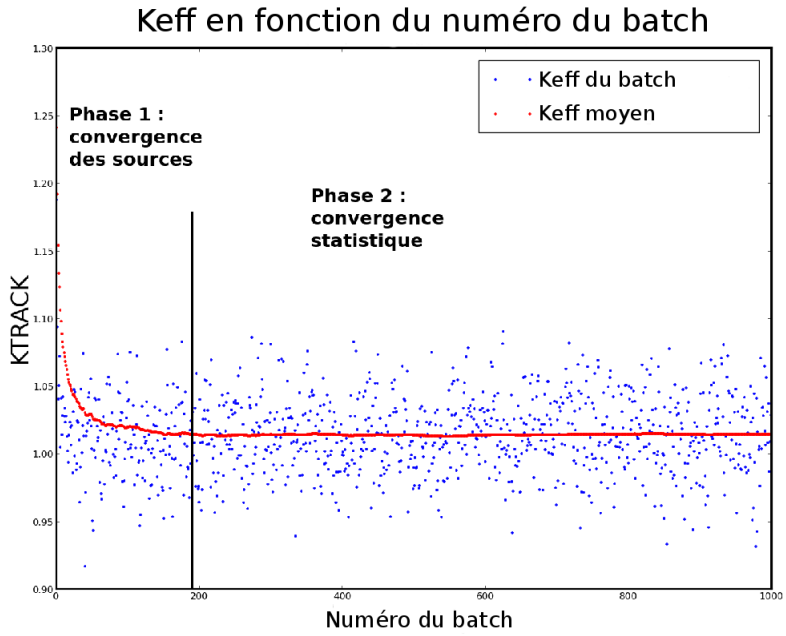


FIGURE 3.2 – Étude d'une configuration critique : sphère d'uranium. Évolution des valeurs du k_{eff} (estimateur KTRACK) en fonction du numéro du batch (les points bleus correspondent à l'estimation du k_{eff} du batch en cours et les rouges au k_{eff} moyen).

progressivement de l'état d'équilibre. Cet état stationnaire se traduit par un équilibre de la population de neutrons autour de sa distribution réelle.

Cette phase, si elle n'est pas mise de côté pour le calcul des résultats, peut entraîner un biais sur les résultats finaux. Ce biais est dû à la distribution de sources initiale (*initial guess*). Par la suite, ces batchs mis de côté seront appelés « *discardés* ». Le nombre de batchs à discarder dépend des systèmes simulés. Pour le cas illustré par la figure 3.2, il ne faudrait pas tenir compte des deux cents premiers batchs pour le calcul du k_{eff}.

Une distribution de sources initiale uniforme dans le système est généralement conseillée. En effet, une telle distribution, à défaut de connaître la vraie distribution, permet en général de réduire la phase de convergence des sources [Bro09, MDH12].

3.4.2 Phase 2 : convergence statistique

La phase 2 est quant à elle une phase de convergence statistique. C'est durant cette phase que les différents scores sont calculés et fournis à l'utilisateur. Au cours de cette phase, la distribution de sources oscille autour de sa « vraie » valeur.

La vitesse de convergence de cette seconde phase est de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{n}}$ où n correspond au nombre de particules simulées.

Cependant, contrairement à un problème à source fixe, les batchs de neutrons sont corrélés entre eux du fait, comme nous l'avons vu dans la section 3.2, que les neutrons source d'un batch sont ceux issus des fissions du batch précédent. Cette interdépendance entre batch engendre une problématique de la convergence qui est spécifique à un calcul critique.

3.5 Problématique de la convergence dans un calcul critique utilisant la méthode de l'itération de la puissance

Cette problématique est explicitée ci-après à partir des articles de E. Gelbard et R. E. Prael [GP74].

Ces auteurs considèrent un système fissile discrétisé en cellules de l'espace des phases repérées par l'indice μ. Les histoires de particules sont simulées par batch de N neutrons sources.

Soient $V_{(i)}$ et $V_{(i+1)}$ les vecteurs-populations de neutrons dans les cellules μ respectivement relatifs aux itérations i et $i+1$.

Par application de la méthode de l'itération de la puissance on a :

$$V_{(i+1)} = N\frac{HV_{(i)}}{k_{(i)}} + \epsilon_{(i)} = N\frac{HV_{(i)}}{\tau^T V_{(i)}} + \epsilon_{(i)}, \tag{3.13}$$

avec :

- H : opérateur d'élément $H_{\mu\nu} = T_{\mu\nu}W_\mu$: probabilité, $T_{\mu\nu}$, pour un neutron de la cellule ν d'arriver dans la cellule μ multipliée par le nombre W_μ de neutrons produits par fission dans la cellule μ ;
- $$k_{(i)} = \frac{\tau^T V_{(i)}}{N} : \tag{3.14}$$
  facteur de multiplication effectif calculé à l'itération i ;

- $\tau^T = (1,1,1,\cdots,1)$: vecteur unitaire ligne dimensionné au nombre total de cellules du système fissile étudié ;
- $\epsilon_{(i)}$: erreur statistique commise à l'issue de l'itération i.

On voit immédiatement sur l'équation (3.13) que les neutrons du batch $i+1$ $\left(V_{(i+1)}\right)$ résultent des neutrons sources du batch immédiatement précédent i $\left(V_{(i)}\right)$ conformément au principe de la méthode de l'itération de la puissance. En simulation Monte Carlo, une itération coïncide donc avec la simulation de l'histoire des neutrons d'un nouveau batch. Les neutrons sources initiaux de ce nouveau batch sont les neutrons de fission produits au batch immédiatement précédent.

Par ailleurs, on peut aussi écrire :

$$V_{(i)} = NU_1 + \delta_{(i)}, \tag{3.15}$$

où :

- U_1 : premier vecteur propre correspondant à la première valeur propre c'est-à-dire au facteur de multiplication effectif (k_{eff}) notée ici k_1 : $k_1 = \tau^T U_1$. Les composantes du premier vecteur propre $V_{(i)}$ s'identifient au nombre de neutrons dans chacune des cellules μ en mode fondamental ;
- $\delta_{(i)}$: vecteur écart statistique à la valeur propre exacte associée à $V_{(i)}$ de l'itération i.

Des relations (3.13) et (3.15), on déduit (3.16) :

$$NU_1 + \delta_{(i+1)} = N\frac{H\left[NU_1 + \delta_{(i)}\right]}{\tau^T\left(NU_1 + \delta_{(i)}\right)} + \epsilon_{(i)}. \tag{3.16}$$

La forme approchée au second ordre de la relation (3.16) permet de mettre en évidence les particularités de la convergence de la méthode de résolution itérative employée :

$$\delta_{(i+1)} = A\delta_{(i)} - \frac{1}{N}\left(\frac{\tau^T\delta_{(i)}}{k_1}\right)A\delta_{(i)} + \epsilon_{(i)}, \tag{3.17}$$

où A est un opérateur s'exprimant comme :

$$A = \frac{H}{k_1} - \frac{U_1 \cdot \tau^T}{k_1}. \tag{3.18}$$

On constate que les équations (3.16) ou (3.17) sont non linéaires en $\delta_{(i)}$.

On montre que :

– Le premier terme de (3.17) tend en moyenne vers 0 quand le nombre d'itérations i tend vers l'infini $\left(i \to \infty \text{ alors } E\left[\delta_{(i)}\right] \to 0\right)$ et par conséquent, ce terme n'induit pas de biais sur l'estimation du facteur de multplication effectif.

Dans le calcul de la variance, ce premier terme induit la présence d'un terme supplémentaire qui s'ajoute à la variance calculée pour des batchs statistiquement indépendants. Il résulte de la corrélation entre les batchs de neutrons simulés, corrélation positive imposée par la méthode de l'itération de la puissance. Il s'écrit :

$$\alpha_1 = \sum_{i=1,\infty} \sum_{m=2} \sum_{n=2} \rho_m^i \rho_l^i \left(1-\rho_m\right)\left(1-\rho_l\right)\epsilon_{ml}, \tag{3.19}$$

avec $\rho_m = \frac{k_m}{k_1}$, $\rho_l = \frac{k_l}{k_1}$ rapports des valeurs propres k_l et k_m d'ordre l et m à la valeur propre principale k_1 et ϵ_{ml} éléments de la matrice de variances-covariances supposés indépendants de l'indice d'itération i.

On constate d'après l'équation (3.19) que les modes propres d'ordre faible de valeur proche de la valeur propre principale ont une incidence réduite sur la variance de l'estimateur de la valeur propre comparée à celle induite par les modes propres d'ordres plus élevés dont les valeurs propres sont nettement inférieures à k_1. On notera plus loin que la situation est inversée pour la distribution de source de neutrons.

– Le deuxième terme de l'équation (3.17), non linéaire, introduit cette fois-ci un biais sur l'estimation du k_{eff} s'exprimant comme la somme de contributions des différents modes propres :

$$\Delta k = \frac{k_1}{N^2} \sum_{m=1} \sum_{l=2} \frac{\rho_m \rho_l \left(1-\rho_l\right)}{\left(1-\rho_m\rho_l\right)} \epsilon_{ml}. \tag{3.20}$$

Le biais sur le vecteur propre principal est donné par :

$$\Delta U = \frac{1}{N^2} = \sum_{m=1} \sum_{l=2} \frac{\left(\hat{\tau}^T U_m\right)\epsilon_{ml}}{\left(1-\rho_m\rho_l\right)} \left[\left(\hat{\tau}^T U_l\right) U_1 - \rho_l U_l\right], \tag{3.21}$$

où $\hat{\tau} = \frac{\tau}{k_1}$.

Cette relation montre :
– que des modes propres bien qu'étant présents peuvent ne pas contribuer au biais, ce sont ceux pour lesquels on a $\hat{\tau} U_l = 0$;
– que les modes à valeurs propres proches du fondamental qui contribuent légèrement au biais sur la valeur propre, sont des contributeurs importants au biais sur l'estimation du vecteur propre U_1. Par

conséquent un biais local important sur la distribution de source peut exister même lorsque le biais sur la valeur propre ne l'est pas.

R. J. Brissenden et A. R. Garlick [BG86] ont repris cette étude de manière approfondie dans un formalisme mathématique un peu différent mais aboutissant aux mêmes résultats principaux.

En résumé, le calcul d'un estimateur et de l'incertitude statistique associée dans un calcul critique utilisant la méthode de l'itération de puissance se différencie d'un calcul effectué pour résoudre un problème à source fixe. Cette différence réside dans la corrélation statistique induite entre batchs par l'emploi de la méthode de l'itération de la puissance. Cette corrélation, qui est positive, introduit un terme supplémentaire dans l'expression de l'estimation du facteur de multiplication, de la source de fission et de leurs incertitudes associées par rapport aux expressions de ces grandeurs physiques obtenues sans tenir compte de cette corrélation. L'importance de cette corrélation est accrue dans certaines configurations physiques : unités fissiles faiblement couplées, système fissile de grande taille comme le cœur d'un réacteur de puissance. À titre d'exemple, dans ce dernier cas, la variance réelle sur une distribution de puissance par assemblage peut être sous-estimée d'un facteur 10 à 20 si la corrélation entre les batchs est ignorée.

Sur le plan pratique, il est recommandé de simuler un nombre suffisamment élevé de neutrons par batch afin d'éliminer presque sûrement le biais sur k_{eff} et de respecter dans tous les cas l'inégalité suivante :

$$\frac{1}{\text{nombre de neutrons par batch}} \ll \frac{1}{\sqrt{\text{nombre de batchs}}}. \tag{3.22}$$

L'accroissement significatif de la puissance des ordinateurs permettant d'envisager aujourd'hui le calcul de grands systèmes fissiles que sont les cœurs des réacteurs nucléaires de puissance conduit à revisiter la problématique de la convergence d'un calcul critique Monte Carlo sous ses différents aspects : l'atteinte de la stationnarité, le calcul sans biais des estimateurs des grandeurs physiques d'intérêt, l'accélération de la convergence statistique.

Nous rappelons dans la suite, brièvement, les différents tests mis au point d'une part pour détecter la stationnarité des sources de fission et suivre la convergence statistique du calcul.

L'accélération de la convergence – atteinte de la stationnarité des sources et convergence statistique une fois la stationnarité des sources atteinte –, qui est l'objet de la thèse proprement dite, est abordée dans la seconde partie du présent mémoire.

3.6 Tests de convergence

Nous présentons ici quelques tests de convergence généralement implémentés dans les codes Monte-Carlo en criticité. Certains de ces tests sont fondés sur la statistique (écart-type) de la simulation, tandis que d'autres sont fondés la notion d'entropie.

3.6.1 Tests classiques

Mesure de l'écart entre les résultats de batchs successifs

Une des méthodes de détection de la convergence consiste à mesurer l'écart relatif entre deux valeurs du k_{eff} ou de la distribution de sources à des étapes différentes et de comparer cet écart à un seuil fixé ϵ en dessous duquel on considère que la simulation a suffisamment convergé.

Afin d'éviter des problèmes de fausse convergence, cette méthode peut-être répétée sur un certain nombre de batchs avant de statuer sur la convergence effective du problème.

Écart-type relatif

Une autre méthode possible est de calculer l'écart-relatif $\sigma_{\%}$

$$\sigma_{\%} = \frac{\sigma_{\text{absolu}}}{m} \times 100, \tag{3.23}$$

où m correspond à la moyenne de la série de k_{eff} et σ_{absolu} à l'écart-type de la série considérée.

De la même manière que précédemment, la convergence peut être déclarée à partir d'un certain seuil atteint. De plus, en raison de la convergence de la méthode de Monte-Carlo, cet écart-type relatif ne peut descendre en dessous d'un certain seuil pour un nombre d'histoires simulées par batch.

Recherche de la longueur du transitoire

Une autre manière de procéder, implémentée dans TRIPOLI-4®, consiste à chercher le batch b, dans un intervalle de batchs donné, tel que $\frac{\sigma_{b-1}}{\sigma_{b-2}}$ et $\frac{\sigma_b}{\sigma_{b-1}}$ soient compris dans un intervalle de 1 ± 1 %. σ_b est ici l'écart-type de la série des b batchs considérés.

Typiquement, dans TRIPOLI-4®, cette recherche est effectuée dans l'intervalle $\left[0; \frac{n}{3}\right]$ où n correspond au nombre courant de batchs simulés.

Les $b-1$ batchs sont alors discardés. Les statistiques sont alors calculées à partir de ce batch b.

3.6.2 Entropie

Entropies de Shannon et de Boltzmann

La convergence du k_{eff} s'avère non suffisante quant au diagnostic de la longueur de la phase transitoire. En effet, le coefficient de multiplication effectif des neutrons tend à converger plus rapidement que la distribution de sources. Ceci est en partie dû au fait que le k_{eff} est une valeur intégrale tandis que la distribution de sources est une valeur locale (en terme d'espace des phases). La détection de la longueur du transitoire est un problème central pour les études de sûreté-criticité, influençant la qualité statistique des résultats ainsi que la durée de la simulation.

La notion d'entropie de Shannon est un concept qui vient de la théorie de l'information qui permet de caractériser la quantité moyenne d'information contenue dans un message [Sha48].

Une application de ce concept à la détection de la convergence des sources a été proposée par T. Ueki et F. Brown dans [UB02]. Les deux auteurs définissent l'entropie de Shannon H comme

$$H = -\sum_{i=1}^{B} S_i \ln\left(S_i\right), \tag{3.24}$$

où B correspond au nombre total de mailles en espace, i correspond au numéro de la maille et S_i correspond à la distribution de sources dans la maille i. S_i est renormalisée à 1.

La valeur maximale de l'entropie est atteinte quand

$$\forall i,\ S_i = \frac{1}{B}, \tag{3.25}$$

c'est-à-dire quand les sources sont uniformément réparties en espace. Le minimum est quant à lui atteint lorsque

$$S_i = 1 \tag{3.26}$$

et

$$S_{j\neq i} = 0, \tag{3.27}$$

c'est-à-dire quand toutes les sources sont concentrées dans une seule maille.

Il existe également un encadrement sur H [DPL+06] :

$$0 \leq H \leq \ln\left(B\right). \tag{3.28}$$

E. Dumonteil a reformulé ce diagnostic de la convergence directement à partir de l'entropie de Boltzmann, généralisant ainsi celui fondé sur l'entropie de Shannon, et l'a implémenté dans le code TRIPOLI-4® [DPL+06].

Entropie relative

La méthode dite de l'entropie relative est également connue sous le nom de « divergence de Kullback-Leibler ». Elle se fonde sur la définition d'une mesure de l'écart de deux distributions.

Diagnostic *a posteriori*

La méthode de l'entropie relative est une méthode, dans sa forme première, de mesure de stationnarité *a posteriori*, c'est-à-dire connaissant la distribution finale, ou à un état donné de la simulation, des sources [UB03a, UB03b].

Soient S_i et T_i deux distributions de sources discrétisées sur un maillage. La mesure D de Kullback-Leibler se définit ainsi :

$$D\left(S||T\right) = \sum_{i=1}^{B} S_i \ln\left(\frac{S_i}{T_i}\right). \tag{3.29}$$

T. Ueki et F. Brown montrent que cette distance n'est pas sensible au nombre de mailles [UB03a].

Diagnostic progressif

Ueki et Brown proposent également d'utiliser la mesure de Kullback-Leibler à des fins de diagnostic visuel en cours de simulation [UB03a].

On définit par $S^{(N)}$ la distribution de sources au batch N. Ce batch N est choisi arbitrairement, généralement dès les premières étapes du régime stationnaire. On peut tracer

$$D\left(S^{(k)}||S^{(N)}\right), \tag{3.30}$$

avec $k > N$.

3.6.3 Méthode du sandwich

La méthode du sandwich (*sandwich method*) [NY04] est une méthode de diagnostic de la convergence qui propose d'obtenir une limite inférieure et une limite supérieure pour le k_{eff} en jouant sur la distribution de sources initiale.

Schématiquement, cette méthode utilise deux types de sources initiales :

1. une source uniforme dans toute la géométrie ;
2. une source placée dans la (les) zone(s) qui contribue(nt) le plus au k_{eff}.

Dans le premier cas, le k_{eff} se trouve être sous-estimé et convergera, par la suite de la simulation, par valeurs inférieures vers le « *vrai* » k_{eff}. Dans le second cas, le k_{eff} se trouve être surestimé. Au fur et à mesure de la simulation, il convergera également vers le *vrai* k_{eff}, mais par valeurs supérieures.

Les auteurs proposent une démonstration de cette méthode dans la référence [NY04].

3.6.4 Ponts browniens

Y. Richet, dans [Ric06], présente une méthodologie de détection du régime transitoire initial à des fins de post-traitement. Sa méthodologie est fondée sur les « ponts browniens » tels que définis par L. Schruben dans [Sch82]. Y. Richet propose également d'autres types de ponts, tel que celui de Student.

L'idée du travail de Y. Richet [Ric06] est de proposer un test statistique permettant de vérifier l'hypothèse suivante : les k_{eff} batch à batch sont issus d'une loi normale. Son travail a été effectué dans le cadre du développement du code de simulation MORET de l'IRSN (section C).

3.6.5 Projection sur les vecteurs propres

Un autre test de convergence consiste à projeter la distribution de sources sur sa base de vecteurs propres. Puisqu'elle converge vers son fondamental (cf. section 3.3), la projection sur le premier vecteur propre atteint une valeur stationnaire maximale, tandis que la projection sur les vecteurs propres secondaires atteint une valeur stationnaire minimale [HLM08].

3.7 Conclusion

Une simulation Monte-Carlo en criticité peut être décomposée en deux phases distinctes : une phase de transition vers un équilibre de la population des neutrons et une phase de convergence statistique.

L'analyse qui en a été faite a mis en relief deux aspects spécifiques d'un calcul critique effectué par la méthode de Monte-Carlo :

- la détection de la stationnarité, c'est-à-dire, sur le plan pratique, l'identification du batch à partir duquel on peut considérer que la population neutronique a atteint un certain degré d'équilibre ;

– la détermination sans biais du k_{eff} et de la distribution de sources de neutrons, donc tenant compte des phénomènes de corrélations entre batchs inhérents à l'emploi de la méthode de la puissance itérée.

Nous avons succinctement indiqué les différentes stratégies préconisées par divers auteurs pour traiter au mieux ces deux particularités d'un calcul critique.

Une fois la stationnarité des sources atteinte, se pose le problème du temps de calcul requis pour déterminer le « vrai » k_{eff} et la « vraie » distribution des sources de neutrons avec la précision statistique souhaitée. C'est, par conséquent, la problématique de l'accélération d'une simulation Monte-Carlo qu'il convient maintenant d'aborder.

Chapitre 4

Techniques d'accélération des simulations Monte-Carlo

Sommaire

4.1 Généralités sur l'accélération d'un calcul Monte-Carlo 46
4.1.1 Problématique 46
4.1.2 Figure de mérite 46
4.1.3 Simulations biaisées 47
4.2 Techniques usuelles de réduction de la variance 50
4.2.1 Roulette russe 50
4.2.2 *Splitting* 51
4.2.3 Capture implicite 51
4.2.4 Collision forcée 52
4.2.5 Transformation exponentielle 53
4.2.6 Absorption continue 54
4.2.7 Fenêtre de poids 55
4.2.8 Échantillonnage stratifié 56
4.3 Techniques d'accélération dans les codes Monte-Carlo en criticité 56
4.3.1 Méthode de Woodcock (δ-*tracking*) 56
4.3.2 Méthode de Wielandt 58
4.3.3 Méthode de la *super histoire* 60
4.3.4 Matrice de fission 60
4.4 Conclusion 61

4.1 Généralités sur l'accélération d'un calcul Monte-Carlo

4.1.1 Problématique

La nature stochastique des simulations Monte-Carlo associe une variance à chaque estimateur d'une grandeur physique d'intérêt. Cette variance est inversement proportionnelle au nombre d'histoires N simulées. Afin de faire baisser cette variance, il est naturel d'augmenter le nombre d'histoires. D'un autre côté, le temps de simulation est directement proportionnel à N.

Les techniques d'accélération de la simulation ou de réduction de la variance ont pour but de réduire la variance pour un temps de simulation donné ou de diminuer le temps de simulation pour une variance donnée.

L'efficacité d'une technique d'accélération est mesurée par une grandeur appelée « figure de mérite » qui combine variance et durée de simulation.

Dans son principe, une technique de réduction de la variance consiste à modifier les lois naturelles de l'interaction particule-matière afin de favoriser les histoires qui contribuent le plus au résultat cherché. La simulation qui en résulte est qualifiée de modifiée ou de biaisée. Ce dernier qualificatif, fréquemment employé, prête à confusion dans la mesure où une simulation biaisée n'induit aucun biais sur le résultat.

L'objectif est de trouver la technique d'accélération « la plus optimale ». Après avoir précisé la définition de la figure de mérite, nous rappelons le fondement théorique des techniques de réduction de la variance, ainsi que l'existence d'un jeu idéal, le « jeu à variance nulle », dans l'optique de souligner l'intérêt de la connaissance du flux adjoint. Sont passées en revue les techniques de réduction de la variance couramment utilisées dans les codes de Monte-Carlo, puis des techniques d'accélération spécialement dédiées au calcul critique.

4.1.2 Figure de mérite

Afin d'estimer la performance de telle ou telle méthode de réduction de la variance ou d'accélération de la simulation, on définit un indicateur qui prend en compte les deux facteurs visés par de telles méthodes : le temps de simulation t et la variance σ^2.

Cet indicateur est appelé « figure de mérite » (*Figure of Merit* en anglais),

qu'on note FoM. Cet estimateur est défini par [GW92] comme :

$$\text{FoM} = \frac{1}{t\sigma^2}, \tag{4.1}$$

où σ est à l'écart-type relatif associé à la grandeur d'intérêt calculée.

Une technique d'accélération est d'autant plus efficace que la figure de mérite est plus élevée, c'est-à-dire, par exemple, que le temps de simulation est plus court à variance fixée, ou bien que la variance est plus petite à temps de simulation fixé.

4.1.3 Simulations biaisées

Principe

Les simulations biaisées reposent sur la modification artificielle de l'échantillonnage des lois physiques naturelles auxquelles sont soumis les neutrons (notées p dans la section suivante).

Pour en exposer le principe, considérons le calcul de l'espérance mathématique $\mathbb{E}$ d'une grandeur f dépendant de la variable aléatoire x :

$$\mathbb{E}_p(f) = \int_a^b f(x)p(x)dx, \tag{4.2}$$

avec $p(x)$ la densité de probabilité de x.

On se propose de modifier l'échantillonnage de f en substituant à $p(x)$ une densité de probabilité arbitraire $p^*(x)$.

Posons :

$$w(x) = \frac{p(x)}{p^*(x)}. \tag{4.3}$$

Définissons :

$$\begin{aligned} f^*(x) &= w(x)f(x), \\ &= f(x)\frac{p(x)}{p^*(x)}. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Montrons que l'on a bien :

$$\mathbb{E}_{p^*}(f^*) = \mathbb{E}_p(f). \tag{4.5}$$

En effet :

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{p^*}(f^*) &= \int_a^b f^*(x)p^*(x)dx, \\
&= \int_a^b w(x)f(x)p^*(x)dx, \\
&= \int_a^b f(x)\frac{p(x)}{p^*(x)}p^*(x)dx, \\
&= \int_a^b f(x)p(x)dx, \\
&= \mathbb{E}_p(f). \qquad (4.6)
\end{aligned}$$

Cela signifie que l'on peut calculer l'espérance mathématique de f avec une autre densité que la densité originelle pourvu de multiplier l'estimateur naturel de f par le ration, $w(x)$, de la densité naturelle $p(x)$ à la densité biaisée $p^*(x)$.

On démontre cependant que les variances $\mathbb{V}(f)$ et $\mathbb{V}(f^*)$ associées respectivement aux deux estimateurs de f diffèrent :

$$\mathbb{V}(f^*) \neq \mathbb{V}(f). \qquad (4.7)$$

En effet :

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}(f^*) &= \mathbb{E}_{p^*}\left(f^{*2}\right) - \mathbb{E}_{p^*}(f^*)^2, \\
&= \int_a^b f^{*2}(x)p^*(x)dx - \left(\int_a^b f^*(x)p^*(x)dx\right)^2, \\
&= \int_a^b f^2(x)\frac{p^2(x)}{p^{*2}(x)}p^*(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \int_a^b \frac{p(x)}{p^*(x)}f^2(x)p(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f), \qquad (4.8) \\
&\neq \mathbb{V}(f). \qquad (4.9)
\end{aligned}$$

car

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}(f) &= \mathbb{E}_p\left(f^2\right) - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \int_a^b f^2(x)p(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f). \qquad (4.10)
\end{aligned}$$

On constate que dans la formule (4.8), si $\frac{p(x)}{p^*(x)} < 1$ dans les régions d'intérêt, on a

$$\mathbb{V}(f^*) < \mathbb{V}(f). \qquad (4.11)$$

En contrepartie, puisque les densités de probabilité sont normées à 1, il existe des régions (qui ne sont pas les régions d'intérêt) où $\frac{p(x)}{p^*(x)} > 1$ et donc

$$\mathbb{V}(f^*) > \mathbb{V}(f). \tag{4.12}$$

En augmentant l'échantillonnage dans les régions où la contribution au résultat est importante (région d'intérêt), on arrive à réduire la variance sur l'estimateur calculé.

En conclusion, par une augmentation de la variance de certaines régions, on peut réduire celle dans les régions d'intérêt.

Existence d'un jeu à variance nulle

On se propose maintenant de reprendre les calculs précédents avec la densité de probabilité biaisée $p^*(x)$ suivante :

$$p^*(x) = \frac{f(x)p(x)}{\mathbb{E}_p(f)}, \tag{4.13}$$

en considérant que $\mathbb{E}_p(f) \neq 0$ et p^* normalisée de façon appropriée. On a

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}(f^*) &= \mathbb{E}_{p^*}\left(f^{*2}\right) - \mathbb{E}_{p^*}\left(f^*\right)^2, \\
&= \int_a^b f^{*2}(x)p^*(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \int_a^b f^2(x)w^2(x)p^*(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \int_a^b f^2(x)\frac{p^2(x)}{p^{2*}(x)}p^*(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \int_a^b f^2(x)\frac{p^2(x)}{p^*(x)}dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \int_a^b f^2(x)\frac{p^2(x)\mathbb{E}_p(f)}{f(x)p(x)}dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \mathbb{E}_p(f)\int_a^b f(x)p(x)dx - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= \mathbb{E}_p^2(f) - \mathbb{E}_p^2(f), \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

On vient donc de trouver une densité de probabilité pour laquelle la variance est nulle. On remarque toutefois qu'il est nécessaire de connaître le résultat par avance.

En appliquant ce résultat théorique à la propagation des neutrons, on peut entreprendre la recherche des densités de probabilité qui conduisent au

jeu à variance nulle. Des auteurs ont montré que ces densités de probabilité optimales doivent être construites à l'aide du flux adjoint, solution de l'équation du transport adjointe que l'on veut résoudre [BBD+, Hoo77, Hoo08]. Le flux adjoint apparaît comme la fonction d'importance idéale dans le cadre de l'approche d'accélération de la simulation dite « biaisage par carte d'importance » dont il sera question au chapitre 7.

4.2 Techniques usuelles de réduction de la variance

4.2.1 Roulette russe

La roulette russe [SG08, LK91] est une technique de réduction de variance visant à limiter la durée de vie des particules contribuant peu au résultat final et, au contraire, à prolonger celle des particules y contribuant le plus.

Le principe de la méthode est le suivant : dès qu'une particule de poids w atteint un certain poids seuil w_{roulette}, c'est-à-dire $w \leq w_{\text{roulette}}$, un tirage aléatoire est effectué selon une loi uniforme entre 0 et 1. On note ξ le nombre aléatoire tiré. La probabilité de survie de la particule à la roulette russe est la suivante :

$$p_{\text{survie}} = \frac{w}{w_{\text{survie}}}, \tag{4.15}$$

où w_{survie} correspond au poids de survie de la particule subissant une roulette.

Si $\xi < p_{\text{survie}}$, alors la particule survie à la roulette russe et le poids de la particule devient w_{survie}, sinon, le poids de la particule est fixé à 0 et la particule est tuée.

Le poids moyen des particules subissant une roulette russe reste inchangé, en effet

$$\begin{aligned} \bar{w} &= \frac{w}{w_{\text{survie}}} w_{\text{survie}} + \left(1 - \frac{w}{w_{\text{survie}}}\right) 0, \\ &= w. \end{aligned} \tag{4.16}$$

Le poids de survie des particules, w_{survie}, peut-être ajusté en fonction de différents éléments tels que l'énergie de la particule, sa position ou encore sa direction.

Cette technique augmente systématiquement la variance en arrêtant prématurément la vie de certaines particules qui auraient pu contribuer au résultat. Toutefois, elle permet d'améliorer la FoM en diminuant le temps de calcul, les particules présentant peu d'intérêt cessant d'être suivies en dessous d'un certain poids.

Ce procédé a lieu après que la particule a interagi. Ce procédé peut toutefois avoir lieu à n'importe quel moment de la vie de la particule.

La roulette russe est généralement couplée à d'autres techniques de réduction de la variance telles que le *splitting*, la capture implicite ou encore la transformation exponentielle.

4.2.2 *Splitting*

Le *splitting* [KH51, SG08, LK91] (fractionnement) est une technique de réduction de la variance qui consiste, partant d'un état donné, à davantage explorer l'espace des phases des régions d'intérêt pour la particule sélectionnée. Cette technique a été introduite dès les années 1950 par Kahn et Harris.

Il s'agit concrètement de « fractionner » une particule de poids w en n particules de poids $\frac{w}{n}$. À l'instar de la méthode de la roulette russe, un poids seuil w_{seuil} est défini, à partir duquel la particule en question subira le *splitting*, c'est-à-dire lorsque $w \geq w_{\text{seuil}}$. Le poids est conservé exactement :

$$w = n\frac{w}{n}. \tag{4.17}$$

Du fait de la meilleure exploration de l'espace des phases dans les zones d'intérêt, la variance est diminuée.

L'inconvénient de cette méthode est d'augmenter le nombre de particules à suivre, ce qui se traduit par une augmentation du temps de simulation. Toutefois, on peut espérer que la réduction de la variance permette un gain sur la FoM.

4.2.3 Capture implicite

La capture implicite [LK91] est une méthode de réduction de la variance visant à prolonger artificiellement la vie des neutrons. Cette méthode permet d'éviter la simulation explicite des absorptions. Le poids de la particule est alors corrigé pour tenir compte du phénomène d'absorption. Les particules peuvent donc vivre plus longtemps. Cette méthode présente un grand intérêt en particulier pour les milieux absorbants qui ont tendance à capturer le neutron avant que celui-ci ait eu le temps de se déplacer dans la géométrie et d'atteindre potentiellement une zone d'intérêt.

Lors d'une collision, le poids de la particule est multiplié par la probabilité de non absorption p_{nabs} :

$$w' = wp_{\text{nabs}} = w\left(1 - \frac{\Sigma_a}{\Sigma_t}\right). \tag{4.18}$$

On peut constater que, comme la durée de vie de la particule suivie est augmentée, la variance devrait logiquement diminuer (on peut accumuler davantage de statistiques). Toutefois, cette hausse de durée de vie augmente logiquement le temps de simulation. Cette méthode n'implique pas automatiquement un gain sur la FoM.

4.2.4 Collision forcée

La technique de la collision forcée [CE59, AWNS11] (*forced collision* en anglais) est une méthode de réduction de la variance utilisée principalement dans les milieux peu susceptibles de voir des collisions se produire. Le but de cette technique est donc d'augmenter le nombre de collisions dans ces zones afin d'obtenir une meilleure statistique.

Pour ce faire, il convient de définir une zone dans laquelle cette technique de la collision forcée sera appliquée. Un neutron, de poids statistique w, entrant dans la zone définie, est « *splitté* » en deux particules : une particule sans et une particule avec collision. La première partie se voit attribuer le poids suivant :

$$w_{\text{sans}} = we^{-\Sigma_t d}, \tag{4.19}$$

où $e^{-\Sigma_t d}$ correspond à la probabilité de traverser la zone de collision forcée, de dimension d, sans effectuer de collision. La seconde particule, la particule qui effectuera une collision, se voit attribuer le poids suivant :

$$w_{\text{avec}} = w\left(1 - e^{-\Sigma_t d}\right). \tag{4.20}$$

On montre que

$$w_{\text{sans}} + w_{\text{avec}} = w, \tag{4.21}$$

le poids original de la particule est conservé.

Dans le cas de la collision forcée, la collision doit obligatoirement avoir lieu dans la zone définie (voir figure 4.1) :

$$0 \leq l \leq d. \tag{4.22}$$

La densité de probabilité d'échantillonnage d'un trajet de longueur l s'écrit alors :

$$p\left(l\right) = \frac{\Sigma_t e^{-\Sigma_t l}}{1 - e^{-\Sigma_t d}}. \tag{4.23}$$

Cette technique de réduction de variance augmentant le nombre de particules à suivre, il est nécessaire de la coupler à une technique de roulette russe afin de limiter le temps de simulation pour obtenir un gain sur la FoM.

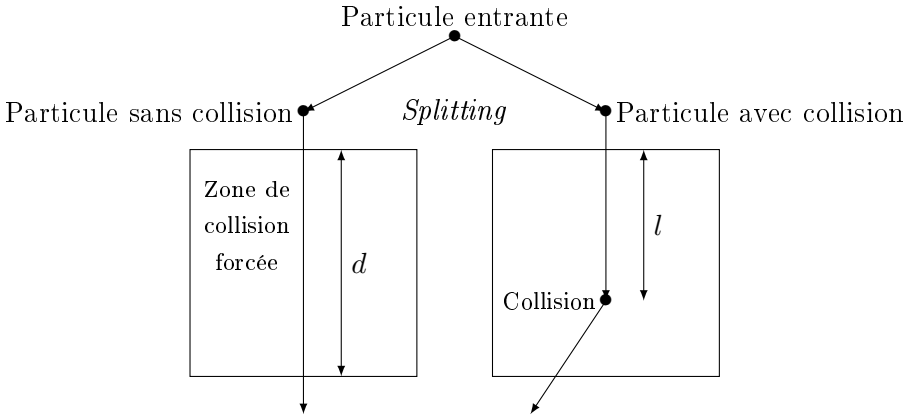


FIGURE 4.1 – Schéma de la méthode de la collision forcée.

4.2.5 Transformation exponentielle

La transformation exponentielle [Cla66] (*exponential transform* en anglais) est une technique également nommée *path length stretching* (allongement de la distance de vol) qui a pour effet de modifier le vol de la particule pour la diriger vers une zone d'intérêt par modification de la section efficace totale. Cette méthode est illustrée par la figure 4.2.

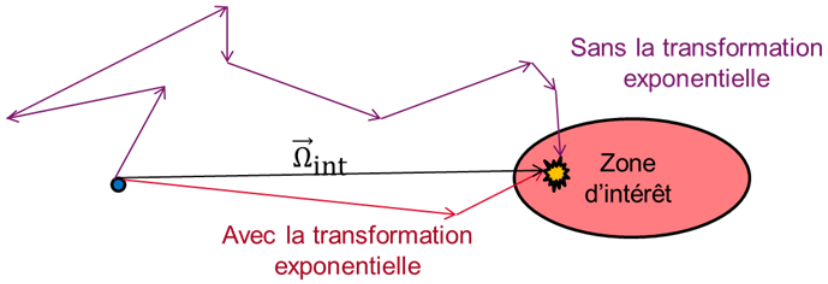


FIGURE 4.2 – Schéma de principe de la méthode de la transformation exponentielle. $\vec{\Omega}_{\text{int}}$ représente la direction d'intérêt.

Pour ce faire, la section efficace totale prend la forme suivante :

$$\Sigma_t^* (\vec{r},E) = \Sigma_t (\vec{r},E) - k\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega}, \tag{4.24}$$

où $\vec{\Omega}_{\text{int}}$ correspond à la direction d'intérêt qui pointe vers la région d'intérêt et k un paramètre de biaisage réel positif.

Nous verrons au chapitre 7 que $\vec{\Omega}_{\text{int}}$ et k se déduisent de la « carte d'importance » utilisée pour la simulation biaisée.

On remarque que quand la particule se dirige vers la zone d'intérêt, $\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega}$ est positif et donc que $\Sigma_t^* < \Sigma_t$. La probabilité d'interaction de la particule diminue. La particule peut donc parcourir une plus grande distance en direction de la zone d'intérêt. *A contrario*, quand la particule se dirige dans la direction opposée à la zone d'intérêt, $\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega}$ est négatif et la section totale Σ_t^* devient plus grande que la section non biaisée, diminuant la probabilité qu'a la particule d'avoir un grand trajet dans une direction opposée à la direction d'intérêt.

La distance x à laquelle aura lieu la prochaine collision est donc maintenant échantillonnée selon

$$p^*(x) = \Sigma_t^* e^{-\Sigma_t^* x}. \tag{4.25}$$

Afin de ne pas biaiser le poids de la particule w, il est nécessaire d'appliquer une correction au poids du neutron. On a :

$$wp(x) = w^* p^*(x), \tag{4.26}$$

donc

$$\begin{aligned} w^* &= w\frac{p(x)}{p^*(x)}, \\ &= w\frac{\Sigma_t e^{-\Sigma_t x}}{\Sigma_t^* e^{-\Sigma_t^* x}}, \end{aligned} \tag{4.27}$$

et finalement

$$w^* = w\frac{e^{(\Sigma_t^* - \Sigma_t)x}}{1 - \frac{k}{\Sigma_t}\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega}}. \tag{4.28}$$

4.2.6 Absorption continue

Il existe une variante de la méthode de la transformation exponentielle, disponible dans le code MCNP et issue des méthodes Monte-Carlo pour l'astrophysique [Tea03a, Wol08, Tin, ABO+12].

Le code MCNP utilise ainsi la forme suivante pour la section efficace totale biaisée :

$$\Sigma_t^*(\vec{r},E) = \Sigma_t(\vec{r},E)\left(1 - k'\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega}\right). \tag{4.29}$$

où k est un réel positif et $\vec{\Omega}_{\text{int}}$ la direction d'intérêt.

Le principe de cette méthode est de modifier l'échantillonnage du vol de la particule. Pour ce faire, on part de l'équation (4.24) et on considère le cas où

$$k = \Sigma_a \text{ et} \tag{4.30}$$

$$\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega} = 1. \tag{4.31}$$

La deuxième condition impose de diriger directement la particule dans la direction d'intérêt. On obtient donc :

$$\Sigma_t^* = \Sigma_s. \tag{4.32}$$

On n'échantillonne donc plus la distance à la prochaine collision mais la distance à la prochaine diffusion.

Afin de prendre en compte le biais introduit, il est nécessaire d'appliquer un facteur correctif au poids, comme nous l'avons fait précédemment avec l'équation (4.26). On montre immédiatement que :

$$w^* = w\frac{\Sigma_t}{\Sigma_s}e^{-\Sigma_a l}. \tag{4.33}$$

Cette méthode peut s'avérer utile dans les milieux hautement absorbants où la majorité des collisions sont des absorptions (mettant fin à la vie des particules).

4.2.7 Fenêtre de poids

La méthode de la fenêtre de poids, en anglais *weight windows* est une technique de réduction de variance agissant sur le poids statistique des particules en prenant en compte la position et l'énergie de ces dernières [BH84, Boo85].

Cette technique est fondamentalement une forme de roulette russe et de *splitting* combinés. Un maillage spatial et énergétique est appliqué sur la géométrie considérée. Deux bornes sont définies en terme de poids pour chaque cellule. Si le poids de la particule est inférieur à la borne inférieure, la particule subit une roulette russe selon les modalités précédemment expliquées et de telle manière que le poids de survie soit compris dans la fenêtre. Dans le cas où le poids de la particule est supérieur à la borne supérieure, la particule subit un *splitting*, toujours selon les modalités précédemment présentées, de manière à ce que tous les fragments de la particule initiale aient un poids compatible avec la fenêtre.

Les différences entre cette méthode et celles de la roulette russe ou du splitting sont tout d'abord qu'elle prend en compte la dépendance énergétique, les bornes (seuils) sont définies de manière absolue et non de manière relative.

Comme la transformation exponentielle, cette méthode suppose d'avoir défini une « carte d'importance » sur l'espace des phases.

4.2.8 Échantillonnage stratifié

L'échantillonnage stratifié, ou encore méthode des quota (*quota sampling* en anglais), est une méthode de réduction de la variance qui consiste à diviser le domaine d'intégration en plusieurs sous-domaines [LK91]. Chaque sous-domaine est traité de manière classique par la méthode de Monte-Carlo puis les résultats de tous les sous-domaines sont additionnés pour donner le résultat final.

Cette méthode peut permettre d'échantillonner des zones de l'espace des phases qui pourraient s'avérer sous-représentées par la méthode classique.

Une des précautions à prendre avec une telle technique est de bien choisir les sous-domaines afin d'éviter de sur-échantillonner des zones de faible importance.

L'échantillonnage stratifié est par exemple utilisé à l'issue d'un *splitting*. Au lieu d'échantillonner indépendamment le transport de chacun des neutrons produits, l'échantillonnage stratifié répartit les lieux de prochaine collision de chacun des n neutrons issus du *splitting* dans n intervalles distincts, le long du trajet optique partant du point de collision courant.

4.3 Techniques d'accélération dans les codes Monte-Carlo en criticité

4.3.1 Méthode de Woodcock (δ-*tracking*)

La méthode de Woodcock, ou δ-*tracking*, est une méthode de type « rejet » utilisée pour réduire le temps de simulation de transport des particules suivies en ayant recours à des sections efficaces macroscopiques de diffusion virtuelle [Woo65, LK91, Lep10]. Cette méthode vise donc à améliorer la FoM en jouant sur le temps de simulation.

L'échantillonnage du vol des particules est dépendant de la section efficace macroscopique totale Σ_{tm} du milieu m traversé. Si l est la distance

parcourue, on a :

$$l = -\frac{\ln \xi}{\Sigma_{tm}}, \tag{4.34}$$

où ξ représente un nombre aléatoire tiré uniformément entre 0 et 1. Lorsqu'un neutron se retrouve à devoir traverser une interface entre deux milieux différents, le neutron est alors transporté jusqu'à cette interface, puis son vol est de nouveau calculé en prenant en compte les spécificités de composition de ce nouveau milieu. Dans les faits, chaque transport de neutron nécessite de déterminer si la particule va ou non traverser une frontière entre deux milieux et le cas échéant la déplacer jusqu'à l'interface pour calculer à nouveau son vol.

Afin d'éviter ces calculs géométriques qui peuvent s'avérer coûteux en ressources informatiques, Woodcock propose d'homogénéiser toutes les sections efficaces macroscopiques totales des matériaux en introduisant pour chaque matériau une section efficace macroscopique de diffusion virtuelle. Ainsi, le tirage du vol d'une particule ne nécessitera plus de vérifier la traversée d'interface ni d'effectuer de nouvel échantillonnage à la frontière [Lep10].

Ces sections efficaces virtuelles vont toutefois avoir deux contraintes : la première, de ne pas modifier l'énergie de la particule lors d'une collision, la seconde, de préserver sa direction, dans le but de ne pas introduire de biais.

Dans les faits, on définit une nouvelle section efficace macroscopique totale dans le milieu m, Σ'_{tm}, telle que :

$$\Sigma'_{tm} = \Sigma_{tm} + \Sigma_{\text{virtuelle}m}. \tag{4.35}$$

Il est possible d'introduire un majorant à toutes ces nouvelles sections macroscopiques totales, Σ_{majorant}, afin de ne pas augmenter trop sensiblement le nombre de collisions. Ce majorant peut être par exemple déterminé en le rendant égal à la plus grande section efficace macroscopique totale du milieu. Chaque nouvelle section efficace totale sera alors égale à ce majorant.

Lorsque qu'une collision a lieu, on utilise la méthode des rejets pour déterminer le type de collision : réelle ou virtuelle. La collision est acceptée comme réelle avec une probabilité

$$p_{\text{collision}} = \frac{\Sigma_{tm}}{\Sigma_{\text{majorant}}}. \tag{4.36}$$

Dans le cas d'un rejet, la collision est alors considérée comme virtuelle et un nouveau trajet est échantillonné.

J. Lepannën, dans son article [Lep10], liste les avantages et les inconvénients de la méthode de Woodcock. Pour ce qui est de ses avantages, le suivi des neutrons se trouve être accéléré. L'effet recherché se manifeste davantage dans les grands systèmes inhomogènes. Du point de vue des limitations de la méthode, l'auteur cite l'impossibilité d'avoir recours aux estimateurs TRACK. En effet, ces derniers se retrouvent non valides puisque le vol des neutrons peut avoir lieu à travers plusieurs milieux sans que les discontinuités physiques ne soient prises en compte. Il est donc nécessaire d'avoir recours à l'estimateur COLL, mais qui peut être affecté par un système à faible densité. Une autre limitation vient des milieux très inhomogènes et notamment ceux pour lesquels un matériau fortement absorbeur, même particulièrement localisé, va influencer grandement le majorant. Les collisions ayant lieu en dehors de ce matériau auront tendance à être très souvent rejetées. Le temps de simulation sera alors consacré à ré-échantillonner des vols sans engranger de statistiques.

J. Lepannën présente quelques résultats d'utilisation de cette méthode dans [Lep10].

4.3.2 Méthode de Wielandt

La méthode de Wielandt ou méthode de déflation est une méthode d'accélération connue en algèbre linéaire appliquée au calcul du k_{eff} des cœurs de réacteur. Cette méthode est réputée conduire à une convergence rapide et stable pour des systèmes ayant un rapport de dominance proche de l'unité.

L'utilisation de la méthode de Wielandt dans une simulation neutronique Monte-Carlo consiste à intensifier les interactions entre des volumes éloignés et à réduire les corrélations entre les différents batchs en suivant les neutrons fils dans le batch en cours [Mdta].

On se propose d'écrire l'équation du transport ainsi :

$$L\psi = H\psi + \frac{1}{k_{\text{eff}}} F\psi. \tag{4.37}$$

On introduit le paramètre k_e en soustrayant de chaque côté par un terme de sources de fissions fixes :

$$\left(L - \frac{1}{k_e}F\right)\psi = H\psi + \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} - \frac{1}{k_e}\right)F\psi. \tag{4.38}$$

k_e doit être choisi de manière à être plus grand que le k_{eff}. Cette équation possède les mêmes vecteurs propres que l'équation (4.37). Le terme en $\frac{1}{k_e}F\phi$, à droite, correspond à la source de neutrons traitée dans le batch considéré. Ce même terme, à gauche, correspond, lui, aux neutrons qui seront stockés

pour le batch suivant. En utilisant la méthode de la puissance itérée pour calculer le k_{eff} biaisé du système, k_b, on obtient [Bro07] :

$$k_b = \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} - \frac{1}{k_e}\right)^{-1}, \tag{4.39}$$

de la même manière, on calcule les valeurs propres suivantes :

$$k_{bn} = \left(\frac{1}{k_n} - \frac{1}{k_e}\right)^{-1}. \tag{4.40}$$

Le rapport de dominance de la simulation biaisée ρ_b s'écrit alors :

$$\rho_b = \frac{k_{b1}}{k_{b0}} = \frac{\left(\frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_e}\right)^{-1}}{\left(\frac{1}{k_0} - \frac{1}{k_e}\right)^{-1}} = \frac{\frac{1}{k_0} - \frac{1}{k_e}}{\frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_e}}. \tag{4.41}$$

On introduit $\rho = \frac{k_1}{k_0}$ le rapport de dominance des vraies valeurs propres :

$$\rho_b = \frac{k_1}{k_0}\frac{\frac{k_e - k_0}{k_0 k_e}}{\frac{k_e - k_1}{k_1 k_e}}\rho = \frac{k_e - k_0}{k_e - k_1}\rho. \tag{4.42}$$

On constate donc que si $k_e > k_0$, $\rho_b < \rho$, ce qui augmente la vitesse de convergence de la simulation car on s'est ramené à résoudre un problème avec un rapport de dominance $\rho' = \frac{k_e - k_0}{k_e - k_1}\rho$ qui est inférieur à ρ puisque $\frac{k_e - k_0}{k_e - k_1} < 1$ ($k_0 > k_1$).

Dans cette méthode, chaque neutron émis à partir d'une fission sera suivi au cours du même batch. Ces neutrons naîtront avec une probabilité

$$\frac{1}{k_e}\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t}. \tag{4.43}$$

Puisque k_e est choisi de telle sorte à être supérieur au k_{eff}, le nombre moyen de neutrons émis est inférieur dans le cas de la simulation biaisée à celui de la simulation non-biaisée. Si ces neutrons causent à leur tour des fissions, les neutrons émis seront suivis au cours de ce même batch. Toutes les particules sont donc suivies jusqu'à leur « mort » par fuite, par roulette russe ou tout autre processus terminant leur suivi. Ceci a pour effet de davantage explorer l'espace des phases qu'une simulation classique [Duf07].

On constate que cette méthode augmente intrinsèquement le temps de simulation en suivant plus de particules. Toutefois, la convergence des sources se trouve accélérée. L'effet sur la FoM est donc discutable.

4.3.3 Méthode de la *super histoire*

Cette méthode vise à réduire le biais en modifiant la renormalisation des sources [BG86].

Contrairement à une simulation classique où un batch s'identifie à une génération de neutrons, cette méthode requiert de simuler M générations par batch. Chaque génération au sein d'un batch est renormalisée par le k_{eff} afin d'éviter un accroissement exponentiel de la population. À l'issue de la simulation de ces M générations, un nouveau batch est initialisé par les sources générées lors de la dernière génération du batch précédent. Le poids de chaque batch est maintenu constant au cours de la simulation [Duf07, Mdtb].

Cette méthode permet donc de limiter les corrélations inter-batchs et ainsi de réduire le biais statistique de la méthode de l'itération de la puissance.

4.3.4 Matrice de fission

La méthode de la matrice de fission, présentée plus en détail dans la section 6.1, est une technique qui permet d'obtenir, dès les premiers batchs, des informations suffisamment exploitables sur les premières valeurs propres.

Il est alors possible d'utiliser ces informations pour accélérer, par exemple, le calcul de la distribution de sources. Il est aussi possible, comme nous le présenterons par la suite, d'utiliser ces informations afin de calculer le flux adjoint (voir la section 7.2) pour les besoins de l'approche de l'accélération du calcul par carte d'importance.

J. Dufek, dans [Duf07], présente trois méthodes d'accélération du calcul des sources par la méthode de la matrice de fission.

La première méthode, proposée par Carter et McCormick, consiste à modifier le poids des fissions de neutrons dans le volume j au batch n, $w_j^{(n)}$, par les distributions de sources des batchs n et $n-1$ calculées par la matrice de fission :

$$w_j^{(n)} \leftarrow \frac{s_j^{(n)}}{s_j^{(n-1)}} w_j^{(n)}. \tag{4.44}$$

La deuxième méthode, proposée par Kitada et Takeda, consiste également à modifier le poids de neutrons dans un volume donné, le volume j, au

batch n, de la manière suivante :

$$w_j^{(n)} \leftarrow \frac{s_j^{(n)}}{s_{j\ \mathrm{MC}}^{(n)}} w_j^{(n)}, \tag{4.45}$$

où $s_{j\ \mathrm{MC}}^{(n)}$ correspond à la source, dans le volume j, calculée de manière « classique » par le code.

L'inconvénient de ces deux méthodes réside dans la convergence de la distribution de sources et dans les fortes oscillations potentielles qui peuvent apparaître dans le premier vecteur propre de la matrice de fission.

La troisième méthode, présentée et proposée par Dufek, consiste, elle, à échantillonner le même nombre de neutrons de fissions dans chaque volume. En effet, Dufek part du constat que les instabilités, les bruits présents dans la matrice de fissions, proviennent de la différence du nombre de neutrons de fissions échantillonnés entre les différentes régions, ce qui cause de grandes différences de convergence entre les différents volumes.

4.4 Conclusion

Dans ce qui précède, nous avons mis en place l'ensemble des définitions, concepts, équations et techniques de simulations auxquels il sera fait appel dans la seconde partie de ce mémoire.

Il convient de rappeler que le but poursuivi est d'accéder, à l'aide de la méthode de Monte-Carlo, au facteur de multiplication des neutrons ainsi qu'à leur distribution dans un système fissile quelconque, en maximisant la figure de mérite de la simulation. Dans la suite, nous développons une méthodologie d'accélération de la simulation en configuration critique qui s'appuie à la fois sur le calcul de la matrice de fission et sur la transformation exponentielle. La matrice de fission y jouera un double rôle : comme accélératrice de la convergence en phase transitoire notamment d'une part et d'autre part comme moyen de calcul du flux adjoint, exploité par la technique de la transformation exponentielle.

Deuxième partie

Accélération de la convergence dans le code TRIPOLI-4®

Introduction

Dans le présent travail nous proposons d'utiliser la « matrice de fission » évoquée précédemment pour accélérer la convergence d'un calcul critique réalisé par la méthode de Monte-Carlo.

Ce travail préconise d'utiliser la matrice de fission dans un double emploi :

a pour calculer le facteur de multiplication effectif des neutrons (cf. chapitre 1). Nous montrerons que cette stratégie améliore significativement la figure de mérite associée à la détermination du k_{eff}, constituant par ce fait un moyen d'accélération du calcul critique stochastique. Nous proposerons également l'application inédite, dans ce cadre, d'une méthode d'estimation du k_{eff} et de sa variance ;

b pour calculer le flux adjoint devant servir à accélérer le calcul Monte-Carlo au sein d'un batch correspondant à une itération donnée. Pour cela,
   - nous nous appuierons sur la théorie du « jeu à variance nulle » (cf. annexe B) pour l'étude d'une configuration critique. Nous verrons que la réalisation de ce jeu idéal suppose la détermination du flux adjoint des neutrons, solution de l'équation de Boltzmann adjointe ;
   - nous montrerons comment le flux adjoint peut être calculé à l'aide de la matrice de fission ;
   - nous expliciterons le formalisme sur lequel repose la technique d'accélération choisie, à savoir la « technique de la transformation exponentielle ». Celle-ci utilise une « fonction d'importance » qui discrimine l'importance des différents points de l'espace des phases vis-à-vis de la grandeur physique à calculer (*i.e.* le k_{eff}). L'idée est donc de construire une fonction d'importance à l'aide ou inspirée du flux adjoint et d'en déduire de nouvelles lois d'échantillonnage des événements subis par les neutrons. Ces nouvelles lois diffèrent donc des lois naturelles construites directement à partir des sections efficaces d'interaction neutron-matière. On montre, en effet, que la mise en œuvre de ces nouvelles lois permet, dans son principe, de réduire la variance associée à la grandeur physique recherchée, car elle privilégie la simulation des histoires des neutrons qui contribuent significativement au résultat (optimisation de la FoM).

C'est cette démarche qui a été entreprise dans le cadre de la thèse, sans cependant avoir pu être menée à son terme ultime. Nous exposons dans ce qui suit les différentes étapes qui ont été franchies, à savoir :

1. le calcul théorique du k_{eff} dans un milieu homogène infini en hypothèse monocinétique ayant pour but d'identifier et de mieux comprendre les différents processus à l'œuvre au cours de la simulation d'un batch d'un calcul critique. Un modèle analytique de l'un des estimateurs principaux du k_{eff} utilisé dans TRIPOLI-4® a été implémenté afin d'étudier

la distribution de source dans le but d'obtenir une variance analytique et ainsi pouvoir *in fine* l'optimiser. Cette étude nous a fourni l'opportunité d'examiner de manière détaillée les divers et délicats mécanismes de régulation de la population des neutrons au cours d'une simulation Monte Carlo ;

2. le calcul du k_{eff} avec mise en œuvre de la matrice de fission dans diverses configurations afin, d'une part, de valider l'implémentation qui en a été faite dans le code Monte Carlo TRIPOLI-4®, et d'autre part, d'en démontrer l'efficacité en termes de FoM ;
3. la mise en place du formalisme d'accélération utilisant conjointement la technique de la transformation exponentielle et la matrice de fission pour construire la fonction d'importance requise par la simulation d'un jeu optimal.

Chapitre 5

Calcul théorique du k_{eff} en milieu homogène infini dans le cas monocinétique

Sommaire

5.1 Notations **68**
5.2 Nombre de collisions **68**
5.2.1 Nombre de collisions avant la première roulette russe 68
5.2.2 Nombre de collisions au sein d'un « cycle » de roulette russe 69
5.3 Poids avant la roulette russe **69**
5.3.1 Poids de déclenchement de la première roulette russe 69
5.3.2 Poids de déclenchement des roulettes russes suivantes 70
5.4 Nombre de roulettes russes **70**
5.5 Poids de fission **71**
5.5.1 Nombre de neutrons générés 71
5.5.2 Poids de fission généré avant la première roulette russe 72
5.5.3 Poids de fission généré au sein d'un cycle de roulette russe 73
5.5.4 Poids total des neutrons de fission 73
5.6 KSTEP **74**
5.7 Temps de simulation t **74**
5.8 *FoM* **75**
5.9 Calcul de la distribution de sources au batch suivant **75**
5.10 Exemple **75**
5.11 Optimisation **77**
5.12 Conclusion **78**

Nous proposons, dans ce chapitre, de calculer le k_{eff} via l'estimateur « KSTEP » du code TRIPOLI-4® défini dans la section 2.6.4 , ainsi que sa variance, dans le cas d'un milieu homogène infini et dans le cas monocinétique. Ces hypothèses permettent de s'affranchir des dimensions énergétiques et spatiales afin de se concentrer sur les mécanismes à l'œuvre concernant le réglage des poids statistiques des neutrons. Nous développons ici un modèle à visées pédagogiques se fondant sur le déroulement d'une simulation telle qu'ayant lieu dans TRIPOLI-4®. L'intérêt de ce modèle réside dans la mise en évidence des différents processus intervenant au cours d'une simulation, ainsi que dans une utilisation potentielle à des fins d'optimisation de la FoM.

5.1 Notations

Nous notons $\lceil x \rceil$ la partie entière par excès de x, c'est à dire l'entier tel que

$$\lceil x \rceil - 1 < x \leq \lceil x \rceil. \tag{5.1}$$

w désigne le poids initial de la particule et f sa densité de probabilité.

Enfin, nous notons p_{nabs} la probabilité de non-absorption, w_{roulette} le seuil de la roulette russe , w_{survie} le poids de survie.

5.2 Nombre de collisions

5.2.1 Nombre de collisions avant la première roulette russe

On cherche le plus petit entier naturel n tel que

$$w \times p_{\text{nabs}}^{n} \leq \frac{w_{\text{roulette}}}{w_{\text{survie}}}, \tag{5.2}$$

c'est-à-dire le nombre de collisions nécessaires avant qu'ait lieu la première roulette russe. Ceci revient à chercher le plus grand entier naturel n tel que

$$n \leq \frac{\ln\left(w_{\text{roulette}}\right) - \ln\left(w_{\text{survie}}\right) - \ln\left(w\right)}{\ln\left(p_{\text{nabs}}\right)}. \tag{5.3}$$

On définit la fonction C_{prr} correspondant au nombre de collisions qu'une particule de poids initial w doit effectuer avant de déclencher la première roulette russe, telle que

$$C_{\text{prr}}\left(w, w_{\text{roulette}}, w_{\text{survie}}\right) = \left\lceil \frac{\ln\left(w_{\text{roulette}}\right) - \ln\left(w_{\text{survie}}\right) - \ln\left(w\right)}{\ln\left(p_{\text{nabs}}\right)} \right\rceil, \tag{5.4}$$

si $w \geq w_{\text{roulette}}$, sinon

$$C_{\text{prr}}\left(w, w_{\text{roulette}}, w_{\text{survie}}\right) = 1. \tag{5.5}$$

L'espérance du nombre de collisions avant la première roulette russe, pour une distribution de particules données, est

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[C_{\text{prr}}\right] &= \int C_{\text{prr}}\left(w, w_{\text{roulette}}, w_{\text{survie}}\right) f\left(w\right) dw, \\ &= \int \left\lceil \frac{\ln\left(w_{\text{roulette}}\right) - \ln\left(w_{\text{survie}}\right) - \ln\left(w\right)}{\ln\left(p_{\text{nabs}}\right)} \right\rceil f(w) dw.\end{aligned} \tag{5.6}$$

Quant à sa variance,

$$\mathbb{V}\left[C_{\text{prr}}\right] = \int \Big[C_{\text{prr}}\left(w, w_{\text{roulette}}, w_{\text{survie}}\right) - \mathbb{E}\left[C_{\text{prr}}\right]\Big]^2 f\left(w\right) dw. \tag{5.7}$$

5.2.2 Nombre de collisions au sein d'un « cycle » de roulette russe

Un « cycle » de roulette russe correspond à la suite de collisions qu'une particule subit jusqu'à ce que son poids atteigne le poids seuil de la roulette russe.

Nous reprenons le même raisonnement que précédemment en remplaçant le poids initial par w_{survie}. Ce qui donne, en appelant la fonction correspondante C_{crr},

$$C_{\text{crr}}\left(w_{\text{roulette}}, w_{\text{survie}}\right) = \left\lceil \frac{\ln\left(w_{\text{roulette}}\right) - 2\ln\left(w_{\text{survie}}\right)}{\ln\left(p_{\text{nabs}}\right)} \right\rceil. \tag{5.8}$$

Le poids de survie étant le même pour toutes les particules, ce nombre de collisions est donc purement déterministe ; par conséquent, il n'a pas de variance associée.

5.3 Poids avant la roulette russe

5.3.1 Poids de déclenchement de la première roulette russe

On note w_{prr} le poids de la particule qui déclenchera la première roulette russe. Ce poids est directement lié au poids initial de la particule :

$$w_{\text{prr}} = w \times p_{\text{nabs}}^{C_{\text{prr}}}. \tag{5.9}$$

On a donc

$$\mathbb{E}\left[w_{\text{prr}}\right] = \int w \times p_{\text{nabs}}^{C_{\text{prr}}} f\left(w\right) dw \tag{5.10}$$

et

$$\mathbb{V}\left[w_{\text{prr}}\right] = \int \left[w \times p_{\text{nabs}}^{C_{\text{prr}}} - \mathbb{E}\left[w_{\text{prr}}\right]\right]^2 f\left(w\right) dw. \tag{5.11}$$

5.3.2 Poids de déclenchement des roulettes russes suivantes

On note w_{crr} le poids de déclenchement des roulettes russes suivantes. De manière similaire, on a

$$w_{\text{crr}} = w_{\text{survie}} \times p_{\text{nabs}}^{C_{crr}} \tag{5.12}$$

Pour les mêmes raisons que pour le nombre de collisions au sein d'un cycle de roulette russe, le poids de déclenchement de la roulette russe, au sein d'un cycle de roulette russe, est purement déterministe. Il n'y a donc pas de variance associée.

5.4 Nombre de roulettes russes

Chaque particule subit *a minima* une roulette russe. Le nombre de roulettes russes, au-delà de cette première roulette russe « obligatoire », suit une loi géométrique : soit la particule survit et subit une ou plusieurs autres roulettes russes, soit elle meurt. On note $N_{\text{roulettes}}$ ce nombre. On a alors

$$\mathbb{P}\left(N_{\text{roulettes}} = k\right) = \frac{w_{\text{prr}}}{w_{\text{survie}}} \times \left(\frac{w_{\text{crr}}}{w_{\text{survie}}}\right)^{k-1} \times \left(1 - \frac{w_{\text{crr}}}{w_{\text{survie}}}\right), \tag{5.13}$$

avec k un entier tel que $k \geq 0$.

Par calcul, nous obtenons ainsi

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right] = \frac{w_{\text{prr}}}{\left(w_{\text{crr}} - 1\right)^2}\left(1 - w_{\text{crr}}\right) \tag{5.14}$$

et

$$\mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] = \frac{1}{\text{Poids du batch}}\left[\frac{w_{\text{prr}}\left(1 + w_{\text{crr}}\right)}{\left(w_{\text{crr}} - 1\right)^2} - \left(\frac{w_{\text{prr}}}{w_{\text{crr}} - 1}\right)^2\right], \tag{5.15}$$

où

$$\text{Poids du batch} = \sum_i w_i. \tag{5.16}$$

5.5 Poids de fission

Chaque collision génère $N_{\text{fissions}} = \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \times \frac{1}{w_{\text{survie}}} + \xi \right\rfloor$ neutrons de fission, avec ξ un nombre aléatoire suivant une loi uniforme entre 0 et 1, avec un poids w correspondant au poids avant la collision.

N_{fissions} suit une loi binomiale. En effet, soit $\left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor$ neutrons sont générés avec une probabilité $\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} - \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor$, soit $\left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} + 1 \right\rfloor$ neutrons sont générés avec une probabilité $1 - \left(\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} - \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor \right)$.

On a donc

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{fissions}}\right] = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \tag{5.17}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbb{V}\left[N_{\text{fissions}}\right] = &\left(\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} - \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor \right) \\ &\times \left(1 - \left(\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} - \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor \right) \right). \end{aligned} \tag{5.18}$$

5.5.1 Nombre de neutrons générés

On note $N_{\text{générés}}$ le nombre de neutrons fils générés par un neutron père. Ce nombre de neutrons est utilisé pour le calcul de la source du batch suivant.

Avant la première roulette russe

Soit $N_{\text{générés, prr}}$ ce nombre. On a

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{générés, prr}}\right] = \mathbb{E}\left[N_{\text{fissions}}\right] \times \mathbb{E}\left[w_{\text{prr}}\right] \tag{5.19}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbb{V}\left[N_{\text{générés, prr}}\right] = &\mathbb{V}\left[N_{\text{fissions}}\right] \times \mathbb{V}\left[w_{\text{prr}}\right] \\ &+ \mathbb{V}\left[N_{\text{fissions}}\right] \times \mathbb{E}\left[w_{\text{prr}}\right]^2 \\ &+ \mathbb{E}\left[N_{\text{fissions}}\right]^2 \times \mathbb{V}\left[w_{\text{prr}}\right]. \end{aligned} \tag{5.20}$$

Pendant le cycle de roulettes russes

Soit $N_{\text{générés, crr}}$ ce nombre. On a

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{générés, crr}}\right] = \mathbb{E}\left[N_{\text{fissions}}\right] \times \mathbb{E}\left[w_{\text{crr}}\right] \tag{5.21}$$

et

$$\begin{aligned}\mathbb{V}\left[N_{\text{générés, crr}}\right] = &\mathbb{V}\left[N_{\text{fissions}}\right] \times \mathbb{V}\left[w_{\text{crr}}\right] \\ &+ \mathbb{V}\left[N_{\text{fissions}}\right] \times \mathbb{E}\left[w_{\text{crr}}\right]^2 \\ &+ \mathbb{E}\left[N_{\text{fissions}}\right]^2 \times \mathbb{V}\left[w_{\text{crr}}\right]. \end{aligned} \tag{5.22}$$

Pendant la vie du neutron

On a

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{générés}}\right] = \mathbb{E}\left[N_{\text{générés, prr}}\right] + \mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times \mathbb{E}\left[N_{\text{générés, crr}}\right]. \tag{5.23}$$

Concernant la variance :

$$\begin{aligned}\mathbb{V}\left[N_{\text{générés}}\right] = &\mathbb{V}\left[N_{\text{générés, prr}}\right] \\ &+ \mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times \mathbb{V}\left[N_{\text{générés, crr}}\right] \\ &+ \mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times \mathbb{E}\left[N_{\text{générés, crr}}\right]^2 \\ &+ \mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right]^2 \times \mathbb{V}\left[N_{\text{générés, crr}}\right]. \end{aligned} \tag{5.24}$$

5.5.2 Poids de fission généré avant la première roulette russe

On note $W_{\text{f, prr}}$ le poids cumulé des neutrons de fission générés avant que la particule les ayant générés ne subisse sa première roulette.

Pour une particule de poids initial w, on a

$$W_{\text{f, prr}} = w \sum_{i=0}^{C_{\text{prr}}-1} \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} + \xi_i \right\rfloor w_{\text{survie}} p_{nabs}^i, \tag{5.25}$$

où ξ_i est un nombre aléatoire suivant une loi uniforme entre 0 et 1.

On peut calculer l'espérance et la variance associées à cette somme de poids :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[W_{\text{f, prr}}\right] &= \int W_{\text{f,prr}} f(w) dw, \\ &= \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \int \left(\sum_{i=0}^{C_{\text{prr}}-1} w w_{\text{survie}} p_{nabs}^i \right) f(w) dw \end{aligned} \tag{5.26}$$

et

$$\mathbb{V}\left[W_{\text{f, prr}}\right] = \frac{1}{\text{Poids du batch}} \int \left[W_{\text{f,prr}} - \mathbb{E}\left[W_{\text{f, prr}}\right] \right]^2 f(w) dw. \tag{5.27}$$

5.5.3 Poids de fission généré au sein d'un cycle de roulette russe

On note $W_{\text{f, crr}}$ le poids cumulé des neutrons de fission générés au cours d'un cycle de roulette russe.

$$W_{\text{f, crr}} = \sum_{i=0}^{C_{\text{crr}}-1} \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} + \xi_i \right\rfloor w_{\text{survie}}^2 p_{nabs}^i. \tag{5.28}$$

On a

$$\mathbb{E}\left[W_{\text{f, crr}}\right] = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} w_{\text{survie}} \sum_{i=0}^{C_{\text{crr}}-1} p_{nabs}^i, \tag{5.29}$$

et

$$\begin{aligned}\mathbb{V}\left[W_{\text{f, crr}}\right] = \frac{1}{\text{Poids du batch}} &\left(w_{\text{survie}}^2 \sum_{i=0}^{C_{\text{crr}}-1} p_{nabs}^i \right)^2 \\ &\times \left(\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} - \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor \right) \\ &\times \left(1 - \left(\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} - \left\lfloor \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \frac{1}{w_{\text{survie}}} \right\rfloor \right) \right).\end{aligned} \tag{5.30}$$

Nous notons que la variance de la somme des poids n'est due qu'à la variance du nombre de neutrons de fission générés.

5.5.4 Poids total des neutrons de fission

Chaque neutron effectue un certain nombre de collisions avant de subir sa première roulette russe, puis un certain nombre d'autres en fonction du nombre de roulettes russes subies.

On note W_{tot} le poids total des neutrons de fission générés. On a

$$\begin{aligned}W_{\text{tot}} = &\text{ Poids de fission cumulé avant la première roulette russe} \\ &+ \text{ Nombre de roulettes russes} \\ &\times \text{ Poids de fission cumulé au sein d'un cycle de roulette russe,}\end{aligned} \tag{5.31}$$

ce qui nous donne, en utilisant les notations précédemment introduites

$$W_{\text{tot}} = W_{\text{f, prr}} + N_{\text{roulettes}} \times W_{\text{f, crr}}. \tag{5.32}$$

On calcule alors l'espérance et la variance de ce poids total de fission :

$$\mathbb{E}\left[W_{\text{tot}}\right] = \mathbb{E}\left[W_{\text{f, prr}}\right] + \mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times \mathbb{E}\left[W_{\text{f, crr}}\right] \tag{5.33}$$

et

$$\begin{aligned}\mathbb{V}\left[W_{\text{tot}}\right] = \mathbb{V}\left[W_{\text{f, prr}}\right] + \mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times \mathbb{V}\left[W_{\text{f, crr}}\right] \\ + \mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times \mathbb{E}\left[W_{\text{f, crr}}\right]^2 \\ + \mathbb{V}\left[W_{\text{f, crr}}\right] \times \mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right]^2 .\end{aligned} \tag{5.34}$$

5.6 KSTEP

Le KSTEP se définit ainsi, en considérant N_{part} le nombre de particules sources :

$$\text{KSTEP} = \frac{\sum\limits_{neutrons} W_{\text{tot}}}{\text{Poids du batch}}, \tag{5.35}$$

donc

$$\mathbb{E}\left[\text{KSTEP}\right] = \frac{N_{\text{part}}\mathbb{E}\left[W_{\text{tot}}\right]}{\text{Poids du batch}}, \tag{5.36}$$

$$\mathbb{V}\left[\text{KSTEP}\right] = \left(\frac{N_{\text{part}}}{\text{Poids du batch}}\right)^2 \mathbb{V}\left[W_{\text{tot}}\right]. \tag{5.37}$$

5.7 Temps de simulation t

On peut faire l'approximation que le temps de simulation est directement proportionnel au nombre de collisions ayant lieu lors de la simulation.

Le nombre de collisions, N_{coll}, pour une particule est le suivant :

$$N_{\text{coll}} = C_{\text{prr}} + N_{\text{roulettes}} \times C_{\text{crr}}. \tag{5.38}$$

Par conséquent, on a

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{coll}}\right] = \mathbb{E}\left[C_{\text{prr}}\right] + \mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times C_{\text{crr}} \tag{5.39}$$

et

$$\mathbb{V}\left[N_{\text{coll}}\right] = \mathbb{V}\left[C_{\text{prr}}\right] + \mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \times C_{\text{crr}}^2. \tag{5.40}$$

On a donc

$$\mathbb{E}\left[t\right] = N_{\text{part}} \times \mathbb{E}\left[N_{\text{coll}}\right] \tag{5.41}$$

et

$$\mathbb{V}\left[t\right] = N_{\text{part}}^2 \times \mathbb{V}\left[N_{\text{coll}}\right] \tag{5.42}$$

5.8 *FoM*

La *Figure of Merit*, FoM, se définit ainsi

$$\mathrm{FoM} = \frac{1}{t \times \mathbb{V}\left[\mathrm{KSTEP}\right]}, \tag{5.43}$$

d'où

$$\mathbb{E}\left[\mathrm{FoM}\right] = \frac{1}{\mathbb{E}\left[t\right] \times \mathbb{V}\left[\mathrm{KSTEP}\right]}. \tag{5.44}$$

5.9 Calcul de la distribution de sources au batch suivant

Le calcul de la distribution de sources du batch suivant s'effectue de la manière suivante, en deux étapes principales.

Tout d'abord, il est nécessaire de lister les poids des neutrons fils produits au cours des fissions ainsi que leurs fréquences. Toutes les grandeurs utiles ont déjà été calculées : poids avant collisions, nombre de neutrons générés, etc.

Dans un second temps et afin d'avoir un poids de batch constant entre chaque génération, il est nécessaire de renormaliser ces poids précédemment calculés par le KSTEP. Ceci est effectué dans TRIPOLI-4®.

Cette distribution de sources calculée, il est alors possible de poursuivre la simulation sur plusieurs batchs moyennant le calcul du nombre de neutrons générés.

5.10 Exemple

Dans cet exemple, nous considérons le cas d'un batch constitué de 10^5 particules de poids $w = 1$. Nous fixons arbitrairement $\nu = 2{,}44$, $\Sigma_t = 6{,}05$ cm^{-1}, $\Sigma_a = 1{,}35$ cm^{-1} et $\Sigma_f = 1{,}22$ cm^{-1}. Le milieu n'est constitué que d'un seul isotope virtuel. On considère le milieu infini.

On fixe le seuil de la roulette à $w_{\mathrm{roulette}} = 0{,}8$ et le poids requis à $w_{\mathrm{requis}} = 1$.

Dans cet exemple, la probabilité de non-absorption vaut

$$p_{\mathrm{nabs}} = 1 - \frac{\Sigma_a}{\Sigma_t} \approx 0{,}7769. \tag{5.45}$$

De plus, puisque le milieu est infini, nous avons

$$k_{\text{eff}} = \text{KSTEP} = k_\infty = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_a} \approx 2{,}2050. \tag{5.46}$$

En remarquant que $w = w_{\text{requis}} = 1$ et que $p_{\text{nabs}} < w_{\text{roulette}}$, on en déduit que

$$C_{\text{prr}} = C_{\text{crr}} = \mathbb{E}\left[C_{\text{prr}}\right] = \mathbb{E}\left[C_{\text{crr}}\right] = 1 \tag{5.47}$$

et que

$$w_{\text{prr}} = w_{\text{crr}} = \mathbb{E}\left[w_{\text{prr}}\right] = \mathbb{E}\left[w_{\text{crr}}\right] = 1. \tag{5.48}$$

Les variances associées sont, quant à elles, nulles.

L'espérance du nombre de roulettes russes, en plus de la première, est la suivante

$$\mathbb{E}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \approx 3{,}48148. \tag{5.49}$$

Ce résultat est confirmé par simulation avec TRIPOLI-4®. La variance de ce nombre de roulettes russes est

$$\mathbb{V}\left[N_{\text{roulettes}}\right] \approx 1{,}934402 \times 10^{-4}. \tag{5.50}$$

On montre ensuite que le poids total moyen des neutrons de fission générés est

$$\mathbb{E}\left[W_{\text{f, prr}}\right] = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t} \approx 0{,}492033 \tag{5.51}$$

avec une variance

$$\mathbb{V}\left[W_{\text{f, prr}}\right] \approx 3{,}451666 \times 10^{-5}. \tag{5.52}$$

On a également

$$\mathbb{E}\left[W_{\text{f, crr}}\right] = \mathbb{E}\left[W_{\text{f, prr}}\right] \tag{5.53}$$

et

$$\mathbb{V}\left[W_{\text{f, crr}}\right] = \mathbb{V}\left[W_{\text{f, prr}}\right]. \tag{5.54}$$

On peut ainsi calculer $\mathbb{E}\left[W_{\text{tot}}\right]$:

$$\mathbb{E}\left[W_{\text{tot}}\right] \approx 0{,}492033 + 3{,}48148 \times 0{,}492033 \approx 2{,}2050. \tag{5.55}$$

De même, on calcule $\mathbb{V}\left[W_{\text{tot}}\right]$:

$$\mathbb{V}\left[W_{\text{tot}}\right] \approx 4{,}428339 \times 10^{-5}. \tag{5.56}$$

On peut maintenant calculer le KSTEP et son écart-type :

$$\mathbb{E}\left[\text{KSTEP}\right] \approx 2{,}2050, \tag{5.57}$$

$$\sigma_{\text{KSTEP}} \approx 0{,}0067. \tag{5.58}$$

On remarque que

$$\mathbb{E}\left[\text{KSTEP}\right] \approx k_{\infty}. \tag{5.59}$$

Le modèle développé, calqué sur le déroulement d'une simulation, semble en accord avec la physique, au sens neutronique, du milieu considéré.

Nous réalisons cent simulations indépendantes avec TRIPOLI-4® dans les mêmes conditions utilisées que pour l'exemple, c'est-à-dire que nous regardons uniquement les résultats du premier batch (tous les neutrons démarrent leurs vies avec un poids de $w = 1$) concernant l'estimateur « KSTEP » du k_{eff} :

$$\begin{aligned} \overline{\text{KSTEP}} &= 2{,}2038, \\ \sigma_{\overline{\text{KSTEP}}} &= 0{,}0064. \end{aligned} \tag{5.60}$$

La moyenne du k_{eff} est en accord avec le modèle développé. Nous observons une différence très faible entre l'écart-type fourni par TRIPOLI-4® et celui du modèle.

5.11 Optimisation

Ce modèle pourrait également servir de base à une recherche d'un optimum du seuil de la roulette russe par rapport à la FoM. Dans le code TRIPOLI-4®, le seuil de la roulette russe est $w_{\text{roulette}} = 0{,}8$ pour le mode de calcul critique. Cet optimum a été déterminé expérimentalement à partir d'un certain nombre de cas-tests issus de la base de validation de TRIPOLI-4®.

Dans notre cas, en ne considérant qu'un seul batch, c'est-à-dire en considérant une distribution de sources de neutrons uniforme ($w_0 = 1$), la valeur optimale du seuil de la roulette russe est comprise entre 0,47 et 0,6, comme nous pouvons le voir sur le graphique 5.1. Ce graphique a été généré en prenant des pas de seuil de roulette russe de 0,01 entre 0 et 1.

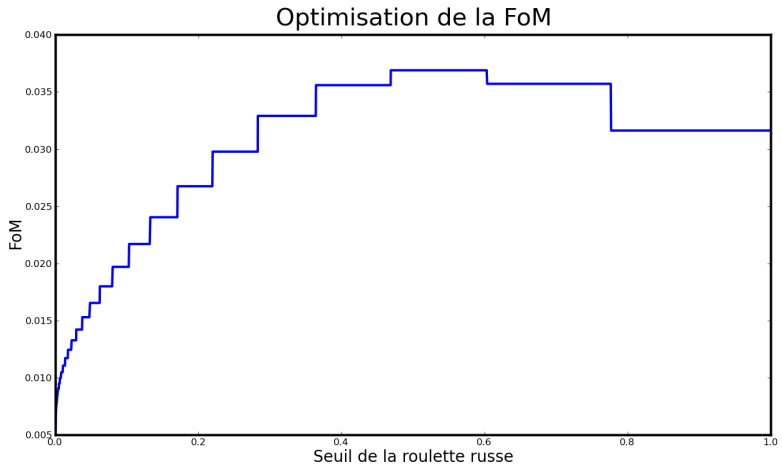


FIGURE 5.1 – Recherche de la valeur optimale du seuil de la roulette russe vis-à-vis de la FoM à partir du modèle analytique du KSTEP en milieu infini.

5.12 Conclusion

En conclusion, nous disposons d'un modèle analytique du calcul du KSTEP dans un milieu homogène infini sous hypothèse monocinétique. Les mécanismes de contrôle de la population neutronique au sein d'un lot de neutrons est exposée. Enfin, on met en évidence la dépendance de la variance à la distribution des poids des neutrons.

Par ailleurs, ce modèle pourrait être étendu à la simulation complète en considérant la renormalisation des neutrons générés par les fissions par le KSTEP pour le calcul de la nouvelle distribution des poids des neutrons sources.

Chapitre 6

Méthode de la matrice de fission

Sommaire

6.1 Présentation 80
6.2 Estimateur de TRIPOLI-4® 82
6.3 Étude comparative entre le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® et deux approches analytiques 82
6.3.1 Modèle de la diffusion 82
6.3.2 Transport approché 86
6.3.3 Exemple : configuration fissile sphérique 87
6.3.4 Conclusion 91
6.4 Obtention d'un écart-type 93
6.4.1 Problème de la convergence de la matrice de fission 93
6.4.2 *Jackknife* 94
6.4.3 URANIE 99
6.5 Accélération de la convergence 100
6.5.1 Sphère critique 100
6.5.2 Crayon combustible 107
6.5.3 Cœur de réacteur simplifié 112
6.6 Conclusion 117

La méthode de la matrice de fission peut être utilisée, en simulation Monte-Carlo, pour résoudre l'équation à valeurs propres de la criticité. Elle permet d'accéder aux différentes valeurs propres du système, ainsi qu'aux vecteurs propres associés, de l'opérateur de fission (ou de transport). Les flux direct et adjoint s'en déduisent. Cette méthode ouvre également la voie à d'autres types d'applications telles que l'analyse de sensibilité [FB10] ou le calcul de β_{eff} [Kee65].

La matrice de fission peut être utilisée à des fins de test de convergence [HLM08]. Ce test consiste en une projection des sources sur les vecteurs propres de la matrice. Puisque la source converge vers le mode fondamental, la projection sur les vecteurs propres autres que le premier tend vers zéro. Une illustration de la méthode est proposée dans [HLM08].

Nous présentons, dans ce chapitre, la méthode de la matrice de fission ainsi que quelques modèles analytiques réalisés pour valider, dans un premier temps, l'implémentation dans TRIPOLI-4®.

Nous proposons, ensuite, l'application inédite, dans ce cadre, d'une technique de calcul de la variance de l'estimateur du k_{eff}. Enfin, la capacité accélératrice de la matrice de fission sera mise en évidence sur plusieurs configurations fissiles.

6.1 Présentation

On note K l'opérateur de fission tel que $K : S \to S$. Cet opérateur agit dans l'espace des sources.

On rappelle l'expression de la source :

$$S(\vec{r},\vec{v}) = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \iint S\left(\vec{r'},\vec{v'}\right) K\left(\vec{r'} \to \vec{r},\vec{v'} \to \vec{v}\right) d\vec{r'} d\vec{v'}. \tag{6.1}$$

Cette source peut être discrétisée spatialement de la manière suivante :

$$S_i = \int_{V_i} S(\vec{r})\, d\vec{r} \tag{6.2}$$

$$= \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_j} S\left(\vec{r'}\right) K\left(\vec{r'} \to \vec{v}\right) d\vec{r'}}{S_j} \right] S_j, \tag{6.3}$$

où V_i correspond à une maille (un volume discrétisé) et N au nombre de volumes considérés.

Si l'on représente l'opérateur de fission K sous forme matricielle, on a alors :

$$\sum_{j=1}^{N} k_{ij} S_j = k_{\text{eff}} S_i,\ i = 1, \cdots,\ N, \tag{6.4}$$

ce qui se représente également sous la forme

$$\begin{pmatrix} k_{11} & k_{21} & \cdots & k_{N1} \\ k_{12} & k_{22} & \cdots & k_{N2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ k_{1N} & j_{2N} & \cdots & k_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_N \end{pmatrix} = k_{\text{eff}} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_N \end{pmatrix}. \tag{6.5}$$

L'élément de matrice k_{ij} a donc pour expression :

$$k_{ij} = \frac{\int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_j} d\vec{r'} S\left(\vec{r'}\right) F\left(\vec{r'} \rightarrow \vec{r}\right)}{S_j}. \tag{6.6}$$

La matrice de fission, que l'on note matrice K_{ij}, est une discrétisation spatiale (géométrique) de l'opérateur de fission K :

$$Ks\left(\vec{r},\vec{v}\right) = ks\left(\vec{r},\vec{v}\right), \tag{6.7}$$

où on rappelle que $s\left(\vec{r},\vec{v}\right)$ correspond à la distribution de sources en $\vec{r}$ à la vitesse $\vec{v}$ et k à la valeur propre de l'équation.

L'élément (i,j) de la matrice représente le nombre moyen de neutrons issus d'une fission dans le volume i (V_i) causée par un neutron issu du volume j (V_j) [KT01, Duf07]. i représente ainsi l'indice des lignes de la matrice et j celui des colonnes. On a ainsi :

$$K_{ij} = \frac{\iint d\vec{v} d\vec{v'} \int_{V_i} d^3r \int_{V_j} d^3r' f(\vec{r'},\vec{v'} \rightarrow \vec{r},\vec{v}) s_0(\vec{r'},\vec{v'})}{\int d\vec{v'} \int_{V_j} d^3r' s_0(\vec{r'},\vec{v'})}, \tag{6.8}$$

où $f(\vec{r'},\vec{v'} \rightarrow \vec{r},\vec{v}) d\vec{v} d\vec{r}$ représente le nombre attendu de neutrons de fission de première génération produits dans le volume d'élément $d\vec{r}$ autour de $\vec{r}$ et dans l'élément de vitesse $d\vec{v}$ autour de $\vec{v}$ issus d'un neutron né à $\vec{r'}$ à la vitesse $\vec{v'}$. Ceci est illustré par la figure 6.1.

Afin de calculer les différentes valeurs et vecteurs propres du système fissile étudié, la matrice de fission K_{ij} est « diagonalisée ». Cette opération consiste, pour la matrice de fission qui est une matrice carrée, à rechercher une base de l'espace vectoriel constituée de vecteurs propres. Le k_{eff} correspond ainsi à la première valeur propre du système et le premier vecteur propre à la distribution de sources à l'équilibre.

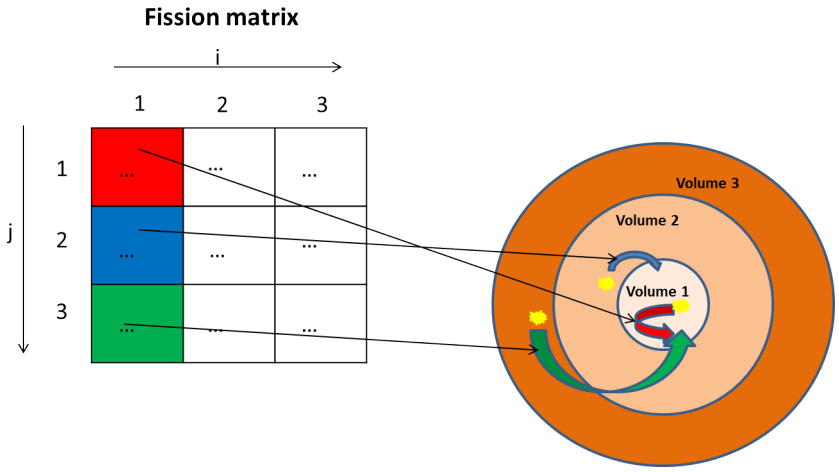


FIGURE 6.1 – Schéma de principe de la matrice de fission (discrétisation spatiale).

6.2 Estimateur de TRIPOLI-4®

Dans TRIPOLI-4®, les éléments de la matrice K_{ij} sont calculés grâce à un estimateur de type TRACK par la formule suivante :

$$K_{ij}(i,j) = \Sigma\nu_i\sigma_{f_i}w_{ij}l_{ij}, \tag{6.9}$$

où w_{ij} correspond au poids statistique du neutron, l_{ij} sa distance de vol, j le volume de naissance et i le volume où la fission se produit.

6.3 Étude comparative entre le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® et deux approches analytiques

Nous avons cherché à évaluer les développements effectués pour la méthode de la matrice de fission en comparant les résultats obtenus avec le code TRIPOLI-4® à ceux issus du modèle de la diffusion puis à ceux d'un modèle approché du transport [DHD13].

6.3.1 Modèle de la diffusion

Présentation

Le modèle de la diffusion est établi sous les hypothèses suivantes [Reu03] :

1. milieu ne présentant pas (ou peu) d'hétérogénéités géométriques ;

2. $\Sigma_a \ll \Sigma_s$;
3. pas de proximité avec une interface ;
4. pas de proximité avec des sources concentrées ;
5. sources et chocs isotropes dans le système du laboratoire.

En régime stationnaire, l'« équation de la diffusion » s'écrit :

$$-D\Delta\Phi = S - \Sigma_a\Phi, \tag{6.10}$$

avec D le coefficient de diffusion :

$$D = \frac{1}{3\left(\Sigma_{tot} - \bar{\mu}_0\Sigma_s\right)}. \tag{6.11}$$

En supposant la diffusion, dans le référentiel du centre de masse, isotrope, on peut montrer que le cosinus moyen $\bar{\mu}_0$ de l'angle de diffusion dans le référentiel du laboratoire est :

$$\bar{\mu}_0 \approx \frac{2}{3A}, \tag{6.12}$$

avec A le nombre de nucléons du noyau considéré. Ceci nous mène à la « correction du transport » suivante :

$$\Sigma_{tr} = \Sigma_{tot} - \bar{\mu}_0\Sigma_s. \tag{6.13}$$

Le coefficient de diffusion se réécrit alors :

$$D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}}. \tag{6.14}$$

En criticité, dans le cas stationnaire, les sources S de neutrons ne sont composées que des neutrons issus de fissions, ce qui conduit à $S = \nu\Sigma_f\Phi$. On a :

$$-D\Delta\Phi\left(\vec{r}\right) = \nu\Sigma_f\Phi\left(\vec{r}\right) - \Sigma_a\Phi\left(\vec{r}\right). \tag{6.15}$$

Cette équation est en particulier satisfaite par les fonctions propres Φ_n de l'opérateur laplacien Δ :

$$-D\Delta\Phi_n\left(\vec{r}\right) + \Sigma_a\Phi_n\left(\vec{r}\right) = \frac{\nu\Sigma_f}{k_n}\Phi_n\left(\vec{r}\right), \tag{6.16}$$

avec

$$k_n = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_a + DB_n^2} \tag{6.17}$$

et B_n^2 n-ième valeur propre de l'équation

$$\Delta\Phi\left(\vec{r}\right) + B^2\Phi\left(\vec{r}\right) = 0, \tag{6.18}$$

avec la condition aux limites $\Phi\left(\vec{r}_s\right) = 0$.

Conditions aux limites et mode fondamental

En théorie de la diffusion, le flux s'annule à la distance $\frac{2}{3}\lambda_{tr}$ appelée *distance d'extrapolation* et notée d. Cette distance dépend théoriquement de la courbure de la limite physique. d peut ainsi varier de $0.7104\lambda_{tr}$ pour un plan à $\frac{4}{3}\lambda_{tr}$ pour une surface de courbure infinie [WW58, LN08, PS47, Ber48, Mar47, SM71, Pah66]. Nous nous proposons, dans cette thèse, d'étendre cette notion de distance d'extrapolation aux autres modes du système que le mode fondamental, en utilisant les mêmes conditions aux limites [Mal].

Cas d'une configuration critique sphérique

On considère une sphère critique de rayon r_0. Les fonctions propres du laplacien en géométrie sphérique s'écrivent :

$$\Phi_n(r) = A_n \frac{\sin(B_{g_n} r)}{r}, \tag{6.19}$$

avec la condition aux limites $\Phi_n(R_n) = 0$ (ce qui implique $B_{g_n} R_n = n\pi$), $n \in \mathbb{N}^*$, où $R_n = r_0 + d_n$, d_n étant la distance d'extrapolation associée à $\Phi_n(r)$. On impose $n \neq 0$, dans le cas contraire, le flux serait égal à zéro dans toute la sphère.

$$\Phi_n(r) = A_n \frac{\sin(B_{g_n} r)}{r} = A_n \frac{\sin\left(n\pi \frac{r}{R_n}\right)}{r}, \tag{6.20}$$

où $\frac{n^2\pi^2}{R_n^2} = B_{g_n}^2$ est le « laplacien géométrique » [BR85].

Conditions aux limites et autres modes

La valeur usuelle de la distance d'extrapolation, $d = \frac{2}{3}\lambda$, ne convient pas pour les modes autres que le mode fondamental. Ceci est par exemple illustré, comme nous le verrons plus tard, par la figure 6.5.

Afin de pallier ce problème, nous proposons de reprendre le raisonnement conduisant à l'introduction de la distance d'extrapolation et de l'étendre aux modes autres que le mode fondamental.

Nous partons de la forme générale de l'équation bilan stationnaire conservative de n'importe quelle quantité prenant en compte les termes de source et d'absorptions :

$$\nabla \cdot J = S - A \tag{6.21}$$

En utilisant une approximation au premier ordre pour des flux variant suffisamment lentement dans l'espace, nous pouvons écrire l'équation suivante pour les courants traversant la surface $z = z_0$ [WW58] :

$$J_{\pm}(z_0) = \frac{\Phi(z_0)}{4} \mp \frac{D}{2}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)_{z_0}. \tag{6.22}$$

Le premier terme à droite correspond à la partie constante, scalaire et isotrope du flux et le deuxième à la variation spatiale de ce même flux neutronique. Ce dernier terme représente l'« équilibre » entre les courants sortants et les courants entrants. Ce courant est proportionnel à la différence de flux entre le côté sortant et le côté entrant.

Une des conditions aux limites du modèle de la diffusion est qu'on suppose que le courant entrant depuis le vide en $z = z_0$ est nul :

$$J_{-}(z_0) = 0. \tag{6.23}$$

En utilisant l'équation (6.22) en $z = z_0$, la limite physique du système entre le milieu considéré et le vide, on a :

$$\frac{\Phi(z_0)}{-\left(\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)_{z_0}} = \frac{2}{3\Sigma_{tr}} = \frac{2}{3}\lambda_{tr}. \tag{6.24}$$

Aux environs de la limite extrapolée :

$$\Phi\left(z_0 + \frac{2}{3}\lambda_{tr}\right) \approx \Phi(z_0) + \frac{2}{3}\lambda_{tr}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)_{z_0}. \tag{6.25}$$

Ce qui donne la nouvelle condition suivante :

$$\Phi\left(z_0 + \frac{2}{3}\lambda_{tr}\right) \approx 0. \tag{6.26}$$

En utilisant les solutions de l'équation (6.20) de la diffusion pour une sphère, en la dérivant, puis en l'introduisant dans l'équation (6.24) :

$$\frac{\Phi_n(r_0)}{-\left(\frac{\partial \Phi_n}{\partial r}\right)_{r_0}} = \frac{2}{3}\lambda_{tr}, \tag{6.27}$$

ce qui donne explicitement :

$$\frac{\frac{\sin\left(n\pi\frac{r_0}{r_0+d_n}\right)}{r_0}}{-n\pi\frac{\cos\left(n\pi\frac{r_0}{r_0+d_n}\right)}{r_0(r_0+d_n)} + \frac{\sin\left(n\pi\frac{r_0}{r_0+d_n}\right)}{r_0^2}} = \frac{2}{3}\lambda_{tr}. \tag{6.28}$$

Cette équation peut être résolue numériquement en connaissant r_0.

Des résultats sont présentés dans le tableau 6.1. Des graphiques sont également présentés par la suite.

6.3.2 Transport approché

Nous présentons ici la « méthode des noyaux » également connue sous le nom de « méthode des fonctions de Green », dans le but de proposer un second modèle analytique de comparaison.

Comme nous l'avons présenté précédemment, grâce à la linéarité de l'équation de Boltzmann, (en prenant en compte les sources), s'il nous est possible de la résoudre pour une source de Dirac, nous sommes capables de résoudre des problèmes plus complexes sous la forme de simples intégrales.

Définissons le noyau de *première collision* comme le flux généré en $\vec{r'}$ par une source de Dirac située en $\vec{r}$ juste avant la première collision. Sa valeur est assez directe et intuitive :

$$K_1(\vec{r'},\vec{r}) = \frac{e^{-\Sigma_t|\vec{r}-\vec{r'}|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r'}|^2}. \tag{6.29}$$

La partie en $1/r^2$ est due à la conservation du flux dans le cas où il n'y aurait pas de collision. L'exponentielle correspond à la disparation de ce flux due à la première collision.

En utilisant les connaissances apportées par le modèle de diffusion, nous pouvons résoudre l'équation dans le cas d'une source de Dirac située en $\vec{r}$. Nous utilisons la symétrie sphérique du problème pour simplifier le laplacien. La singularité à l'origine peut être intégrée en ayant recours à la formule d'Ostrogradsky :

$$\iiint_V \vec{\nabla} f dV = \oiint_{\partial V} f d\vec{S}, \tag{6.30}$$

où V correspond au volume sur lequel on intègre, ∂V à la frontière de volume et $d\vec{S}$ au vecteur normal à la surface dirigé vers l'extérieur. Ceci nous donne le noyau de *diffusion* :

$$K_s(\vec{r'},\vec{r}) = \frac{e^{-\kappa|\vec{r}-\vec{r'}|}}{4\pi D|\vec{r}-\vec{r'}|}, \tag{6.31}$$

avec $\kappa = \sqrt{\frac{D}{\Sigma_a}} \approx \sqrt{3\Sigma\Sigma_a}$ l'inverse de la longueur de diffusion.

Le vrai noyau de transport est, approximativement, une composition linéaire des deux noyaux précédents (diffusion et première collision) [WW58] :

$$\begin{aligned} K(\vec{r'},\vec{r}) &= K_1(\vec{r'},\vec{r}) + \beta K_s(\vec{r'},\vec{r}), \\ &= \frac{e^{-\Sigma'_t|\vec{r}-\vec{r'}|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r'}|^2} + \frac{\beta e^{-\kappa'|\vec{r}-\vec{r'}|}}{4\pi D'|\vec{r}-\vec{r'}|}, \end{aligned} \tag{6.32}$$

avec les paramètres suivants :

$$\begin{aligned} \kappa' &= \sqrt{3\Sigma_t\Sigma_a(1-\bar{\mu})}\left(1-\frac{2\Sigma_a}{5\Sigma}\right), \\ \Sigma' &= \frac{5}{4}\Sigma, \\ \beta &= \frac{2\Sigma_a}{\Sigma_s}\frac{\Sigma^2-\kappa'^2}{\kappa'^2-\Sigma\Sigma_a} \text{ et} \\ D &= \frac{\Sigma_a}{\kappa'^2}. \end{aligned} \tag{6.33}$$

La convergence relative des termes en $1/r$ et $1/r^2$ met en évidence que le noyau de première collision l'emporte à faible distance. Quand on s'éloigne de la source, ce sont les effets de diffusion qui prédominent.

Dans un but de résolution numérique, il est préférable d'utiliser l'expression analytique du noyau du transport pour un flux en $\vec{r'}$ issu d'une source coquille de rayon r. L'intégration sur chaque angle solide de source nous donne les noyaux sphériques suivants :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_s(r',r) &= \frac{e^{-\kappa|r-r'|}-e^{-\kappa|r+r'|}}{8\pi\kappa D r r'}, \\ \mathcal{K}_1(r',r) &= \frac{E_1(\Sigma_t|r-r'|)-E_1(\Sigma_t|r+r'|)}{8\pi r r'}. \end{aligned} \tag{6.34}$$

E_1 correspond à la fonction exponentielle intégrale, c'est-à-dire

$$E_1(x) = \int_x^{+\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt. \tag{6.35}$$

Ce modèle du transport nous permet d'effectuer le calcul analytique de la matrice de fission. C'est aux valeurs et vecteurs propres de cette matrice que nous comparerons les résultats obtenus par TRIPOLI-4®.

6.3.3 Exemple : configuration fissile sphérique

Jeu de données

Le jeu de données que nous utilisons est inspiré du jeu de données « Godiva » [Tea10].

Ce jeu de données, représenté sur la figure 6.2, consiste en une sphère critique de rayon $r_0 = 8{,}5$ cm. Elle n'est composée que d'^{235}U avec une densité atomique de 0,048 atome par 10^{-24} cm^3. Le maillage imposé à cette sphère est un maillage en cent coquilles espacées de 8,5/100 cm chacune.

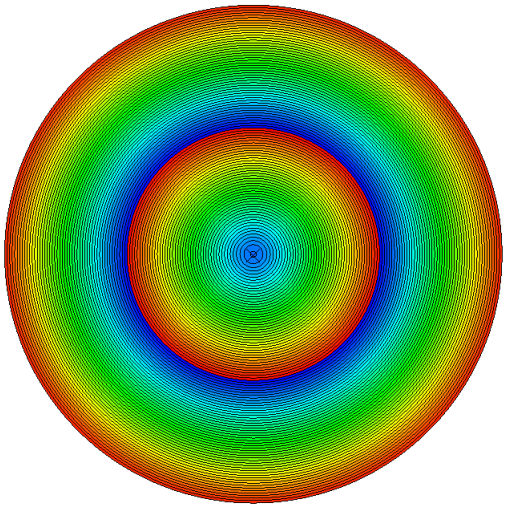


FIGURE 6.2 – Visualisation de la configuration sphérique étudiée.

Les simulations ont été lancées avec 15000 batchs de 10000 neutrons, en discardant les cinq premiers batchs.

Une directive de TRIPOLI-4®, *HOMOGENIZE*, basée sur un calcul d'aire de migration, nous permet d'accéder aux valeurs des sections efficaces homogénéisées à un groupe.

Les résultats présentés concernant le code TRIPOLI-4® proviennent de la matrice de fission. Le calcul de cette matrice est présenté plus tôt dans ce chapitre. Le post-traitement de la matrice, *i.e.* le calcul des valeurs propres et des vecteurs propres par diagonalisation, est effectué à l'« extérieur » de TRIPOLI-4® par un script écrit en langage Python [1].

1. Python est un langage de programmation interprété orienté objet. Pour plus de détails, consulter le site Internet de « The Python Software Foundation » : http ://www.python.org. La diagonalisation de la matrice est réalisée grâce à la bibliothèque Numpy.

Calcul des sections efficaces

Nous générons, à partir des bibliothèques de données nucléaires ponctuelles, des sections efficaces constantes.

Pour ce faire, on définit $q(E)$ la densité de ralentissement. q correspond au nombre de neutrons par cm^3 qui ralentissent et passent sous l'énergie E. On définit également la léthargie ξ ainsi :

$$\xi = \overline{\ln\left(\frac{E_0}{E}\right)}, \tag{6.36}$$

où E_0 est une énergie initiale de référence (par exemple : l'énergie d'émission du neutron considéré).

Il est possible, avec l'équation suivante [Bus63], de calculer des sections constantes :

$$\frac{dq(E)}{q(E)} = \frac{\Sigma_a(E)}{\Sigma_s(E) + \Sigma_a(E)} \frac{dE}{\xi E}. \tag{6.37}$$

Par cette méthode, nous obtenons les valeurs suivantes pour $E_0 = 20$ MeV :

$$\begin{aligned}
&\nu = 2{,}44,\\
&\Sigma_t = 0{,}30734\ \mathrm{cm}^{-1},\\
&\Sigma_s = 0{,}23876\ \mathrm{cm}^{-1},\\
&\Sigma_a = 0{,}06858\ \mathrm{cm}^{-1},\\
&\Sigma_f = 0{,}061976\ \mathrm{cm}^{-1},\\
&\lambda_{tr} \approx 3{,}26097\ \mathrm{cm},\\
&D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \approx 1{,}08699\ \mathrm{cm}.
\end{aligned}$$

Valeurs propres

On présente, dans le tableau 6.1, les valeurs propres calculées par les deux modèles théoriques et par le code de calcul. Dans le tableau 6.2, on présente les rapports de dominance associés.

Ce qu'on constate à partir du tableau 6.1, c'est que la première valeur propre du modèle de la diffusion est sous-estimée d'environ 5 % tandis que celle du modèle du transport approchée est surestimée de 5 %. Concernant les modes supérieurs, le modèle du transport est en bien meilleur accord que le modèle de la diffusion.

	Diffusion			Transport	TRIPOLI-4®
n	d_n	k_n avec d_n	k_n $d_n = \frac{2}{3}\lambda_{tr}$	k_n	k_n
1	2,4299	0,95478	0,92921	1,0579	0,99979
2	1,7296	0,31592	0,33965	0,46153	0,45262
3	1,2753	0,14015	0,16508	0,27582	0,27565
4	0,9957	0,076674	0,096004	0,19438	0,19542
5	0,8125	0,047837	0,062421	0,14957	0,15066

TABLE 6.1 – Valeurs propres.

	Diffusion		Transport		TRIPOLI-4®	
n	k_n	k_n/k_1	k_n	k_n/k_1	k_n	k_n/k_1
1	0,95478	/	1,0579	/	0,99979	/
2	0,31592	0,33089	0,46153	0,43629	0,45262	0,45272
3	0,14015	0,14679	0,27582	0,26073	0,27565	0,27571
4	0,076674	0,080306	0,19438	0,18375	0,19542	0,19546
5	0,047837	0,050102	0,14957	0,14139	0,15066	0,15069

TABLE 6.2 – Rapports de dominance.

Pour ce qui est des écarts sur la première valeur propre, il faut avoir à l'esprit que le modèle de la diffusion inclut une correction artificielle qui lui permet de mieux « coller » à la réalité (voir la section 6.3.1). De plus, le modèle du transport employé ici fait l'hypothèse d'un milieu infini, ce qui n'est pas notre cas. Les fuites ne sont donc pas prises en compte. Pour ce qui est des modes supérieurs, le modèle du transport semble plus « exact », ce que n'est pas celui de la diffusion. Les valeurs propres sont donc naturellement plus cohérentes.

Quant aux rapports de dominance du tableau 6.2, des comportements similaires peuvent être observés entre le modèle du transport et la simulation TRIPOLI-4®. On constate un écart d'environ 5 % entre le transport et la simulation pour le premier rapport de dominance et moins de 10 % pour les autres.

Vecteurs propres

On montre dans cette section les vecteurs propres pour les premier, deuxième et cinquième modes. La renormalisation pour le premier mode a été effectuée au taux de fission. Pour les autres modes, il s'agit de la norme L_2 (norme euclidienne).

Ces trois graphiques (figures 6.3, 6.4 et 6.5) montrent un très bon accord

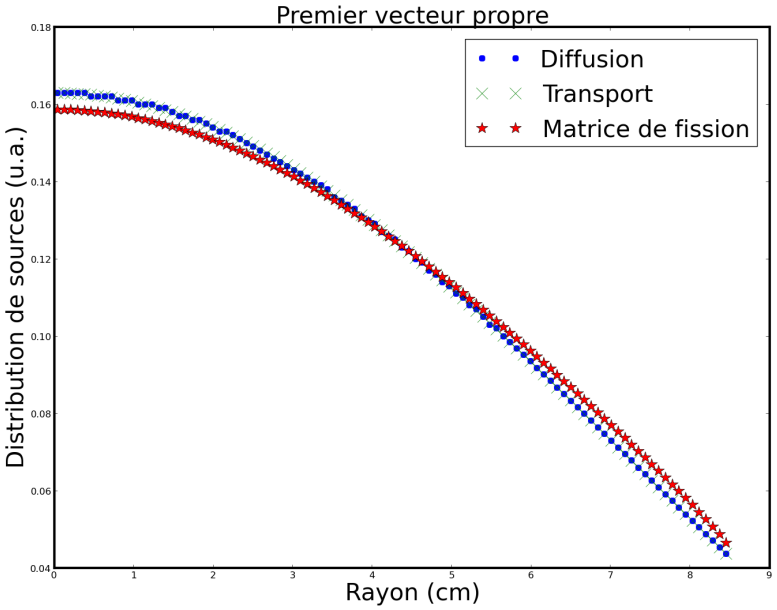


FIGURE 6.3 – Premier vecteur propre.

entre le modèle de la diffusion et celui du transport. On observe quelques différences avec la matrice de fission calculée par le code de l'ordre de quelques pourcents au maximum. Les raisons de ces différences sont les mêmes que pour les écarts observés concernant les valeurs propres. Enfin, on constate l'importance de l'ajustement mode à mode de la « distance d'extrapolation ». En effet, sur la figure 6.5, l'utilisation de $d_5 = \frac{2}{3}\lambda_{tr}$ supprime une oscillation du mode.

6.3.4 Conclusion

Les résultats obtenus par la simulation, bien que présentant quelques écarts, semblent en accord avec les modèles proposés.

Les deux modèles analytiques permettent ainsi de valider l'implémentation effectuée de la méthode de la matrice de fission dans le code de simulation neutronique TRIPOLI-4®.

La correction du transport (distance d'extrapolation) proposée pour le modèle de la diffusion améliore significativement les résultats concernant les valeurs et vecteurs propres.

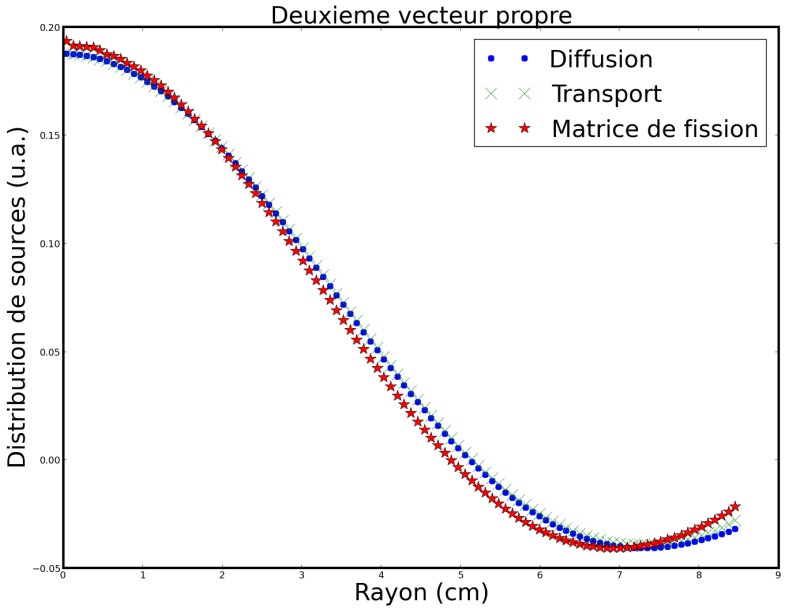


FIGURE 6.4 – Deuxième vecteur propre.

Inversement, une fois validée, cette implémentation fait de TRIPOLI-4® un outil de validation pour les modèles déterministes approchés, comme la diffusion ou les différents modèles de transports simplifiés.

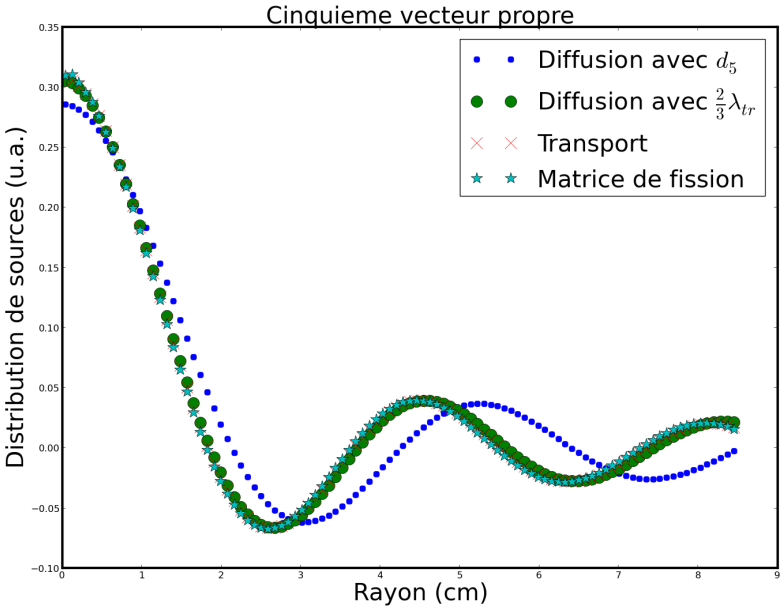


FIGURE 6.5 – Cinquième vecteur propre.

6.4 Obtention d'un écart-type

On cherche à comparer l'écart-type de la première valeur propre de la matrice de fission au k_{eff} fourni par l'estimateur TRACK. L'enjeu est de pouvoir estimer cet écart-type sans avoir à répéter indépendamment la simulation.

6.4.1 Problème de la convergence de la matrice de fission

La méthode de la matrice de fission soulève quelques problèmes d'instabilité. En effet, la matrice K_{ij} étant calculée par la méthode de Monte-Carlo, elle se retrouve impactée par le bruit statistique du batch au cours duquel elle est générée. On montre que ce bruit statistique est proportionnel à $\frac{1}{\sqrt{n}}$, où n représente le nombre de particules simulées au cours du batch.

Afin d'obtenir le k_{eff} et le premier vecteur propre du système, il est nécessaire d'appliquer deux opérateurs non-linéaires à la matrice : une division (cf. équation (6.8)) et une diagonalisation. Ces deux opérateurs sont réputés pour introduire un biais sur les résultats [Sap06].

Il est possible, de manière assez évidente, de supprimer ce biais en agglomérant les éléments de la matrice sans les diviser par les sources à la fin

de chaque batch, mais au tout dernier moment, puis de diagonaliser la matrice (correction apportée à TRIPOLI-4®). L'inconvénient de cette méthode est qu'elle ne fournit qu'une seule valeur rendant impossible le calcul d'un écart-type. Une solution est alors envisageable : réaliser plusieurs calculs de criticité indépendants (stratégie par paquets).

Enfin, les inhomogénéités concernant la taille des volumes peuvent conduire à des inhomogénéités dans la précision du calcul des éléments de la matrice K_{ij} [Duf07, DG09]. Des volumes trop importants vont conduire à des coefficients diagonaux qui vont bénéficier d'une bien meilleure statistique que les coefficients hors diagonaux. Ceci pourrait conduire à une statistique bien moins bonne de l'estimation du k_{eff} et du fondamental.

6.4.2 *Jackknife*

Motivations

La difficulté majeure dans l'obtention d'un écart-type sur les valeurs propres de la matrice de fission est que le calcul des valeurs propres est une opération non linéaire. En effet, il est nécessaire d'effectuer une renormalisation par les sources (division par une valeur aléatoire) ainsi qu'une diagonalisation de la matrice de fission (cf. section 6.1). L'estimation d'un écart-type sur les valeurs propres n'est donc *a priori* pas triviale.

Afin de résoudre le problème, nous mettons en œuvre une méthode statistique appelée *jackknife* pour estimer les écarts-types recherchés [Que56, Mil74, Efr77, ES81, EG83, Nag88, NBGC09, Cha10].

Présentation de la méthode

La méthode du *jackknife* a été introduite par Quenouille [Que56] en tant que technique de réduction de biais. On reprendra les notations de Miller [Mil74].

On part du problème suivant : soit une série d'observations x_1, x_2, ..., x_n, on souhaite trouver une fonction $\hat{\theta}$ prenant en compte la série entière d'observations et donnant une estimation d'un paramètre θ que l'on cherche à mesurer. L'objectif recherché est que cet estimateur dispose de quelques propriétés [Que56] dont la suivante : qu'il ne soit pas biaisé, c'est-à-dire tel que $E\left[\hat{\theta}\right] = \theta$.

Dans le cas d'un biais dans l'estimation, on a

$$E\left[\hat{\theta} - \theta\right] \neq 0. \tag{6.38}$$

On peut montrer que [Que56]

$$E\left[\hat{\theta}\right] = \theta + \frac{a_1}{n} + \frac{a_2}{n^2} + \frac{a_3}{n^3} + \dots . \tag{6.39}$$

On définit $\hat{\theta}_{-i}$ comme l'estimateur $\hat{\theta}$ de θ privé de l'observation i (x_i) et $\tilde{\theta}_i$ comme

$$\tilde{\theta}_i = n\hat{\theta} - (n-1)\hat{\theta}_{-i}. \tag{6.40}$$

On montre que

$$\begin{aligned} E\left[\tilde{\theta}_i\right] &= E\left[n\hat{\theta} - (n-1)\hat{\theta}_{-i}\right], \\ &= nE\left[\hat{\theta}\right] - (n-1)\,E\left[\hat{\theta}_{-i}\right]. \end{aligned} \tag{6.41}$$

Or, on a d'une part, en ne considérant qu'un biais au premier ordre,

$$nE\left[\hat{\theta}\right] = n\theta + a_1 \tag{6.42}$$

et d'autre part

$$(n-1)\,E\left[\hat{\theta}_{-i}\right] = n\theta + \frac{n}{n-1}a_1 - \theta - \frac{1}{n-1}a_1. \tag{6.43}$$

Donc

$$\begin{aligned} E\left[\tilde{\theta}_i\right] &= n\theta + a_1 \\ &\quad - n\theta - \frac{n}{n-1}a_1 + \theta + \frac{1}{n-1}a_1, \\ &= \theta + a_1 + \frac{1}{n-1}a_1 - \frac{n}{n-1}a_1, \\ &= \theta. \end{aligned} \tag{6.44}$$

$\tilde{\theta}_i$ est bien un estimateur non biaisé à l'ordre 1 de θ.

On note au passage que le *jackknife* offre une démonstration de l'utilisation de $\frac{1}{n-1}$ au lieu de $\frac{1}{n}$ pour le calcul de l'écart-type non biaisé que nous ne présenterons pas ici.

Application à la matrice de fission

Nous utilisons cette technique du *jackknife* en post-traitement de TRIPOLI-4® afin d'obtenir un écart-type sur les valeurs propres de la matrice de fission.

La première étape de ce post-traitement consiste à régénérer les matrices de fission batch à batch. En effet, le code calcule, lui, une matrice moyenne (sur tous les batchs déjà simulés).

Pour ce faire, nous utilisons la relation suivante entre la matrice moyenne au batch n (ce que nous fournit le code) $\bar{K}_n$ et la matrice non-moyennée à ce même batch K_n :

$$K_n = n\bar{K}_n - (n-1)\bar{K}_{n-1}. \tag{6.45}$$

Cette série de matrices $K_1, K_2, \ldots, K_n$ correspond à la précédente série x_1, x_2, …, x_n. On note $\bar{K}$ la matrice moyenne, c'est-à-dire

$$\bar{K} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} K_i. \tag{6.46}$$

L'estimateur de la i-ème valeur propre moyenne est la i-ème valeur propre de la matrice $\bar{K}$ et correspond à l'estimateur $\hat{\theta}$ précédent entaché de biais.

De même, $\hat{\theta}_{-j}$ correspond à la i-ème valeur propre de la matrice $\bar{K}_{-j}$, c'est-à-dire de la matrice moyenne de la série de matrice K_i privée de la j-ème matrice.

On obtient ainsi une nouvelle série de valeurs propres $\tilde{\theta}_i$. Comme montré précédemment, la moyenne de cette série, $\tilde{\theta}$, sera non biaisée à l'ordre 1.

On peut alors calculer un écart-type sur la moyenne de la série $\tilde{\theta}_i$:

$$\sigma_{\tilde{\theta}} = \sqrt{\frac{1}{n}\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{\theta}_i - \tilde{\theta}\right)^2}. \tag{6.47}$$

Nous présentons des résultats pour cette méthode dans cette section, ci-après.

Cas de la matrice de fission dans TRIPOLI-4®

Nous avons réalisés 985 simulations indépendantes du jeu de données de la sphère critique précédemment étudiée avec 10^3 batchs (plus 20 batchs discardés) de 10^3 neutrons[2]. La sphère est découpée en 10 volumes-coquilles de $r_c = 0{,}85$ cm chacun.

2. Le nombre de batchs et de particules par batch a été fixé ainsi afin d'obtenir une convergence proche du pcm.

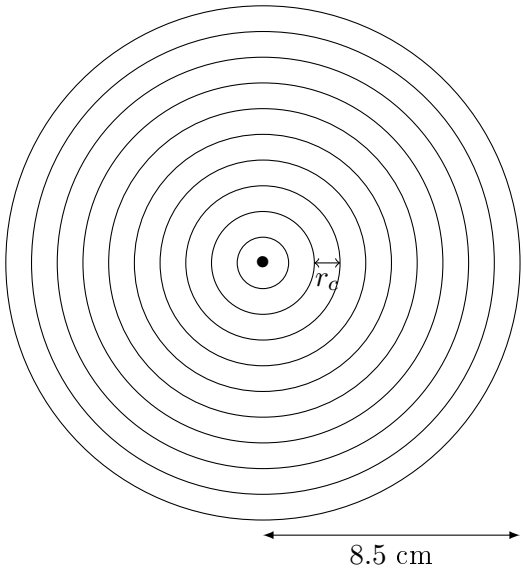


FIGURE 6.6 – Configuration du jeu de données sphérique critique pour le calcul des écarts-types.

Nous obtenons, grâce à ces simulations indépendantes, une série de valeurs propres moyennes ainsi que d'écarts-types sur ces moyennes. Afin de valider la démarche du *jackknife* dans notre cas, nous calculons directement l'écart-type de la série de valeurs propres moyennes et le comparons à la moyenne de la série d'écarts-types (voir figure 6.7). Nous comparons également les valeurs fournies par la matrice de fission pour le k_{eff} à celles de l'estimateur TRACK de TRIPOLI-4®. La valeur du k_{eff} doit être la même pour les deux estimateurs.

Une étude ultérieure sur les éléments de la matrice de fission, dans le cas du jeu de données sphérique critique, a montré des corrélations sur les coefficients de la matrice inférieures à 25 %. Ces corrélations restent donc relativement faibles. Nous pouvons donc raisonnablement utiliser le *jackknife* dans notre cas s'agissant d'une méthode de réduction de biais et non d'élimination des corrélations.

Première valeur propre (k_{eff}) On montre ici, tableau 6.3, les résultats obtenus pour la première valeur propre.

Ce qu'on constate, c'est un écart de l'ordre de 0,1 % entre la moyenne des écart-type et l'écart-type de la série. On observe également que les deux

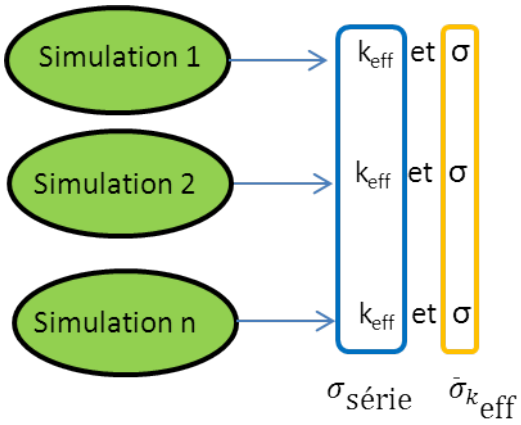


FIGURE 6.7 – Schéma de principe de la validation de la démarche du *jackknife*.

Estimateur	k_{eff}	$\bar{\sigma}_{k_{\text{eff}}}$	$\sigma_{\text{série}}$
KTRACK	1.00125	8.59577×10^{-4}	9.63341×10^{-4}
K_{ij}	1.00088	9.31668×10^{-4}	9.32636×10^{-4}

TABLE 6.3 – Comparaison des résultats obtenus avec le *jackknife* pour la première valeur propre.

estimateurs du k_{eff}, TRACK et K_{ij}, se comprennent mutuellement dans un intervalle à 2-σ.

Ceci nous permet de démontrer la légitimité de l'usage de la technique du *jackknife* pour le calcul d'un écart-type pour l'estimateur du k_{eff} issu de la matrice de fission.

Autres valeurs propres On reproduit dans le tableau 6.4 les valeurs propres autres que la première avec la moyenne de leurs écarts-types ainsi que les écarts-types des séries.

On observe un bon accord, moins de 5 % d'écart, entre la moyenne des écarts-types et les écarts-types de la série. Ceci nous conforte dans l'utilisation de la méthode du *jackknife* pour l'obtention d'un écart-type sur les valeurs propres de la matrice de fission.

Rapport de dominance On se propose d'utiliser également la technique du *jackknife* pour calculer le premier rapport de dominance, $\frac{k_1}{k_0}$, et ainsi obtenir un écart-type. L'estimateur $\hat{\theta}$ n'est donc plus k_i, mais $\frac{k_1}{k_0}$.

Indice i	k_i	$\bar{\sigma}_{k_i}$	$\sigma_{\text{série}}$	Écart relatif
1	4.34944×10^{-1}	8.42125×10^{-4}	8.71027×10^{-4}	$-3{,}3$ %
2	2.57315×10^{-1}	7.24423×10^{-4}	7.04426×10^{-4}	$2{,}8$ %
3	1.75946×10^{-1}	6.35949×10^{-4}	6.13228×10^{-4}	$3{,}7$ %
4	1.29837×10^{-1}	5.67145×10^{-4}	5.74434×10^{-4}	$-1{,}3$ %
5	1.00670×10^{-1}	5.13396×10^{-4}	5.18796×10^{-4}	$1{,}0$ %
6	8.13650×10^{-2}	4.68873×10^{-4}	4.64439×10^{-4}	$1{,}0$ %
7	6.85886×10^{-2}	4.33192×10^{-4}	4.35940×10^{-4}	$-0{,}6$ %
8	6.07660×10^{-2}	3.87788×10^{-4}	4.00896×10^{-4}	$-3{,}3$ %
9	5.53820×10^{-2}	9.77064×10^{-4}	1.01863×10^{-3}	$-4{,}1$ %

TABLE 6.4 – Écarts-types des autres modes que le fondamental obtenus par la méthode du *jackknife*.

Les résultats sont les suivants :

$$\overline{\left(\frac{k_1}{k_0}\right)} = 4.34559 \times 10^{-1},$$
$$\bar{\sigma}_{\frac{k_1}{k_0}} = 8.79941 \times 10^{-4},$$
$$\sigma_{\text{série}} = 9.01635 \times 10^{-4}.$$

L'écart relatif entre $\bar{\sigma}_{\frac{k_1}{k_0}}$ et $\sigma_{\text{série}}$ n'est que de $-2{,}4$ %. On constate que la technique du *jackknife* semble également une fois encore nous permettre d'obtenir un écart-type exploitable, ici dans le cas du rapport de dominance.

6.4.3 URANIE

Une autre voie possible pour estimer les écarts-types des valeurs propres de la matrice de fission est de faire appel à la plate-forme logicielle de calcul d'incertitude URANIE [Gau08].

Cette plate-forme logicielle permet de mener des études de propagation d'incertitudes, d'analyse de sensibilité ou de calibration de code de calcul dans un environnement intégré. Elle est basée sur le framework Root (Version v5.18) développé par le CERN pour la physique des particules.

URANIE dispose de méthodes statistiques permettant de calculer le bais sur un estimateur. Pour le *jackknife*, nous avons fait l'hypothèse d'un biais au premier ordre. URANIE peut nous permettre de considérer des biais d'ordres supérieurs et les estimer afin de pouvoir en tenir compte.

La voie URANIE pourrait donc être retenue dans le futur.

6.5 Accélération de la convergence

On s'intéresse maintenant à la convergence de l'estimateur du k_{eff} calculé par la méthode de la matrice de fission. Il est suggéré dans la littérature (par exemple [DG09]) que le transitoire est plus court pour l'estimateur du facteur de multiplication effectif des neutrons calculé par la matrice K_{ij} que pour les estimateurs classiques. La matrice de fission fournit par ailleurs des résultats exploitables dès les premiers batchs. Elle ne nécessite pas de « discard », contrairement aux estimateurs classiques.

Nous comparons, dans cette section, la convergence des estimateurs classiques et de la matrice de fission concernant le k_{eff} et de la distribution de sources. Nous étudions séparément la dépendance spatiale et la dépendance énergétique. Trois cas sont étudiés : une sphère critique de type « Godiva », un crayon combustible et un cœur de réacteur nucléaire simplifié.

Nous procédons tout d'abord au calcul d'une référence. Cette référence est calculée sur un nombre suffisamment important de batchs et de particules par batch afin d'éviter tout problème de « discard ». Dans le cas d'une simulation parallèle de référence, le nombre de batchs par simulateur est contrôlé.

Puisque le calcul d'un écart-type sur le k_{eff} ou la distribution de sources est problématique pour la matrice de fission, nous nous intéressons plutôt à l'erreur commise sur ces estimations qu'à leur écart-type (cf. section 6.4.2) ; c'est-à-dire à l'écart entre la valeur obtenue et une valeur de référence. La méthode de calcul est présentée dans la section suivante.

Les comparaisons entreprises porteront sur l'estimateur de type corde de la même famille que le KTRACK du code TRIPOLI-4®.

6.5.1 Sphère critique

Jeu de données

Nous souhaitons étudier l'aspect spatial de la convergence dans le cas de la configuration sphérique, légèrement différente de celle utilisée auparavant. Il s'agit cette fois-ci d'une sphère critique de rayon 8,75 cm composée d'^{234}U ($4{,}9357 \times 10^{-4}$ atomes par 10^{-24} cm^3), d'^{235}U ($4{,}4936 \times 10^{-2}$ atomes par 10^{-24} cm^3) et d'^{238}U ($2{,}7213 \times 10^{-3}$ atomes par 10^{-24} cm^3). La sphère est composée de dix coquilles espacées de 0,875 cm. Le système est représenté sur la figure 6.8. La source initiale est uniforme sur toute la géométrie afin d'agglomérer des estimateurs dès les premiers batchs, sur tous les éléments de la matrice.

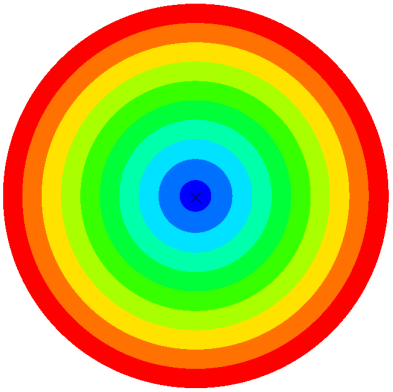


FIGURE 6.8 – Configuration sphérique critique utilisée pour la comparaison de la convergence de l'estimateur K_{ij} aux autres estimateurs du code.

Référence

Afin de comparer les résultats pour les différents estimateurs, nous effectuons tout d'abord une première simulation avec ce jeu de données. Les résultats de cette simulation ont été calculés avec 203511 batchs de 5×10^5 neutrons et avec un « discard » du premier batch, en mode mono-processeur.

Nous obtenons un k_{eff}, calculé par l'estimateur corde, de 0,9982952 avec un écart-type de 0,27 pcm. Quant à la distribution de source, elle aussi calculée avec l'estimateur TRACK, nous observons une convergence de l'ordre de 10^{-2} % (10 pcm).

Résultats

Simulations indépendantes Nous réalisons mille simulations indépendantes du système étudié de cent batchs de 5×10^4 particules. Le premier batch est discardé. Nous observons la convergence du k_{eff} et de la distribution de sources batch à batch ainsi que celle du k_{eff} moyen et de la distribution de sources moyenne (estimateurs KIJ et KTRACK).

La répétition indépendante des simulations permet de « s'affranchir » des effets des fluctuations statistiques. Le but de cette méthode est de déterminer quel estimateur converge le plus vite vers la valeur de référence.

Coefficient de multiplication effectif des neutrons Nous affichons, sur le graphique 6.9, la moyenne des k_{eff} moyens en fonction du batch. Sur le

graphique 6.10, nous affichons l'erreur associée qui correspond à la différence, en valeur absolue, entre le k_{eff} de référence et la moyenne sur les différentes simulations indépendantes du k_{eff} :

$$\text{Erreur}^{(n)} = \left| k_{\text{eff réf}} - \bar{k}_{\text{eff}}^{(n)} \right|, \tag{6.48}$$

où n est le numéro du batch.

Nous constatons que l'estimateur K_{ij} converge beaucoup plus rapidement que l'estimateur corde. Il y a un ordre de grandeur de différence entre l'erreur commise par l'estimateur K_{ij} et l'estimateur corde. On constate que, comme on pouvait s'y attendre, l'erreur décroît bien en $\frac{1}{\sqrt{n}}$. Concernant la matrice de fission, nous obtenons une convergence du k_{eff} de l'ordre de 10 pcm en moins de 100 batchs.

Nous affichons maintenant, sur le graphique 6.11, la moyenne des k_{eff} du batch en fonction du numéro du batch. Sur le graphique 6.12, nous affichons l'erreur associée.

Nous remarquons encore une fois que la convergence du k_{eff} est plus rapide pour l'estimateur K_{ij} que pour l'estimateur corde. L'estimateur K_{ij} n'est ici que faiblement impacté par la phase de convergence des sources. En effet, il semblerait qu'en 3 ou 4 batchs, le k_{eff} issu de la matrice de fission n'est plus impacté par le transitoire tandis qu'il faut attendre le dixième batch pour l'estimateur corde.

Distribution de sources Nous nous intéressons maintenant aux erreurs commises sur la distribution de sources. Nous considérons l'erreur commise au batch n suivante :

$$\text{Erreur}^{(n)} = \max_i \left(\| S_i^{(n)} - S_i^{\text{ref}} \| \right), \tag{6.49}$$

où $\|.\|$ est la norme infinie, $S_i^{(n)}$ est la source intégrée dans le volume i au batch n moyennée sur toutes les simulations et S_i^{ref} la source intégrée de référence dans le volume i. Il s'agit de l'erreur maximale commise au batch n sur la source. Nous affichons sur le graphique 6.13 l'erreur commise sur la distribution de sources moyenne et sur le graphique 6.14 l'erreur commise batch à batch.

Nous tirons des conclusions similaires à celles du k_{eff} concernant ces deux graphiques. Les estimateurs fondés sur la matrice de fission semblent converger significativement plus vite que l'estimateur corde.

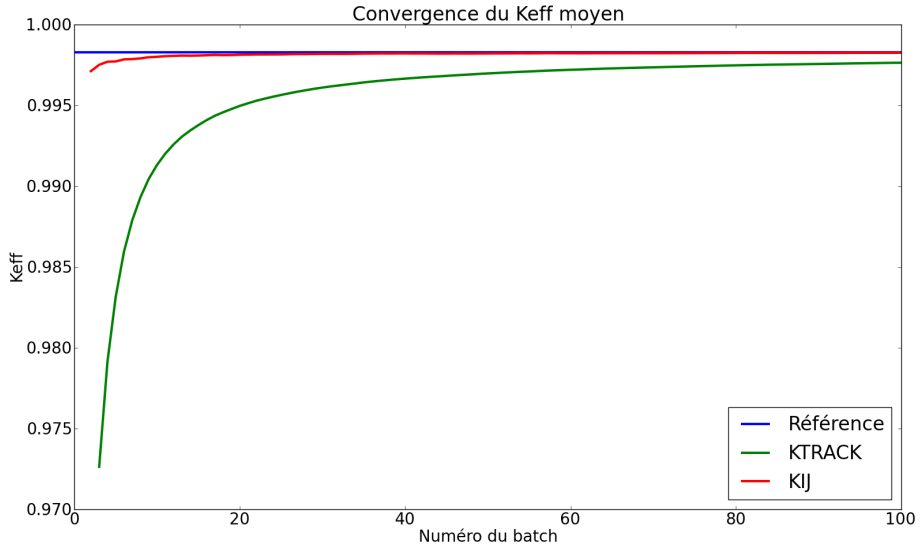


FIGURE 6.9 – Convergence du k_{eff} moyen.



FIGURE 6.10 – Erreur absolue commise sur le k_{eff} moyen

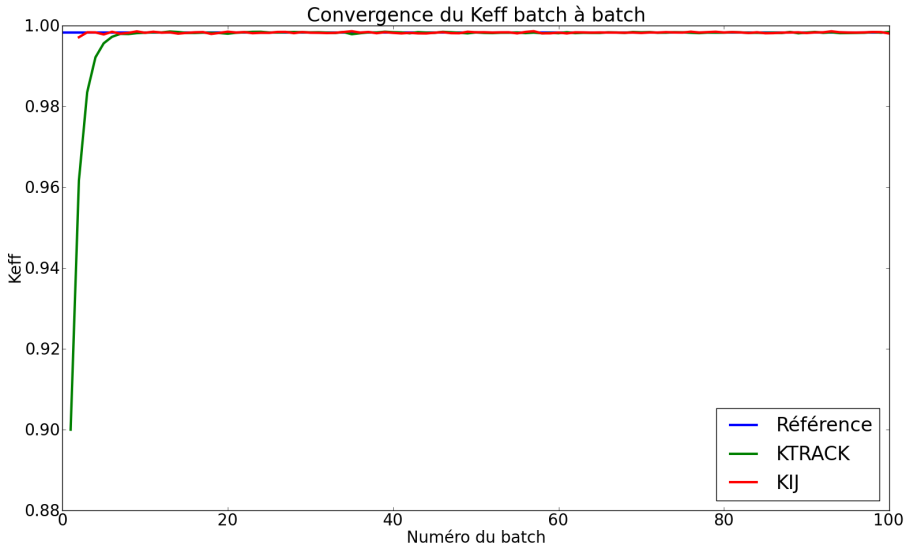


FIGURE 6.11 – Convergence du k_{eff} batch à batch.

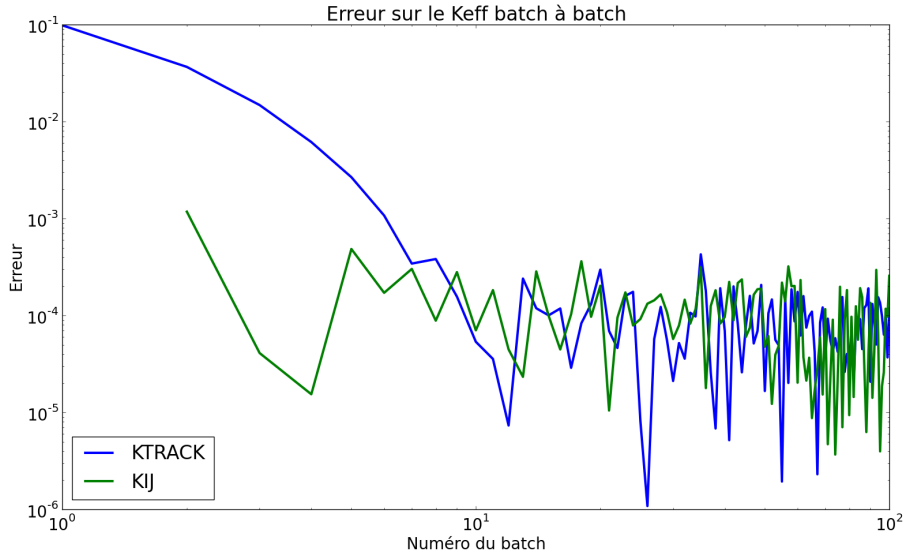


FIGURE 6.12 – Erreur absolue commise sur le k_{eff} batch à batch.

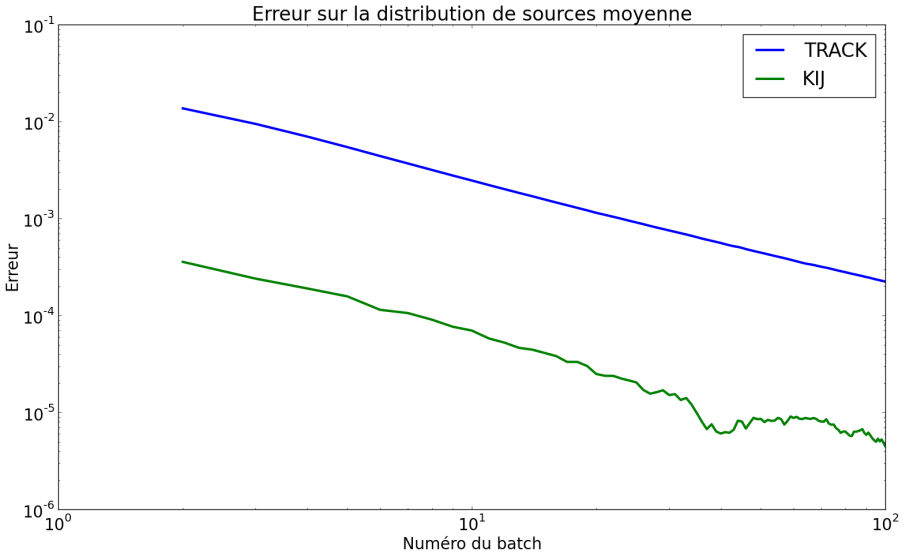


FIGURE 6.13 – Erreur absolue commise sur la distribution de sources moyenne.

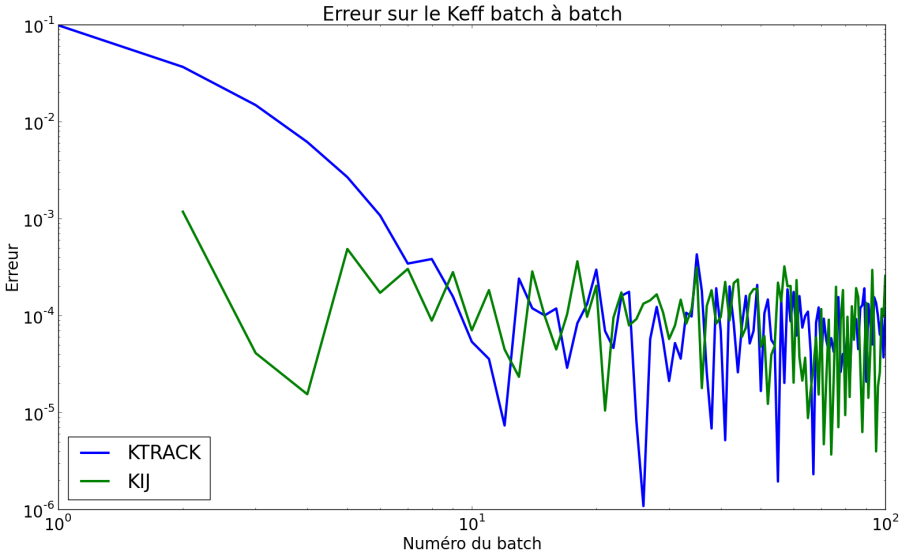


FIGURE 6.14 – Erreur absolue commise sur la distribution de sources batch à batch.

Simulation davantage convergée Nous effectuons à nouveau le calcul, une seule simulation, avec des batchs de 5×10^4 neutrons. Nous discardons le premier batch. Les résultats sont édités à la fin de chaque batch. La simulation est réalisée sur cinquante processeurs (soit 48 simulateurs, un collecteur et un moniteur (voir section 2.7.2)).

En ce qui concerne le k_{eff}, on constate sur la figure 6.15 et sur la figure 6.16 que la convergence de la première valeur propre de la matrice du fission est bien plus rapide que la convergence des autres estimateurs. En effet, dès les premiers batchs, l'erreur commise par la première valeur propre de la matrice de fission n'est que d'une centaine de pcm alors qu'elle est comprise entre 10^3 et 10^4 pcm pour les autres estimateurs. La convergence à 10 pcm est atteinte pour la matrice de fission au bout d'environ 800 batchs alors qu'il faut attendre 10^4 batchs pour les autres estimateurs.

Nous attribuons le « plateau » apparent concernant les erreurs commises par le KSTEP, KTRACK et KCOLL, sur le graphique 6.16, pour les cent premiers batchs , aux corrélations. En effet, seul le premier batch a été discardé.

Nous ne regardons la convergence qu'à 10 pcm car des biais de l'ordre du pcm peuvent apparaître dans le calcul du k_{eff}. Il nous serait alors difficile de trancher entre erreur commise sur le résultat et simple biais. Les oscillations apparentes sur l'erreur commise par l'estimateur K_{ij} seraient dues aux non linéarités des diagonalisations effectuées.

On s'intéresse maintenant à la distribution de sources, figure 6.17. Nous constatons que la distribution de sources converge plus rapidement pour la matrice de fission que pour l'estimateur TRACK. Dès les premiers batchs, l'erreur commise par l'estimateur K_{ij} dix fois plus petite que celle commise par l'estimateur TRACK. On atteint une précision de l'ordre de 10 pcm au bout d'environ 1000 batchs pour la matrice de fission, tandis qu'il faut attendre 10^4 batchs pour atteindre la même précision avec l'estimateur TRACK.

Facteur d'accélération Afin d'estimer le facteur d'accélération de la méthode de la matrice de fission, nous cherchons à estimer le temps de simulation avec et sans la matrice de fission. Pour ce faire, nous effectuons deux simulations : une sans le calcul de la matrice de fission et une avec. La simulation est effectuée à partir du même jeu de données utilisé précédemment pour l'étude de la dépendance spatiale. Cette fois-ci, nous effectuons les calculs sur 10^3 batchs de 5×10^4 particules. Le premier batch est discardé et les éditions des scores sont demandées tous les 100 batchs. 50 processeurs, dont 48 simulateurs, ont été utilisés.

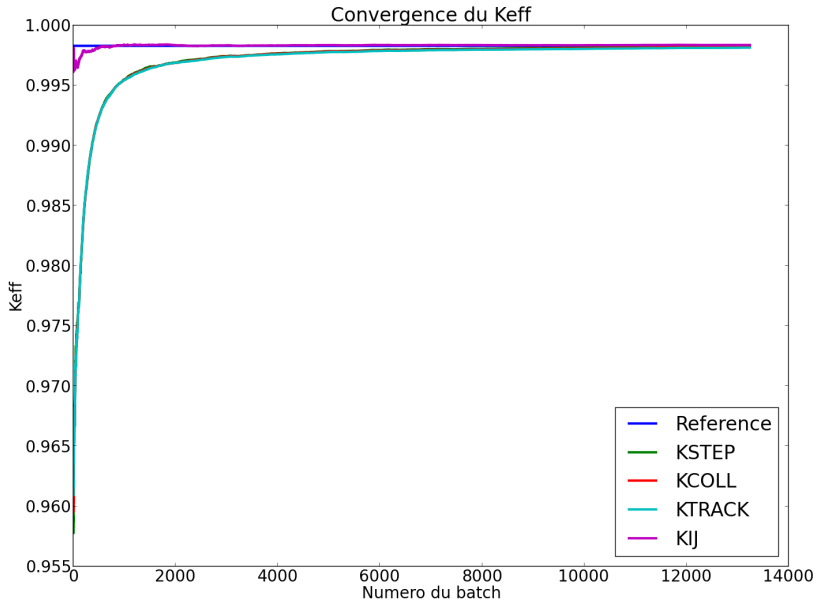


FIGURE 6.15 – Comparaison de la convergence des différents estimateurs du k_{eff} pour la configuration sphérique.

Le temps de simulation sans les scores est de 4 minutes et 11 secondes. Dans le cas avec les scores, il est de 4 minutes et 43 secondes. L'impact du calcul de la matrice de fission est donc faible sur le temps de simulation.

De plus, on remarque qu'en moyenne l'erreur commise sur le k_{eff} ou la distribution de sources est 10 fois plus faible pour l'estimateur K_{ij}. On en conclut que nous avons une accélération due à la matrice de fission qui se traduit par une multiplication par 100 de la FoM (voir définition au chapitre 4) pour le facteur de multiplication effectif des neutrons ainsi que pour la distribution de sources.

6.5.2 Crayon combustible

Nous étudions maintenant l'aspect énergétique pour un crayon combustible. Nous envisageons une discrétisation énergétique en trois groupes :

1. un premier groupe rapide : de 20 MeV à 2 MeV ;
2. un deuxième groupe rapide : de 2 MeV à 0,5 MeV ;
3. un groupe thermique : de 0,5 MeV à 10^{-11} MeV.

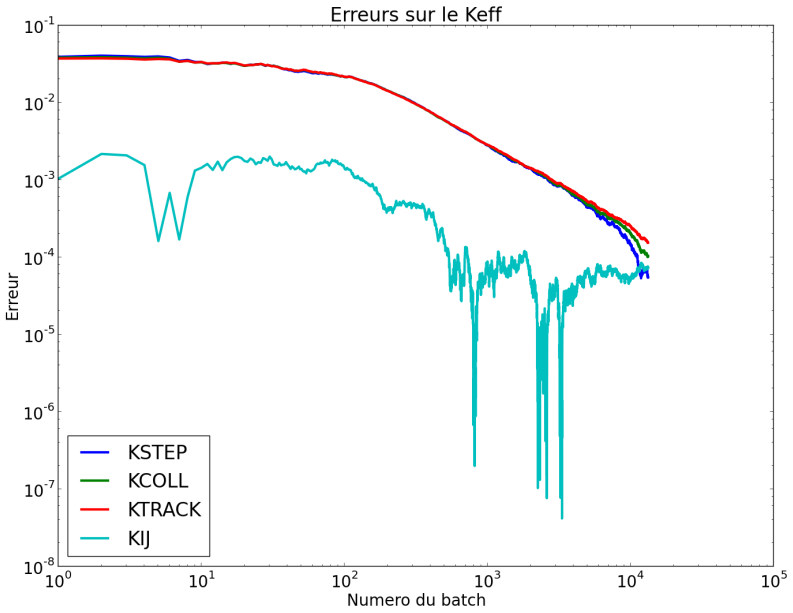


FIGURE 6.16 – Erreur absolue commise par les différents estimateurs du k_{eff} pour la configuration sphérique.

Nous comparons la convergence du k_{eff} calculé grâce à la matrice de fission à celle des estimateurs usuels du code TRIPOLI-4®. Nous comparons également le spectre de fission calculé par le code (estimateur KSTEP) au premier vecteur propre de la matrice de fission.

Jeu de données

Le cas retenu pour cette étude est un crayon combustible. Ce crayon combustible a une hauteur de 4 m. La cellule a une largeur et une longueur de 0,63 cm. Le crayon est composé de trois parties :

1. une zone combustible cylindrique de 0,407 cm composée d'^{235}U (1,136$\times$ 10^{-3} atomes par 10^{-24} cm^3), d'^{238}U (2,1768 $\times$ 10^{-2} atomes par 10^{-24} cm^3) et d'^{16}O (4,58 $\times$ 10^{-2} atomes par 10^{-24} cm^3) ;
2. d'une gaine comprise entre un rayon de 0,407 et 0,477 cm composée de ^{91}Zr (3,8629 $\times$ 10^{-2} atomes par 10^{-24} cm^3) ;
3. d'un modérateur (de l'eau) occupant le reste de la cellule.

Des conditions de réflexion sont imposées sur les bords de la cellules, sauf aux extrémités (fuites). Le système est représenté sur la figure 6.18.

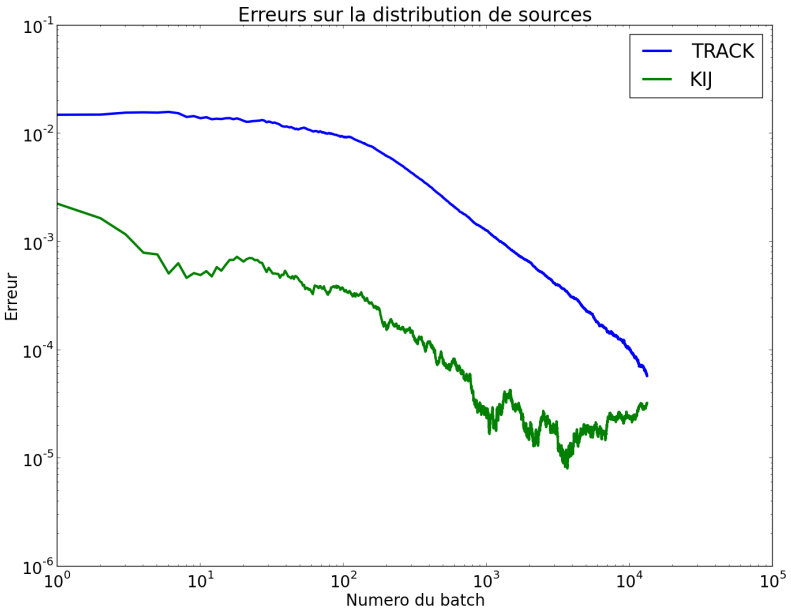


FIGURE 6.17 – Erreur absolue commise par l'estimateur TRACK et la matrice de fission sur la distribution de sources pour la configuration sphérique.

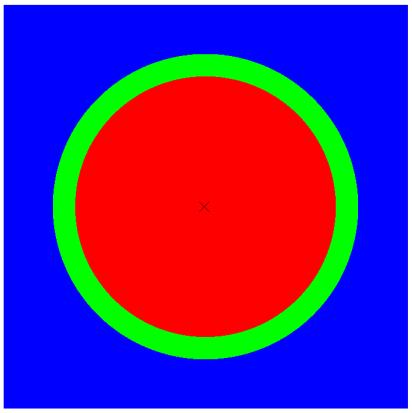


FIGURE 6.18 – Crayon combustible : visualisation du jeu de données.

Nous réalisons la simulation avec 10^6 batchs de 10^5 neutrons. Le premier batch est discardé. La simulation a tourné en parallèle sur cinquante

processeurs (48 simulateurs). Les effets de discard sont négligeables.

Référence

Nous prenons pour référence les résultats édités lors du dernier batch de la simulation, c'est-à-dire, dans notre cas, au batch 13378.

Nous prenons l'estimateur KTRACK du k_{eff} comme référence. Le coefficient de multiplication effectif des neutrons vaut alors 1,380228 avec un écart-type de $5{,}005628 \times 10^{-5}$, soit un écart-type relatif de l'ordre de 3 à 4 pcm. Quant au spectre de fission, l'écart-type est compris entre 3×10^{-3} % et 7×10^{-3} %.

Résultats

Nous observons dans un premier temps la convergence du k_{eff}. On peut constater sur la figure 6.19 et sur la figure 6.20 que la convergence pour les différents estimateurs s'effectue à la même vitesse.

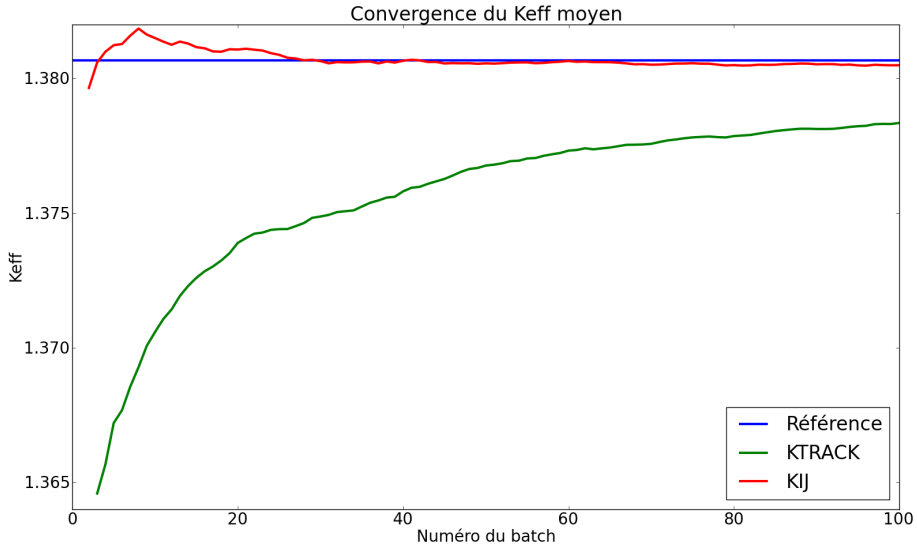


FIGURE 6.19 – Comparaison de la convergence des différents estimateurs du k_{eff} pour le crayon combustible.

Dans un second temps, nous nous intéressons à l'erreur maximale commise sur la distribution de sources, groupe par groupe. La figure 6.21 montre le spectre des neutrons calculé de manière classique par TRIPOLI-4® ainsi

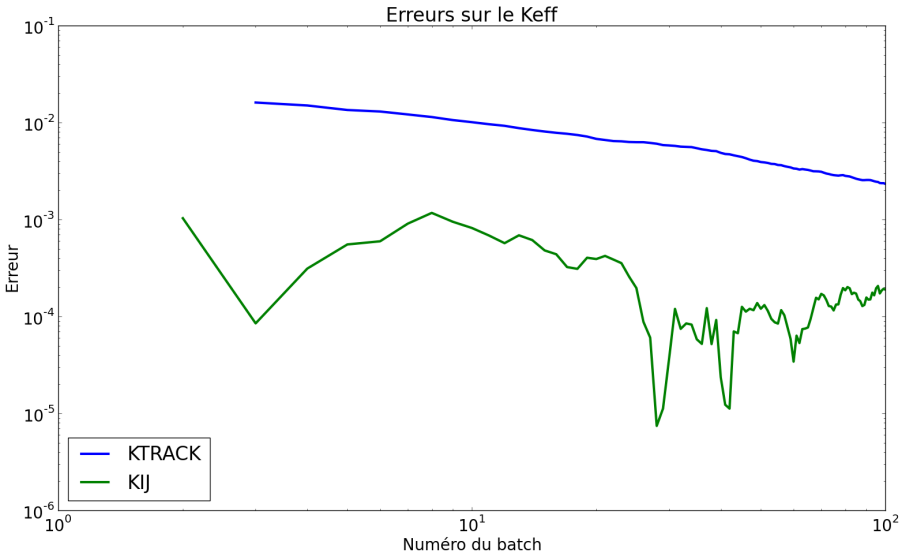


FIGURE 6.20 – Erreur absolue commise par les différents estimateurs du k_{eff} pour le crayon combustible.

que le premier vecteur propre de la matrice de fission. Les deux courbes sont superposées. Les résultats sont donc en accord.

Nous représentons sur la figure 6.22 les erreurs maximales commises sur le spectre d'émission. On observe ici un gain en terme de vitesse de convergence. On remarque également un écart d'un facteur 10 entre l'estimateur KSTEP et l'estimateur KIJ.

Facteur d'accélération

Tout comme pour le jeu de données sphérique critique, nous cherchons à déterminer l'impact du calcul de la matrice de fission sur le temps de simulation. Pour la configuration sphérique critique, l'impact était faible. À ce moment là, seul l'aspect géométrique était pris en compte. Nous cherchons maintenant à étudier l'effet des maillages énergétiques sur ce temps de calcul.

Cette estimation du temps de simulation est effectuée sur la cellule précédemment décrite. Les deux simulations, avec et sans la matrice de fission, sont effectuées sur 50 processeurs (48 simulateurs). Nous demandons à TRIPOLI-4® d'effectuer les simulations sur 10^3 batchs de 10^5 neutrons. Une édition des scores est demandée tous les dix batchs. Le premier batch est discardé.

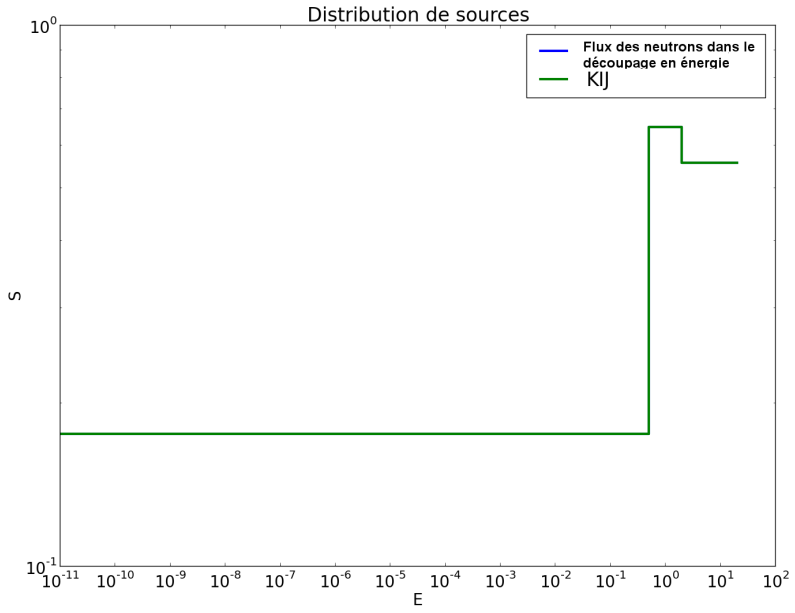


FIGURE 6.21 – Spectre de fission pour le crayon combustible. L'énergie E est exprimée en MeV.

Dans le cas où nous ne demandons pas au code de calculer la matrice de fission, le temps de simulation est de 101 minutes et 45 secondes. Lorsque nous lui demandons de calculer la matrice K_{ij}, le temps de simulation passe à 107 minutes et 43 secondes. Encore une fois, l'impact de la matrice de fission sur le temps de calcul est faible.

On constate que l'erreur moyenne commise sur le k_{eff} est du même ordre pour chacun des estimateurs. Il n'y a donc pas d'accélération pour le facteur de multiplication effectif des neutrons quant à l'utilisation de la matrice de fission. Toutefois, l'erreur sur le spectre de fission est 10 fois plus faible pour la matrice de fission que pour l'estimateur classique. On en conclut donc que la FoM est multipliée par 100 dans le cas ou les estimations sont effectuées par la matrice K_{ij}, d'où un facteur d'accélération de 100.

6.5.3 Cœur de réacteur simplifié

Nous souhaitons comparer les résultats obtenus par les estimateurs classiques du k_{eff} et de la distribution de sources de TRIPOLI-4® avec ceux de la matrice de fission dans le cas d'un cœur de réacteur. Les assemblages sont homogénéisés afin d'avoir une description à plus gros grains du cœur. En effet,

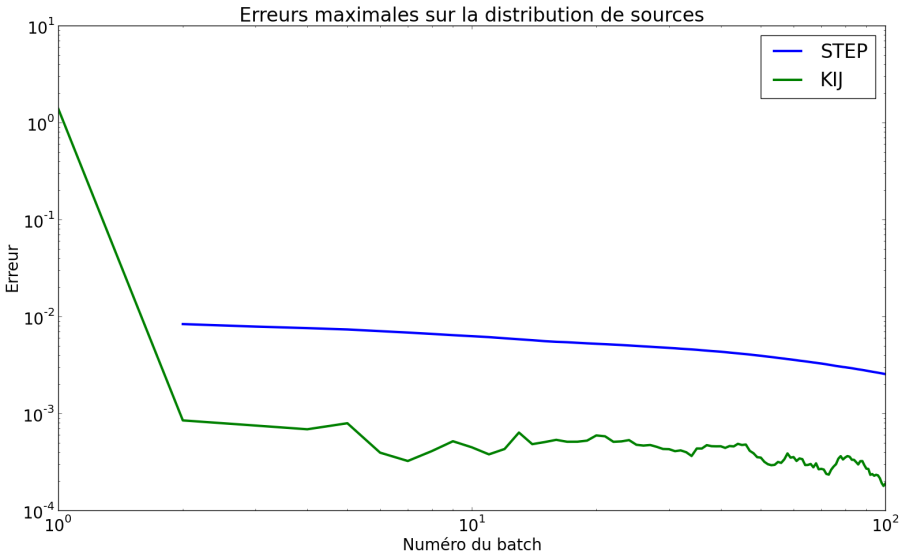


FIGURE 6.22 – Erreur maximale commise par l'estimateur spectre de fission et la matrice de fission.

pour des raisons d'ordre informatique, il nous est difficile, à l'heure actuelle, d'envisager le post-traitement de matrices plus grosses pour un nombre de batchs raisonnable. Pour cette raison, nous nous intéressons uniquement à la composante spatiale.

Jeu de données

Le cœur considéré comprend 125 volumes dont 109 volumes fissiles correspondant à des assemblages homogénéisées. Ces assemblages sont composées d'^{238}U ($2{,}2 \times 10^{-2}$ atomes par 10^{-24} cm^3), d'^{235}U ($2{,}37 \times 10^{-4}$ atomes par 10^{-24} cm^3), d'hydrogène ($6{,}664 \times 10^{-2}$ atomes par 10^{-24} cm^3) et d'oxygène ($4{,}54 \times 10^{-2}$ atomes par 10^{-24} cm^3). Ces compositions s'avèrent non physiques. En effet, elles ont été ajustées afin d'obtenir un k_{eff} autour de 1. Les autres 16 volumes correspondent à de l'eau. Le rayon du cœur est de 200 cm pour 100 cm de hauteur. Chaque volume a une largeur et une longueur de 25 cm et une hauteur de 100 cm. Nous imposons des conditions de réflexion en haut et en bas du cœur. Il n'y a pas de conditions particulières imposées autour. La configuration est représentée sur la figure 6.23.

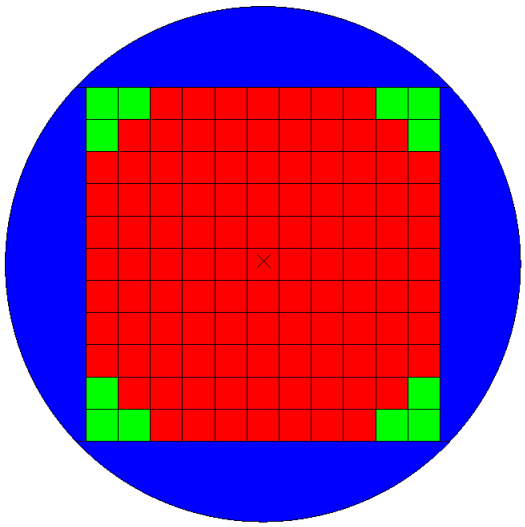


FIGURE 6.23 – Cœur de réacteur utilisé pour la comparaison de la convergence de l'estimateur K_{ij} aux autres estimateurs du code. Les volumes en bleu et en vert correspondent à de l'eau. Les volumes en rouges correspondent aux assemblages homogénéisés.

Référence

Afin d'établir une référence, nous effectuons un calcul préliminaire pour ce jeu de données. Les résultats ont été obtenus pour 423 000 batchs de 10^5 neutrons. Les cent premiers batchs ont été discardés.

Concernant le k_{eff}, nous prenons comme référence le KTRACK. Sa valeur est de 1,005657 avec un écart-type de $6{,}000376 \times 10^{-6}$, soit une convergence d'environ 0,6 pcm. Quant aux sources, calculées par l'estimateur STEP, le niveau de convergence est compris entre 10 et 40 pcm.

Résultats

Simulations Nous réalisons cent simulations indépendantes du système considéré sur 200 batchs de 10^4 neutrons. Le premier batch est discardé.

Coefficient de multiplication effectif des neutrons Nous représentons sur la figure 6.24 la convergence du k_{eff} pour les estimateurs KTRACK et KIJ. On constate que les deux estimateurs tendent rapidement vers la valeur de référence.

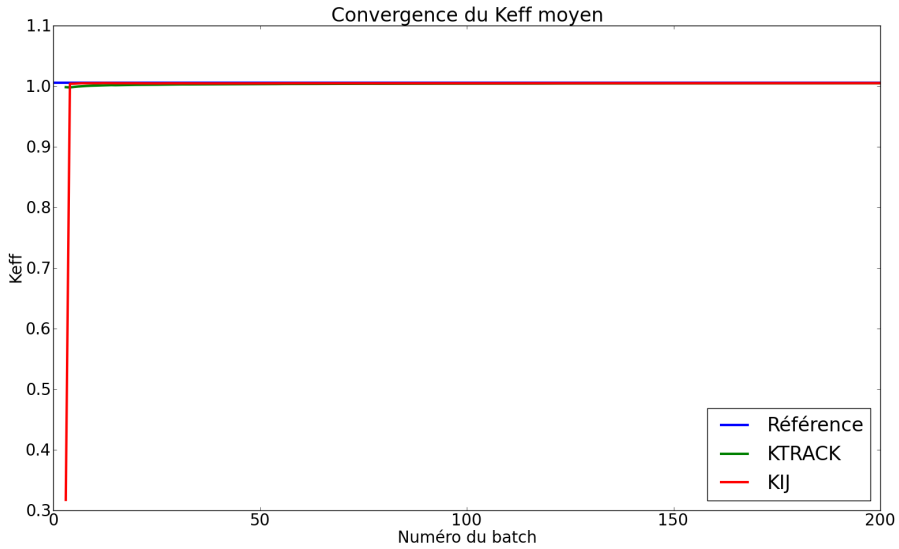


FIGURE 6.24 – Comparaison de la convergence de l'estimateur TRACK et de l'estimateur KIJ pour le k_{eff} dans le cas du cœur simplifié.

Dans un second temps et à l'instar de ce que nous avons fait pour les deux cas précédents, nous nous intéressons à l'erreur commise sur l'estimation du k_{eff} par les deux estimateurs comparés. Ces erreurs sont représentées sur le graphique 6.25. On observe une erreur huit à dix fois plus faible sur les cent premiers batchs pour l'estimateur KIJ que pour le KTRACK. Pour les cent derniers batchs, l'estimateur KIJ commet une erreur deux fois moins grande que l'estimateur TRACK. Nous obtenons donc un gain, d'un facteur quatre à cent, sur la FoM en utilisant la matrice de fission.

Distribution de sources Nous affichons, sur le graphique 6.26 l'erreur maximale commise par l'estimateur KIJ et l'estimateur STEP sur la distribution de sources. Nous obtenons, au bout des 200 batchs, une erreur quatre fois plus faible pour l'estimateur KIJ que pour l'estimateur STEP, soit une amélioration de la FoM d'un facteur 16. Nous attribuons la non baisse de l'erreur de l'estimateur STEP aux corrélations batch à batch. Ceci est un phénomène attendu, s'agissant d'un cas naturellement sujet à de fortes corrélations et pour lequel seul le premier batch a été discardé. Le « plateau » observé peut également être dû à la définition de l'erreur que nous utilisons. En effet, nous intéressons au maximum de l'erreur commise sur l'ensemble des volumes. Dans ce genre de configuration à grandes dimensions, les neutrons

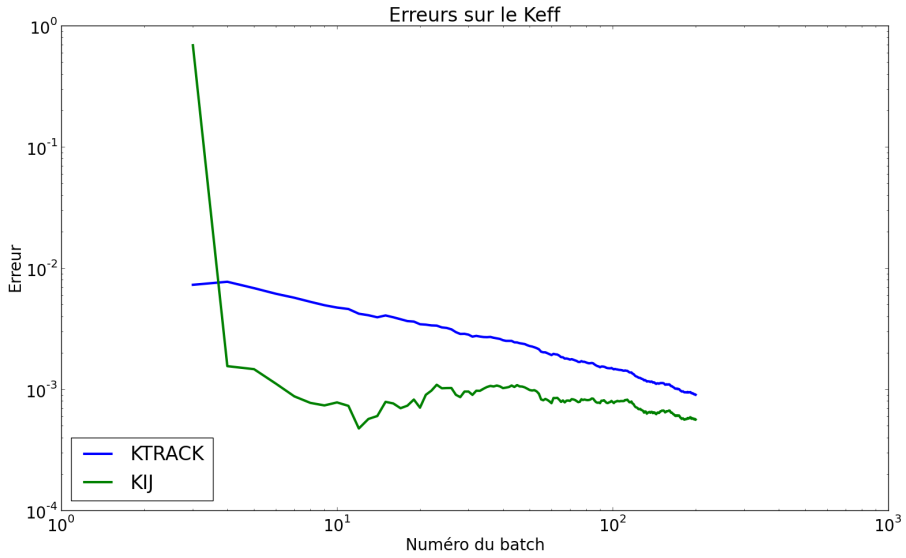


FIGURE 6.25 – Erreur absolue commise par les différents estimateurs du k_{eff} dans le cas du cœur simplifié.

mettent un certain nombre de batchs avant de s'éloigner de leurs positions initiales. Ceci a pour effet de conserver l'erreur maximale quasi-constante durant les premiers batchs.

Conclusion sur l'utilisation de la matrice de fission et son impact sur la FoM

Dans les trois cas étudiés (sphère critique, cellule, cœur simplifié), l'utilisation de la matrice de fission a permis de réaliser un gain significatif sur la FoM pouvant aller jusqu'à un facteur cent, que ce soit pour l'estimation du k_{eff} ou de la distribution de sources, par rapport aux estimateurs classiques de TRIPOLI-4®.

La matrice de fission semble être moins « sensible » aux corrélations inter-batchs, ce que confirment les résultats obtenus sur le cœur.

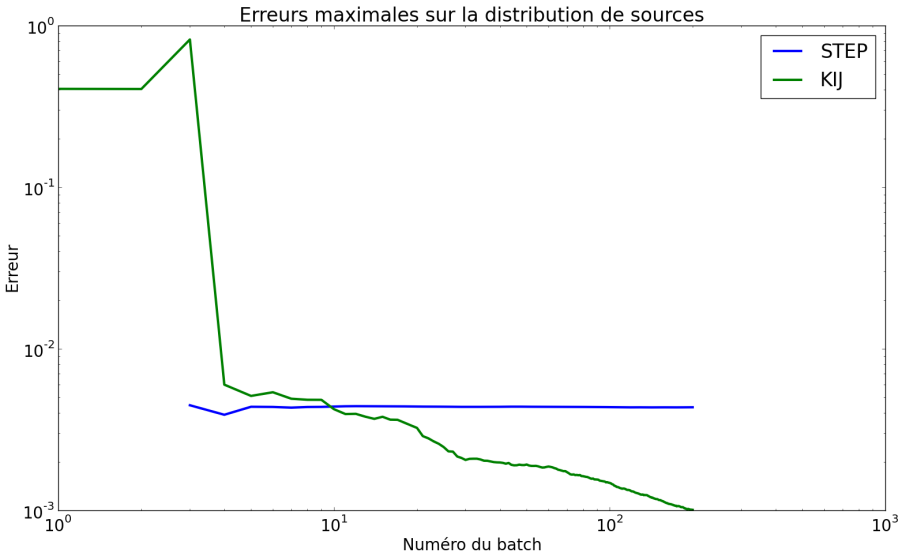


FIGURE 6.26 – Erreur maximale commise par les différents estimateurs de la distribution de sources dans le cas du cœur simplifié.

6.6 Conclusion

Grâce à l'implémentation de la méthode de la matrice de fission, validée par des modèles analytiques, nous disposons d'un nouvel estimateur du k_{eff} ainsi que de la distribution de sources. Les autres modes sont également disponibles et nous permettent, entre autres, d'estimer le rapport de dominance.

Nous avons utilisé la méthode du *jackknife* afin de contrer les effets de non linéarité pour estimer la variance de ces nouveaux estimateurs.

Enfin, des tests de performance par rapport aux estimateurs classiques du k_{eff} et de la distribution des sources de neutrons ont été effectués. La FoM est 4 à 100 fois plus élevée pour l'estimateur KIJ que pour les autres estimateurs, traduisant ainsi un gain de performance.

Chapitre 7

Biaisage par carte d'importance

Sommaire

7.1 Transformation exponentielle avec source fixe de fission 120
7.1.1 Carte d'importance 120
7.1.2 Méthode de la transformation exponentielle 122
7.2 Calcul du flux adjoint à partir de la matrice de fission 123
7.2.1 Théorie 123
7.2.2 Exemple 125
7.2.3 Développements supplémentaires de la matrice de fission 129
7.3 Principe de mise en œuvre 130
7.3.1 Utilisation d'une carte d'importance dans le cas d'une simulation à source fixe 130
7.3.2 Stratégies de biaisage 133
7.4 Conclusion 142

Ce chapitre propose un second niveau d'accélération d'un calcul critique.

Le premier niveau correspond à celui de la mise en œuvre de la matrice de fission (chapitre 6).

Le niveau envisagé concerne, dans ce chapitre, la simulation de l'histoire des neutrons à l'intérieur d'un batch donné, considérant alors que la simulation est ramenée à un problème à source fixe puisque les sources de fission sont connues au début du batch. L'idée est alors d'utiliser la technique de la transformation exponentielle (section 4.2.5) usuellement mise en œuvre pour un problème à source fixe mais dont la carte d'importance serait construite à l'aide du flux adjoint déduit de la matrice de fission.

7.1 Transformation exponentielle avec source fixe de fission

Certaines techniques de biaisage nécessitent l'utilisation d'une carte d'importance. C'est le cas, par exemple, dans TRIPOLI-4®. Parmi les techniques ayant recours à de telles cartes, nous pouvons citer la technique de la transformation exponentielle dont la mise en œuvre fait l'objet de ce chapitre.

On se propose de démontrer le schéma d'utilisation d'une telle carte et les corrections à apporter afin de prendre en compte le biais introduit.

7.1.1 Carte d'importance

On rappelle l'équation du transport sous sa forme intégro-différentielle :

$$\begin{aligned}&\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi(P) + \Sigma_t(\vec{r},E)\phi(P) = \\ &\int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r},E' \to E,\vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE' \\ &+ \frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty \int_{4\pi} \nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega}, \end{aligned} \tag{7.1}$$

avec

$$P = (\vec{r},E,\vec{\Omega}). \tag{7.2}$$

Notons $\phi^*(P) = I(P)\phi(P)$ le flux biaisé avec $I(P)$ la *carte d'importance*. On a d'une part

$$\begin{aligned}
&\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi(P) + \Sigma_t(\vec{r},E)\phi(P) \\
&= \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\frac{\phi^*(P)}{I(P)} + \Sigma_t(\vec{r},E)\frac{\phi^*(P)}{I(P)}, \\
&= \vec{\Omega}.\frac{I(P)\vec{\nabla}\phi^*(P) - \phi^*(P)\vec{\nabla}I(P)}{I^2(P)} + \Sigma_t(\vec{r},E)\frac{\phi^*(P)}{I(P)}, \\
&= \frac{1}{I(P)}\left[\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi^*(P) + \left(-\frac{\left|\vec{\nabla}I(P)\right|}{I(P)}\vec{\Omega}.\frac{\vec{\nabla}I(P)}{\left|\vec{\nabla}I(P)\right|} + \Sigma_t(\vec{r},E)\right)\phi^*(P)\right], \\
&= \frac{1}{I(P)}\left(\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi^*(P) + \Sigma_t^*(\vec{r},E)\phi^*(P)\right), \qquad (7.3)
\end{aligned}$$

où

$$\Sigma_t^*(\vec{r},E) = \Sigma_t(\vec{r},E) - \frac{\left|\vec{\nabla}I(P)\right|}{I(P)}\vec{\Omega}.\frac{\vec{\nabla}I(P)}{\left|\vec{\nabla}I(P)\right|}\,; \qquad (7.4)$$

et d'autre part

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE' \\
&+\frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty\int_{4\pi}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega} \\
&=\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\frac{\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}d\vec{\Omega}'dE' \\
&+\frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty\int_{4\pi}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\frac{\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}dE'd\vec{\Omega} \\
&=\frac{1}{I(P)}\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\frac{I(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE' \\
&+\frac{1}{I\,(P)}\frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty\int_{4\pi}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\frac{I\,(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega} \\
&=\frac{1}{I(P)}\left[\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega})\frac{I(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE'\right. \\
&\left.+\frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty\int_{4\pi}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\frac{I(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega}\right]. \qquad (7.5)
\end{aligned}$$

On obtient donc l'égalité suivante

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r},E' \to E,\vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE' \\
&+ \frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty \int_{4\pi} \nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega} \\
&= \frac{1}{I(P)}\left[\int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r},E' \to E,\vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})\frac{I(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE'\right. \\
&\left.+\frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty \int_{4\pi} \nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\frac{I\,(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega}\right] \qquad (7.6)
\end{aligned}$$

et ainsi

$$\begin{aligned}
&\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi^*(P) + \Sigma_t^*(\vec{r},E)\phi^*(P) \\
&= \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r},E' \to E,\vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})\frac{I(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}'dE' \\
&+ \frac{1}{k}\frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int_0^\infty \int_{4\pi} \nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\frac{I\,(P)}{I(\vec{r},E',\vec{\Omega}')}\phi^*(\vec{r},E',\vec{\Omega}')dE'd\vec{\Omega}. \qquad (7.7)
\end{aligned}$$

On constate qu'on peut biaiser chaque opérateur de l'équation du transport de manière indépendante. Si dans le changement de variable nous réalisons en même temps la transformation exponentielle, le biaisage de la diffusion et des sources, on peut cependant remarquer qu'il est possible de segmenter l'équation complète en trois parties, ce qui permet, dans la pratique, de réaliser les trois biaisages indépendamment. Cette propriété est notamment utilisée dans les phases de conception des codes.

Cette technique est, dans la suite de ce chapitre, mise en œuvre dans le cadre du biaisage par la technique de la transformation exponentielle.

7.1.2 Méthode de la transformation exponentielle

La méthode de la transformation exponentielle, présentée à la section 4.2.5, introduit une direction d'intérêt $\vec{\Omega}_{\text{int}}$ et à un facteur de biaisage k.

TRIPOLI-4® [Tea13] définit la direction d'intérêt comme

$$\vec{\Omega}_{\text{int}} = \frac{1}{k}\frac{\vec{\nabla}I}{I}, \qquad (7.8)$$

ce qui implique que

$$k = \left|\left|\frac{\vec{\nabla}I}{I}\right|\right|. \qquad (7.9)$$

Pour un problème à source fixe, TRIPOLI-4® autorise l'utilisateur à saisir manuellement les valeurs de k (l'atténuation géométrique) ou peut les calculer lui-même grâce au module *INIPOND* [Tea13]. Ce module calcule k pour chaque groupe d'énergie, en correspondance avec l'équation de Placzek multi-groupe [Tea13, WW58]. Chaque section efficace macroscopique totale, pour chaque groupe, est condensée avec un spectre de Maxwell, un spectre de ralentissement en $1/E$ et un spectre de Watt-Cranberg.

L'utilisateur a donc besoin de définir un maillage énergétique et un coefficient β pour le premier détecteur dont la signification est explicitée dans l'annexe E.

L'idée est donc d'offrir ce même type de fonctionnalités pour un calcul critique. La fonction d'importance I pourrait être déduite du flux adjoint calculé à l'aide de la matrice de fission comme nous allons le montrer ci-après.

7.2 Calcul du flux adjoint à partir de la matrice de fission

Outre le calcul du k_{eff} et de la distribution de sources (chapitre 6), la matrice de fission permet également de calculer le flux adjoint. L'obtention du flux est une condition nécessaire à la mise en œuvre du jeu à variance nulle (annexe B). Nous montrons ici comment calculer ce flux adjoint à partir de la matrice K_{ij}.

7.2.1 Théorie

Nous montrons, dans cette section, le lien entre la matrice de fission K_{ij} et le flux adjoint ϕ^*. Pour commencer, nous définissons les deux opérateurs suivants G et F.

F est l'opérateur de fission qui fournit, à partir du flux ϕ, la quantité de particules produites par fission :

$$F\phi = \sum_{\text{m}} \nu_m \sigma_{f_m} \phi, \tag{7.10}$$

où m représente un milieu.

G, l'opérateur de Green, quant à lui, fournit le flux ϕ à partir des sources S. On a

$$G : S \longmapsto \phi. \tag{7.11}$$

On a montré précédemment (section 6.1) que

$$S_{n+1} = k^{(n)} S_n, \tag{7.12}$$

donc que

$$S_{n+1} = \frac{1}{k^{(n)}} FGS_n. \tag{7.13}$$

En multipliant à gauche par l'opérateur G, on obtient :

$$GS = G\frac{1}{k}FGS. \tag{7.14}$$

En faisant appel aux définitions introduites, on montre que

$$\phi = \frac{1}{k}GF\phi. \tag{7.15}$$

En multipliant à gauche par G^{-1} (l'inverse de G), on a :

$$\begin{aligned} G^{-1}\phi &= \frac{1}{k}G^{-1}GF\phi, \\ &= \frac{1}{k}F\phi. \end{aligned} \tag{7.16}$$

Par passage à l'adjoint :

$$\left(G^{-1}\right)^* \phi^* = \frac{1}{k}F^*\phi^* \tag{7.17}$$

et en multipliant à gauche par G^* :

$$\begin{aligned} G^*\left(G^{-1}\right)^* \phi^* &= \frac{1}{k}G^*F^*\phi^*, \\ \left(G^{-1}G\right)^* \phi^* &= \frac{1}{k}G^*F^*\phi^*, \\ \phi^* &= \frac{1}{k}G^*F^*\phi^*. \end{aligned} \tag{7.18}$$

En reprenant l'opérateur de fission défini dans la section 6.1, on montre que

$$K = FG \tag{7.19}$$

et donc que

$$K^* = G^*F^*, \tag{7.20}$$

$$K^T = G^TF^T, \tag{7.21}$$

puisqu'en dimension finie, la matrice ajointe est égale à la transposée de la matrice conjuguée. On en déduit ainsi :

$$\phi^* = \frac{1}{k} K^T \phi^*. \tag{7.22}$$

On vient de mettre en évidence qu'il est théoriquement possible de calculer directement un flux adjoint connaissant la matrice de fission K et que ce flux adjoint théorique correspond au premier vecteur propre de la transposée de la matrice de fission.

7.2.2 Exemple

Le flux adjoint est une valeur qui dépend à la fois de la position $\vec{r}$, de l'énergie E, ainsi que de la direction $\vec{\Omega}$.

À titre applicatif, on se propose de calculer le flux adjoint, en ne considérant que la dépendance énergétique, dans une cellule. La cellule considérée a une hauteur de 10 cm. Elle est composée d'une zone combustible en uranium (dans laquelle on calculera le flux adjoint) d'un rayon de 0,41 cm. Cette zone est suivie d'une zone d'air comprise entre 0,41 et 0,418 cm. Puis vient la gaine en zirconium entre 0,418 et 0,475 cm. Enfin, cet assemblage est entouré d'un modérateur (de l'eau) de 0,475 à 0,63 cm. La cellule est représentée sur la figure 7.1.

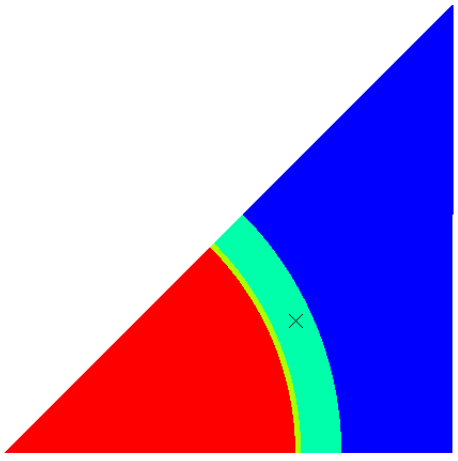


FIGURE 7.1 – Cellule.

Nous obtenons, après renormalisation, transposition et diagonalisation de la matrice de fission, le flux adjoint représenté sur la figure 7.2. Ce flux adjoint calculé à partir de la matrice de fission présente un profil similaire à celui de la référence. Il est à noter que le flux adjoint de référence a été calculé sur 282 groupes d'énergies alors que le flux adjoint calculé à partir de la matrice de fission a été calculé pour 64 groupes équi-log d'énergie. Il n'a pas été possible d'effectuer ce calcul pour un plus grand nombre de groupes pour des raisons informatiques. Il n'est également pas possible d'afficher une barre d'erreur pour les résultats obtenus du fait que la méthode du *jackknife* (voir section 6.4.2) n'a pas été implémentée pour les vecteurs propres. Ce résultat tend à nous conforter dans la méthode utilisée ainsi que dans les développements réalisés.

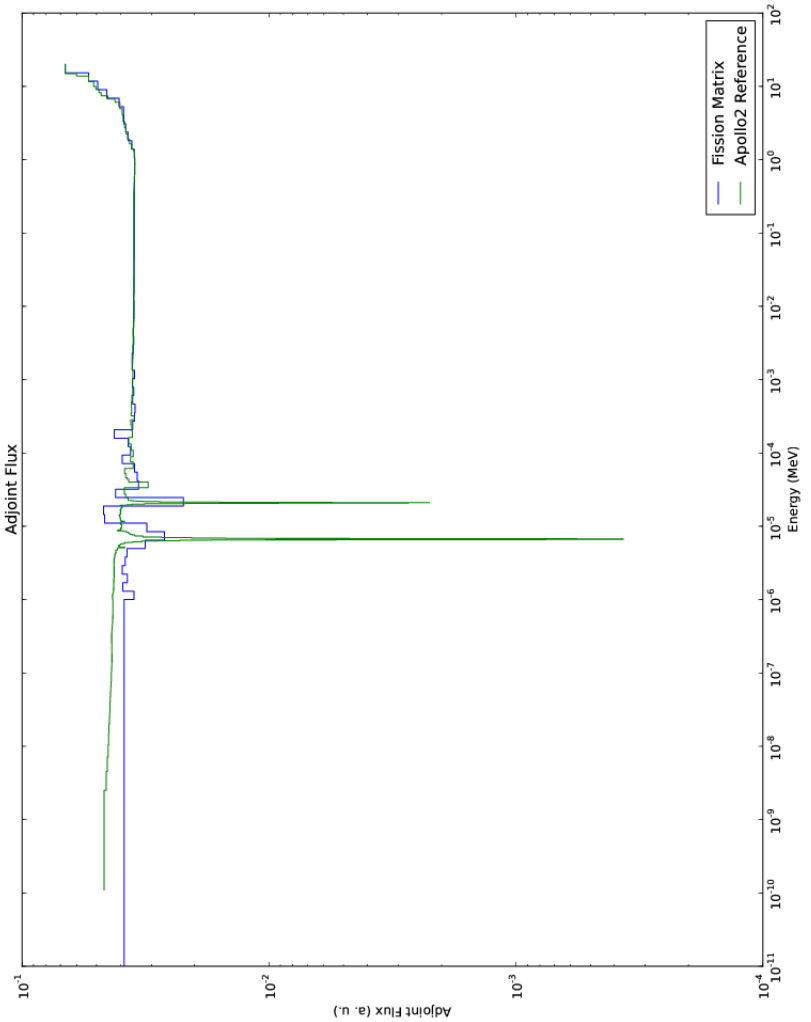


FIGURE 7.2 – Flux adjoint en fonction de l'énergie. La référence Apollo 2.8 provient de [Lec13].

En mettant en parallèle le graphique des sections efficaces d'absorption et de fission de l'^{238}U (dont est majoritairement composée la partie combustible de la cellule), la figure 7.3, la figure 7.4 et la figure 7.2, on peut interpréter les structures du flux adjoint. On constate que là où les valeurs du flux adjoint sont les plus élevées, à haute énergie, la section efficace de fission prédomine. Au contraire, entre 10 et 100 eV, là où la section d'absorption domine avec ses résonances, le flux adjoint est le plus faible. Du point de vue de la simulation, les fissions sont les événements qui contribuent aux résultats (distribution de source, k_{eff}...), contrairement aux captures stériles. On peut donc interpréter le flux adjoint comme une mesure de l'importance des événements. On constate que pour l'^{238}U, ce sont les événements à haute énergie qui contribuent le plus au résultat final.

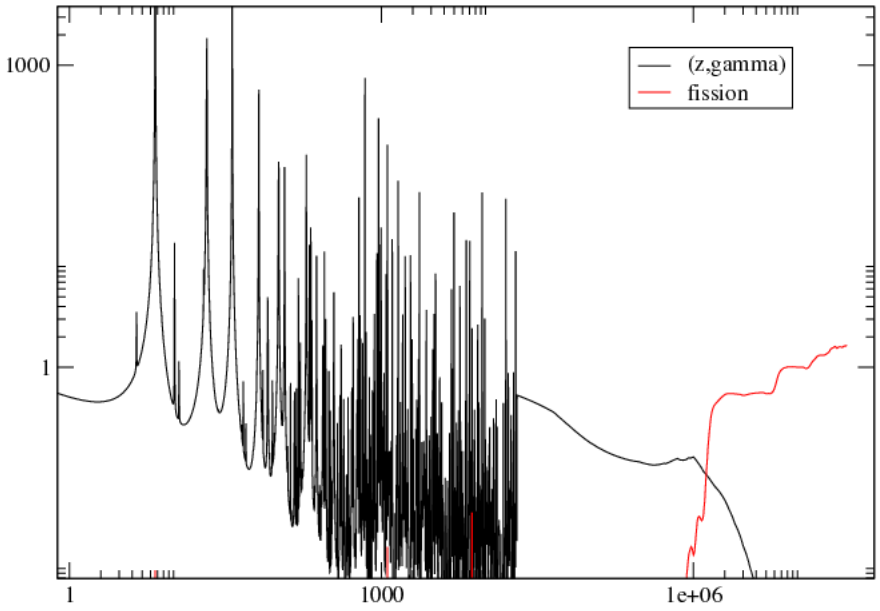


FIGURE 7.3 – Sections efficaces d'absorption et de fission de l'^{238}U exprimées en barns en fonction de l'énergie exprimée en eV.

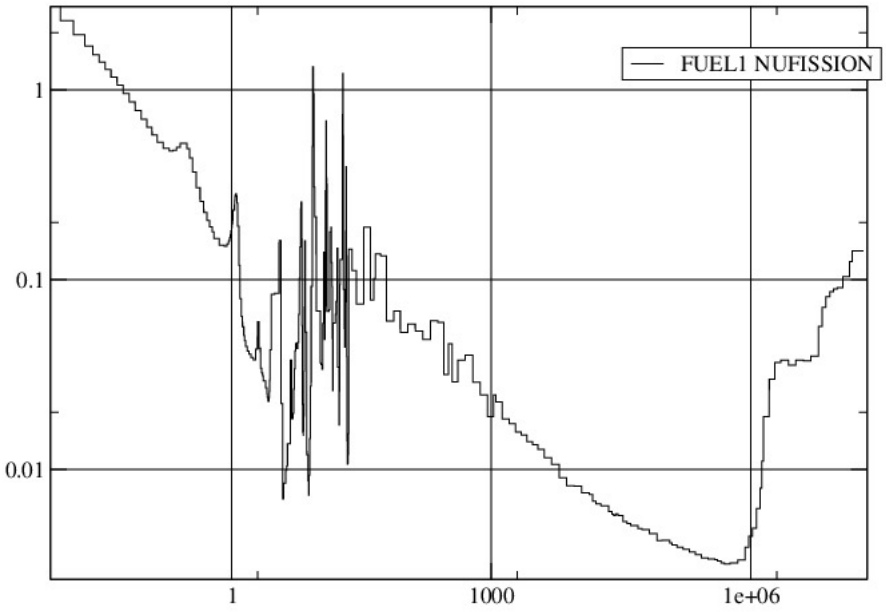


FIGURE 7.4 – Sections efficaces de production microscopique de l'^{238}U exprimées en barns en fonction de l'énergie exprimée en eV d'une cellule. Deux résonances, à 6 et 20 eV, sont reconnaissables. On remarque également la structure à deux bosses à haute énergie.

7.2.3 Développements supplémentaires de la matrice de fission

Le problème principal auquel nous avons été confrontés dans le calcul du flux adjoint à partir de la matrice de fission, dans le cas de la cellule de l'exemple présenté, est le manque de statistiques dans le domaine thermique. Plusieurs développements ont été entrepris. Les résultats de ces développements ne se sont pas toujours révélés à la hauteur de nos espérances.

Un de ces développements a été de calculer directement la matrice de fission par intégration des spectres de fission issus des évaluations. Dans notre cas, plus spécifiquement, nous n'avons considérés que deux isotopes, l'^{235}U et l'^{238}U. Les spectres de fission sont ceux de JEFF-3 [DB05]. En ce qui concerne les neutrons prompts, les données nucléaires sont tabulées. Pour

les neutrons retardés, il s'agit d'un spectre d'évaporation.

7.3 Principe de mise en œuvre

7.3.1 Utilisation d'une carte d'importance dans le cas d'une simulation à source fixe

Introduction

Afin d'illustrer l'utilisation d'une carte d'importance pour la méthode de la transformation exponentielle, nous effectuons deux simulations d'une sphère : la première sans activer la transformation exponentielle, la seconde en l'activant. Ces simulations sont effectuées dans le mode dit « à source fixe » [Tea13]. L'idée est ici de s'affranchir des problématiques de la criticité qui pourraient venir perturber les résultats et ainsi mieux mesurer l'impact d'une telle carte.

Description du système

La sphère considérée est une sphère de 16 cm de rayon. Il s'agit d'un assemblage de seize coquilles de 1 cm d'épaisseur. La sphère est homogène et composée d'un matériau diffusif virtuel ($\Sigma_t = 1$ et $\Sigma_{\text{diffusion}} = 0{,}9$). La source, isotrope, est située au centre de la sphère. La simulation est effectuée sur 5×10^4 batchs de 10^3 neutrons.

Résultats

On représente sur la figure 7.5 le flux issu de la simulation sans carte d'importance (flux de référence) et celui issu de la simulation avec carte d'importance. La carte d'importance en question est représentée sur la figure 7.6.

On constate un écart au niveau des volumes extérieurs de la sphère entre les deux flux. Ces écarts ne peuvent pas s'expliquer par des problèmes de convergence statistique (environ dix écarts-types de différence). Il s'agit donc d'un biais.

L'utilisation d'un maillage plus fin pour la carte d'importance semble réduire ce biais. L'insertion d'une coquille supplémentaire d'air ou d'hélium aux bords semble corriger le problème. Il s'agit donc vraisemblablement d'un mauvais traitement du code des mailles situées à la frontière dans le calcul des coefficients de biaisage. En effet, la fonction d'importance est nulle dans le vide, générant une trop grande variation dans le gradient de la fonction d'importance, conduisant *in fine* à une mauvaise estimation des coefficients

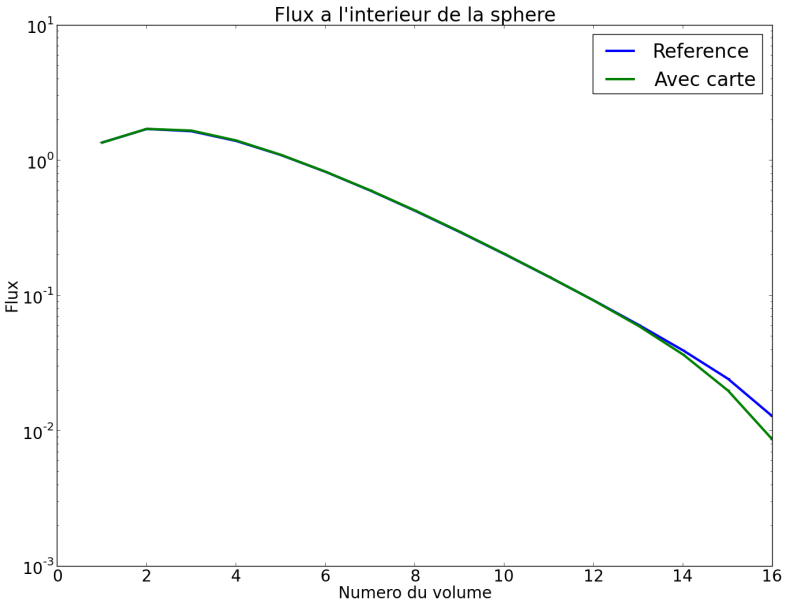


FIGURE 7.5 – Comparaison des flux issus de la simulation de référence et de celle avec carte d'importance dans le mode à source fixe de TRIPOLI-4®.

de biaisage. De plus, il peut arriver, pour les volumes les plus à l'extérieur de la sphère, que le maillage recouvre à la fois la sphère et le vide. Si le centre de la maille se situe dans le vide, alors l'importance de la maille est nulle (voir figure 7.6). Ceci a pour effet d'introduire un biais.

Nous notons au passage que les mêmes effets ont été observés en criticité. L'imposition d'une fonction d'importance analytique fondée sur la solution de l'équation de la diffusion pour une sphère, prolongée en dehors de la géométrie, a permis de résoudre le problème.

Schéma d'intégration

Présentation Afin d'améliorer les résultats obtenus par la technique de la transformation exponentielle (voir section 4.2.5), nous proposons d'utiliser un schéma d'intégration plus précis pour le calcul de la correction de poids.

Tout d'abord, on commence par rappeler que

$$w^* = w\frac{\Sigma}{\Sigma^*}e^{\int \Sigma - \Sigma^* dx}, \tag{7.23}$$

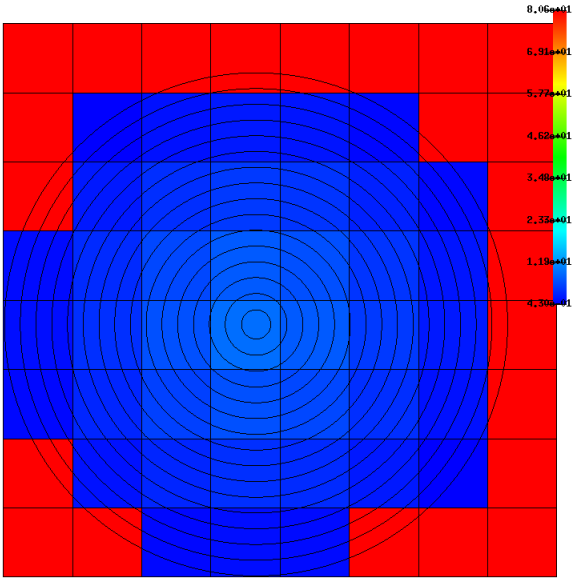


FIGURE 7.6 – Carte d'importance dans le cadre de la simulation à source fixe. Les zones en rouge correspondent aux mailles où l'importance tend vers zéro, celles en bleu foncé correspondent aux zones où l'importance est la plus élevée.

où w correspond au poids de la particule, w^* au poids après biaisage et $\Sigma^* = \Sigma - k\left(\vec{\Omega}_{\text{int}} \cdot \vec{\Omega}\right)$.

Le schéma d'intégration qui nous intéresse concerne le calcul de l'intégrale

$$\int \Sigma - \Sigma^* dx. \tag{7.24}$$

Lors d'un transport, une distance optique, l, est échantillonnée. Dans le cas où la particule doit traverser plusieurs volumes, le transport est divisé en autant de parties que de frontières à franchir. L'intégrale (7.24) est alors calculée pour chaque tronçon.

Supposons un cas à deux volumes et une seule frontière. La particule est située dans le premier volume. Son prochain point de collision est dans le second volume. On note Σ_1 la section macroscopique totale dans le premier volume et Σ_2 celle du second volume. La correction de poids pour le premier volume est calculée, puis celle pour le second volume l'est à son tour. La multiplication par le rapport $\frac{\Sigma}{\Sigma^*}$ dans l'équation (7.23) correspond au rapport $\frac{\Sigma_2}{\Sigma_2^*}$.

TRIPOLI-4® La méthode de calcul de l'intégrale présente dans le code TRIPOLI-4® fait l'hypothèse que la valeur de Σ^* ne varie pas dans le volume considéré. On rappelle que le paramètre k correspond à la norme du rapport du gradient de l'importance sur l'importance.

Cette méthode d'intégration calcule tout d'abord la distance d au prochain volume. On bufferise la quantité $(\Sigma - \Sigma^*)$ et on procède au traitement du tronçon suivant si $l < \Sigma^* d$. Sinon, la distance à parcourir est atteinte et on peut procéder au calcul de la correction de poids. Les quantités précédentes bufferisées sont sommées et correspondent ainsi à l'intégrale (7.24).

Méthode des rectangles Nous proposons ici un nouveau schéma d'intégration qui prend en compte les variations de k en fonction de la position de la particule dans le volume considéré. Pour ce faire, nous mettons en place la méthode des rectangles afin de calculer l'intégrale (7.24). La distance au prochain volume d est divisée en n pas. On bufferise alors les valeurs $k\frac{d}{n}$. Il s'agit d'un raffinement de la méthode de TRIPOLI-4®.

Conclusion Malgré un schéma d'intégration qui semble *a priori* plus juste, aucune amélioration sensible de performance n'a été remarquée.

7.3.2 Stratégies de biaisage

Dans le cadre d'un biaisage en criticité, plusieurs optiques peuvent être envisagées. En effet, un utilisateur, en fonction du problème peut souhaiter atteindre un jeu à variance nulle, obtenir un écart-type donné sur une région donnée ou encore obtenir un écart-type uniforme sur tout le système.

Atteinte d'un écart-type local donné

Une autre stratégie envisageable, pour un utilisateur, est l'atteinte d'un écart-type fixé. En effet, il est possible d'imaginer que pour certains systèmes, quelques zones données peuvent faire l'objet d'une étude particulière et ainsi nécessiter un certain degré de convergence statistique.

L'idée est donc de pousser les neutrons vers cette zone dans le but de réaliser le maximum d'interactions possibles. Mathématiquement, les scores calculés dans cette zone auront un écart-type plus faible que si les neutrons avaient naturellement suivi leur vie.

Une fois l'objectif atteint l'utilisateur peut choisir d'arrêter la simulation suivant ses souhaits.

Nous ne présentons pas, dans le cadre de cette thèse, de résultats sur cette stratégie.

Écart-type uniforme

Une troisième stratégie est envisageable. Il s'agit d'obtenir un écart-type uniforme sur toute la géométrie.

L'idée est encore une fois de diriger les neutrons vers les zones où le moins de collisions ont lieu sans toutefois trop dépeupler les zones où ces neutrons interagissent préférentiellement. Nous cherchons à obtenir un nombre de collisions uniforme en tout point de l'espace des phases.

Afin de bâtir une telle carte d'importance, nous utiliserons l'écart-type sur le flux COLL d'une simulation préalablement effectuée. L'écart-type calculé est directement proportionnel au nombre de collisions ayant eu lieu dans le volume de l'espace des phases considéré. On cherche donc à équilibrer dans l'espace des phases le nombre de collisions en chaque point.

Cette stratégie a fait l'objet d'une étude dans le cadre du biaisage du transport et de la diffusion (utilisation d'une carte d'importance pour la transformation exponentielle) pour quelques cas présentés ci-après.

Exemple : cas du crayon combustible

Nous souhaitons réaliser un biaisage dans le but d'obtenir un écart-type uniforme sur une cellule. Nous ne regardons ici que la dépendance spatiale. Nous ne considérons également qu'une seule dimension géométrique : la hauteur.

Biaisage spatial

Présentation du jeu de données On souhaite réaliser un biaisage spatial sur un crayon combustible. Le cas étudié correspond à la cellule présentée dans la section 6.5.2.

Création de la carte d'importance Afin d'établir une carte d'importance en espace, nous réalisons une simulation du système considéré avec 10^5 batchs de 10^4 particules. Nous demandons à TRIPOLI-4® de nous fournir le flux COLL ainsi que son écart-type. Nous représentons le flux (figure 7.7), l'écart-type absolu (figure 7.8) ainsi que l'écart-type relatif qui nous fournit une mesure de la convergence (figure 7.9).

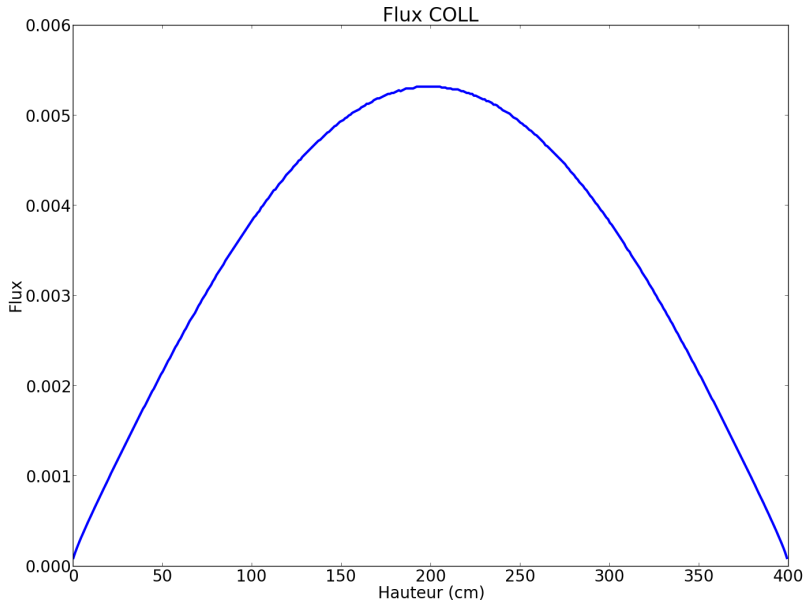


FIGURE 7.7 – Flux COLL dans la cellule.

On peut constater, sur la figure 7.9, que le flux a beaucoup plus de mal à converger sur les bords de la géométrie qu'au centre. C'est cette courbe que nous allons essayer d'« aplatir ».

Nous utilisons directement l'écart-type absolu obtenu comme carte d'importance, moyennant une certaine renormalisation déterminée empiriquement. Cette renormalisation a pour objectif de contrôler les populations afin de simuler un nombre identique de neutrons entre une simulation avec carte et une simulation sans carte. La renormalisation que nous imposons est pour le moment empirique et semble dépendre du rapport de la population de la simulation biaisée (sans contrôle) sur la population de la simulation de référence.

Nous affichons l'écart-type relatif (figure 7.10) et la FoM (figure 7.11) pour la référence et la simulation biaisée. On constate que la carte d'importance a permis d'améliorer la convergence du flux sur les bords de la géométrie avec une meilleure FoM. Toutefois, au centre, la carte d'importance a tendance à dégrader la FoM. Nous attribuons ces résultats à un biaisage incomplet des opérateurs de l'équation du transport 7.1.

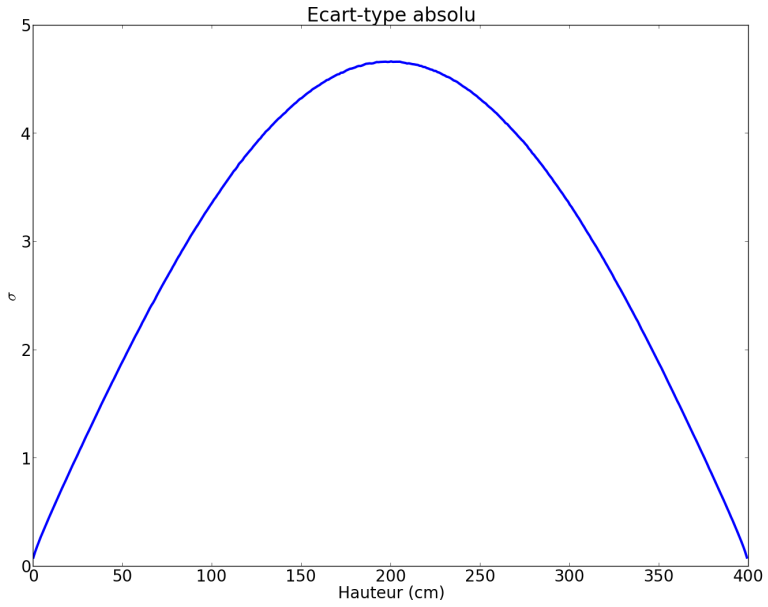


FIGURE 7.8 – Écart-type absolu dans la cellule.

Biaisage en énergie Nous souhaitons réaliser, sur la même configuration, un biaisage en énergie avec la même stratégie : obtenir une convergence uniforme.

Pour ce faire, nous procédons de la même façon que précédemment en calculant, grâce à une première simulation, le flux COLL et son écart-type, sur un maillage énergétique. Le flux est intégré en espace. Ce maillage est constitué de 281 groupes d'énergie (maillage *APOLLO_ 281* [Tea13]). Nous représentons le flux en fonction de l'énergie sur la figure 7.12.

Les résultats obtenus s'avèrent décevants du point de vue de l'objectif recherché. La figure 7.13 montre que nous arrivons à peine à aplatir l'écart-type relatif. La figure 7.14 montre que la FoM a tendance à être dégradée par le biaisage. Elle s'avère toutefois meilleure pour certains groupes. On remarque cependant que l'écart-type relatif est, dans la majorité des groupes plus faible. La carte d'importance a donc eu un effet positif mais pas suffisant. Nous attribuons ceci à un biaisage incomplet.

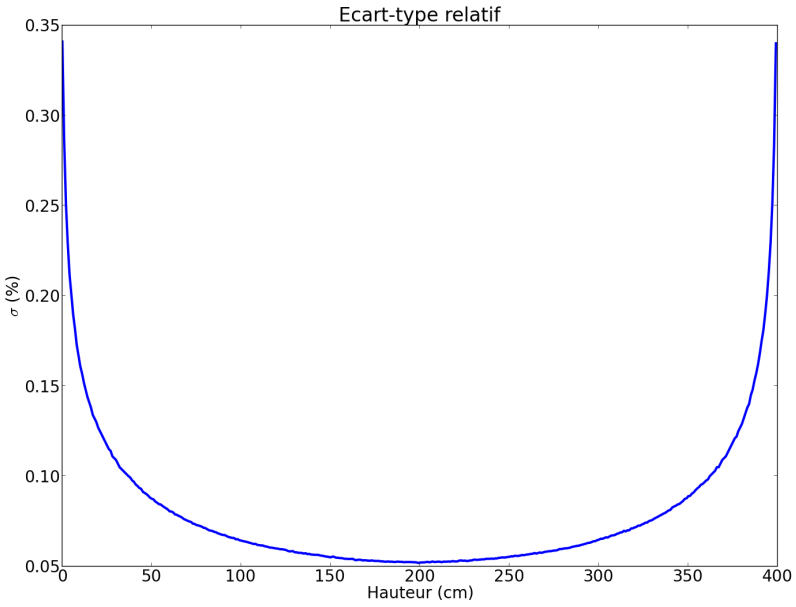


FIGURE 7.9 – Écart-type relatif dans la cellule.

Jeu à variance nulle et TRIPOLI-4®

Nous rappelons que le jeu à variance nulle fait intervenir le flux adjoint. Ce flux adjoint peut être calculé en externe, comme le font les codes MCNP ou SCALE, ou en interne, comme nous avons tenté de le faire, avec la matrice de fission (cf. section 6.1). Ce flux adjoint, dans notre cas, peut alors être passé en carte d'importance.

Nos efforts d'implémentation du jeu à variance nulle dans TRIPOLI-4® se sont heurtés à un certain nombre d'obstacles.

Population neutronique L'obstacle principal consiste au contrôle de la population de neutrons. En effet, en activant tous les noyaux de biaisages présents dans le code [1], nous avons pu constater de grandes instabilités dans la population de neutrons. Plus l'importance est grande, plus la population va croître. À l'inverse, dès que l'importance diminue, la population de neutrons diminue. Faute de particules, une simulation va s'arrêter prématurément. Dans le cas d'un accroissement exponentiel de la population, c'est l'effet inverse qui se produit : la simulation ne se termine pas en raison du trop

1. Une implémentation du biaisage des sources et de la collision a été effectuée dans TRIPOLI-4® afin de mettre en place le jeu à variance nulle.

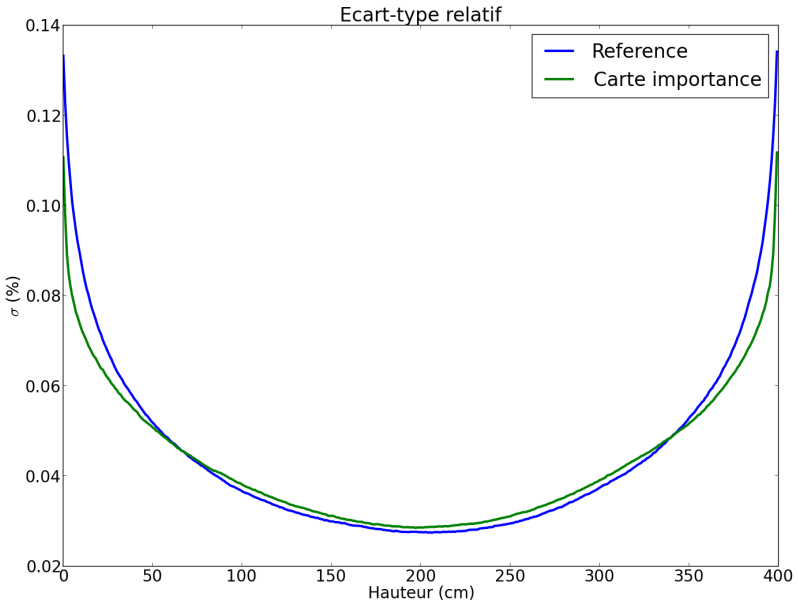


FIGURE 7.10 – Écart-type relatif dans la cellule pour la simulation de référence et la simulation biaisée.

grand nombre de neutrons générés. Il est donc nécessaire de commencer par mettre en place un système de contrôle de la population neutronique tel que le « peigne » de Boothe [Boo96]. Cette technique, outre le fait de contrôler la population de neutrons, nous permettant ainsi de simuler un nombre constant de particules à chaque batch, présente également l'avantage de conserver le poids total du batch.

Un contrôle strict du poids total du batch ainsi que du nombre total de particules semblait nécessaire afin de contrôler la variance dès l'échantillonnage des sources. Cette technique a été testée et n'offre pas d'amélioration nette sur la variance. La prochaine étape identifiée consiste à utiliser de tels algorithmes en tenant compte de l'importance [Boo96].

Noyaux de biaisage Dans un deuxième temps, un biaisage du noyau de collision devrait également être envisagé afin de se rapprocher davantage du jeu à variance nulle. Comme nous l'avons déjà montré, chaque noyau peut être biaisé indépendamment. Ceci n'a donc eu qu'une faible importance sur les résultats obtenus au cours de ces essais.

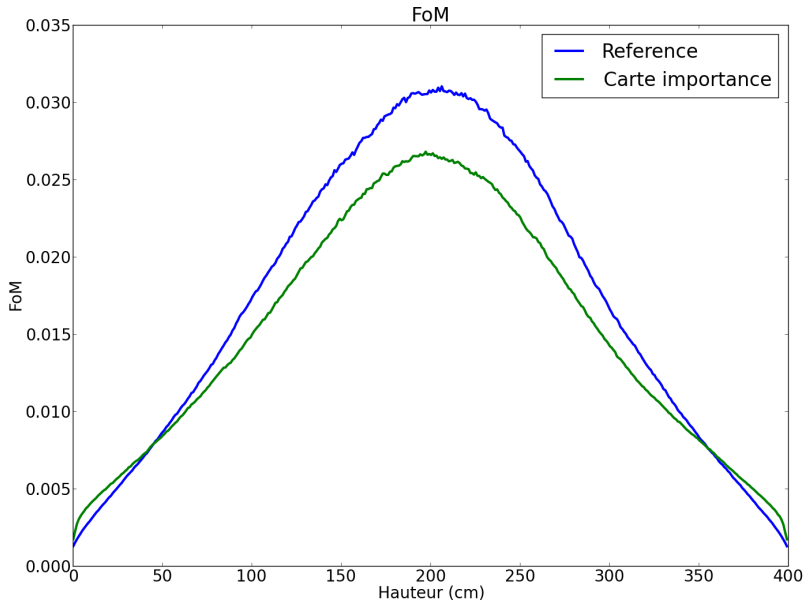


FIGURE 7.11 – FoM dans la cellule pour la simulation de référence et la simulation biaisée.

Techniques usuelles de réduction de variance Il est nécessaire, dans le jeu à variance nulle, de recourir aux techniques de roulette russe et de *splitting* (cf. chapitre 4) afin de simuler en accord avec la carte d'importance. La roulette russe permet de remonter le poids des particules, tandis que le *splitting* permet au contraire de le faire baisser. Or ces deux techniques introduisent nécessairement une variance.

Nous avons également recours à la technique de la transformation exponentielle vue précédemment dans ce chapitre afin de biaiser le transport. Afin de respecter la « non négativité » de la transformation exponentielle et donc de ne pas obtenir des poids négatifs, il est nécessaire que

$$\frac{\nabla I}{I} > \Sigma_t. \tag{7.25}$$

Ce critère peut s'avérer difficile à respecter et présente un réel obstacle à la mise en œuvre du jeu à variance nulle.

Considérations théoriques sur le biaisage par l'adjoint Comme nous pouvons le voir dans l'annexe B, le jeu à variance nulle implique un temps

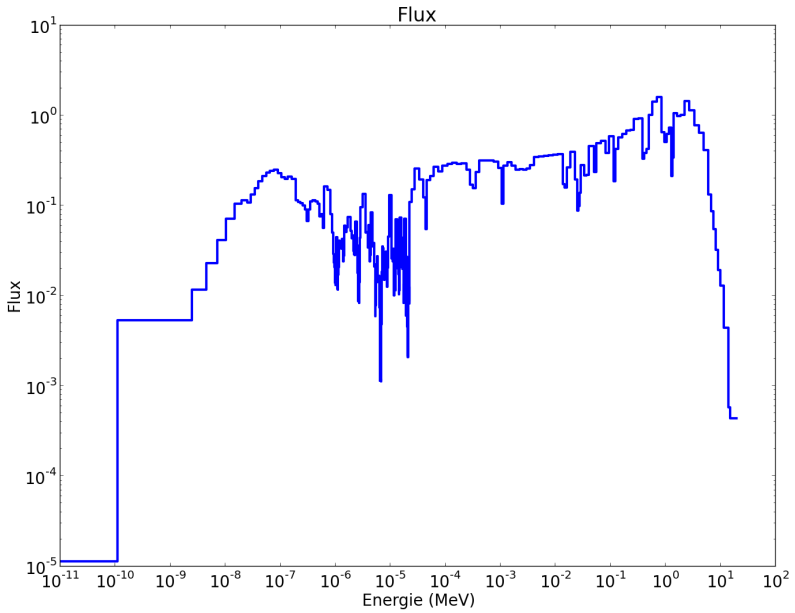


FIGURE 7.12 – Flux en énergie dans la cellule.

infini de simulation. Toutefois, même tronquée, une simulation biaisée par l'adjoint permet d'obtenir une distribution uniforme d'écarts-types.

Difficultés d'obtenir un flux adjoint

Dépendances On montre aussi la difficulté d'obtenir un flux adjoint dépendant de toutes les dimensions significatives. L'oubli d'une dépendance conduit à l'apparition de fluctuations notables devant les fluctuations existantes dans le mode critique. Ainsi, dans l'exemple de la sphère critique (que nous avons traité précédemment), l'adjoint dépend de la position, de l'énergie, mais aussi fortement de la direction de la particule.

Cas-test On peut aussi noter la difficulté relative du choix d'un cas-test de dimension réduite comme la sphère critique étudiée au cours de cette thèse ou une cellule. Les cas de protection sont intrinsèquement de dimension importante, ce qui ne nécessite pas le traitement des surfaces de fuite afin d'obtenir une accélération significative. Dans le cas d'une petite configuration critique, le non-traitement du problème des fuites et de la dimension angulaire conduit inévitablement à une importante perte de performance (du point de vue de la variance).

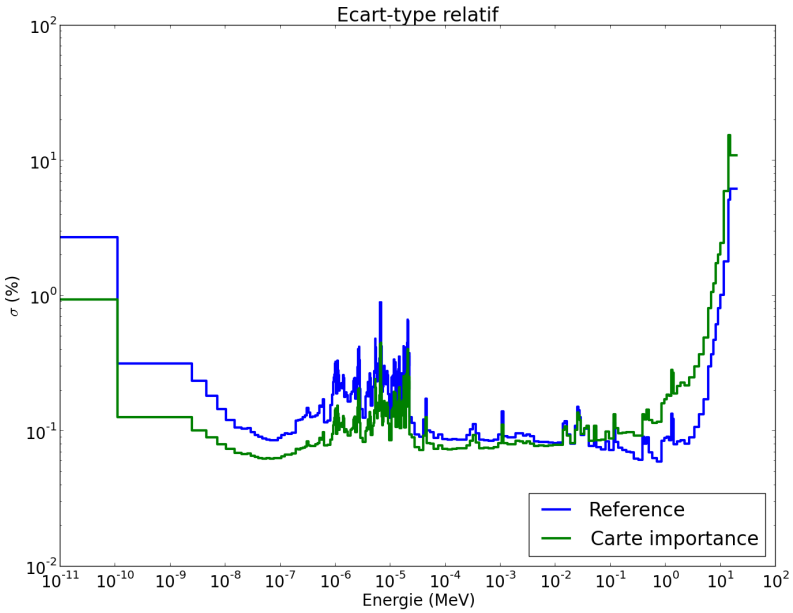


FIGURE 7.13 – Écart-type relatif en énergie dans la cellule.

Bilan

Pour toutes les raisons invoquées précédemment, il n'a pas été possible au cours de cette thèse de réaliser le jeu à variance nulle en criticité avec TRIPOLI-4®. La résolution de ces problèmes serait un pas de plus vers le jeu à variance nulle.

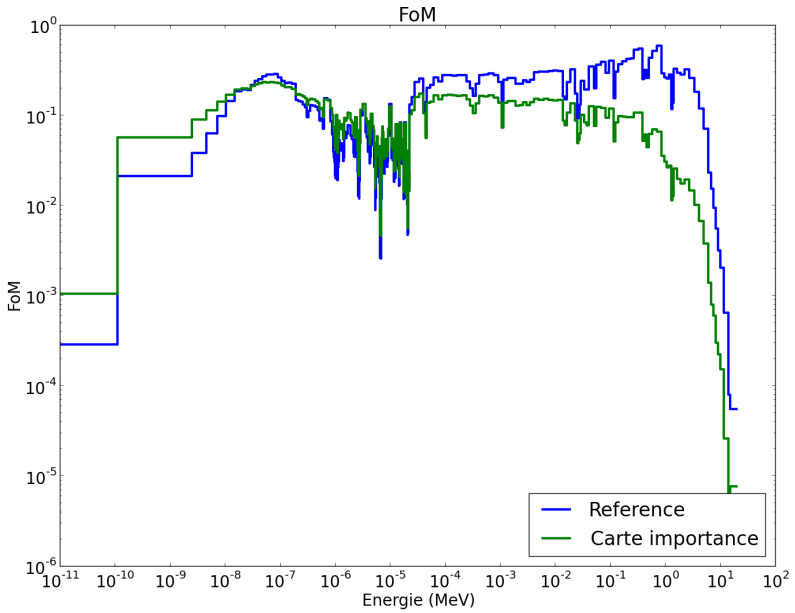


FIGURE 7.14 – FoM dans la cellule.

7.4 Conclusion

Nous avons mis en place, dans ce chapitre, les fondements mathématiques d'une méthodologie d'accélération de la simulation innovante à deux étages.

La méthodologie proposée repose sur l'utilisation d'une carte d'importance en criticité ainsi que sur le calcul du flux adjoint $\Phi^*(\vec{r},E)$ à partir de la matrice de fission.

Quelques tests d'utilisation d'une carte d'importance en criticté ont été effectués. La mise en place de la méthodologie proposée s'est heurtée à diverses difficultés qu'il sera nécessaire de résoudre afin de pouvoir l'appliquer.

Conclusion

Résumé des principaux résultats acquis

L'objet de ce travail de thèse a consisté à mettre en place une stratégie d'accélération de la convergence dans le code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® en criticité.

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons effectué quelques rappels concernant la neutronique, la méthode de Monte-Carlo appliquée au transport des neutrons, le calcul critique, ainsi qu'une synthèse des méthodes d'accélération usuelles mises en œuvre dans les calculs Monte-Carlo en criticité.

La seconde partie du mémoire s'est focalisée plus particulièrement sur la méthode de la matrice de fission ainsi que sur les différents résultats obtenus.

Nous avons tout d'abord analysé, dans cette seconde partie, de manière approfondie, les différents processus intervenant au cours de la simulation d'un batch en criticité ainsi que le mécanisme de contrôle de la population des neutrons issue de la fission au cours de la simulation de leur propagation dans le milieu fissile considéré (chapitre 5), puis proposé un modèle analytique du calcul de l'estimateur KSTEP de TRIPOLI-4®. Ce modèle a également été développé dans le but de comprendre l'origine de la distribution des poids des neutrons. En effet, la variance associée aux différents estimateurs du k_{eff}, dont le KSTEP, dépend de cette distribution. Comprendre l'origine de la variance des estimateurs pourrait aider à sa réduction. Enfin, ce modèle pourrait servir de base à une recherche de valeur optimale pour le seuil de la roulette russe vis-à-vis de la FoM.

Puis, la méthode de la matrice de fission (chapitre 6) utilisée dans le but d'accélérer la convergence des calculs critiques réalisés par la méthode de Monte-Carlo a été présentée. La matrice de fission fait l'objet d'un double emploi : elle permet d'une part de calculer le facteur de multiplication effectif des neutrons ainsi que la distribution de sources de neutrons, et d'autre part de calculer le flux adjoint devant servir à accélérer le calcul Monte-Carlo au sein d'un batch.

Concernant le premier cas, le calcul du k_{eff}, nous avons tout d'abord étendu l'implémentation de la méthode de la matrice de fission au parallélisme ; puis nous avons validé l'implémentation effectuée dans le code TRIPOLI-4® par des modèles analytiques (section 6.3). Nous avons ainsi montré que la méthode de la matrice de fission est une méthode robuste pour le calcul du k_{eff}, ainsi que pour le calcul de la distribution de sources de neutrons. La difficulté initiale du calcul de la variance de l'estimateur K_{ij}, en raison de la non linéarité des opérations de diagonalisation, a pu être

surmontée grâce à la technique du jackknife (section 6.4). Cette méthode s'est révélée robuste pour le calcul de la variance des valeurs propres et des rapports de dominance calculés à partir de la matrice de fission.

Les figures de mérite de la matrice de fission se sont révélées meilleures, d'un facteur 10 à 100, que celles des autres estimateurs usuels (KSTEP ou KTRACK) du k_{eff} et de la distribution des sources de neutrons du code TRIPOLI-4®, pour les cas étudiés (section 6.5).

Enfin, l'obtention des modes propres autres que le mode fondamental, par la matrice de fission, est susceptible d'être utile pour diverses applications, comme l'étude de la convergence des sources via notamment le calcul du rapport de dominance (section 6.3).

Nous avons également proposé, au chapitre 7, un renforcement de l'accélération au niveau du batch par la transformation exponentielle au cas des sources de fission (section 7.1), utilisant une fonction d'importance déduite de la matrice de fission. Cette fonction d'importance n'est autre que le flux adjoint dans l'espace des phases calculé à partir de la matrice de fission discrétisée en espace et en énergie (section 7.2). Nous avons ainsi présenté une méthodologie innovante d'accélération à deux étages dont l'implémentation n'a pu être achevée dans le cadre de cette thèse.

Perspectives

Nous proposons, en conséquence, plusieurs axes de poursuite des travaux menés au cours de cette thèse.

Tout d'abord, une confirmation de l'efficacité attendue des estimateurs du k_{eff} calculés à partir de la matrice de fission vis-à-vis des estimateurs classiques de TRIPOLI-4® sur des configurations réelles diverses issus de benchmarks internationaux en criticité, dont des cœurs de réacteurs de puissance, serait à effectuer. Une telle confirmation permettrait d'envisager une utilisation plus systématique de la matrice de fission dans le cadre d'études des études d'ingénierie nucléaire.

Deuxièmement, il est nécessaire d'étendre l'implémentation de la méthode du *jackknife* aux vecteurs propres de la matrice de fission. Ceci permettrait, entre autres, d'obtenir un écart-type sur le flux adjoint calculé et de le comparer aux références Apollo 2.

Le troisième axe proposé concerne l'implémentation, au niveau du batch, de l'accélération dont les principes mathématiques (transformation exponen-

tielle et flux adjoint) ont été posés au chapitre 7, dans TRIPOLI-4® et de l'étude de son efficacité. La dimension angulaire de la fonction d'importance est à prendre en considération dans certaines configurations. Il conviendra, de plus, d'examiner de manière plus approfondie la problématique de la renormalisation des sources biaisées au cours de la simulation. Il conviendra aussi de prendre en compte l'apport de récents travaux réalisés dans ce domaine tels que ceux du Los Alamos National Laboratory présentés à la conférence SNA+MC 2013.

Soulignons enfin que dans le cadre de l'utilisation de la matrice de fission à des fins d'estimation du k_{eff} ou de la distribution de sources, il est nécessaire de prendre en compte la taille mémoire potentiellement très élevée des matrices de fission. Le nombre d'éléments de la matrice est égal au carré du produit des volumes fissiles de la géométrie considérée par le nombre de groupes d'énergie demandés. Une étude sur le stockage des matrices en mémoire ainsi que sur l'optimisation du calcul de valeurs propres (selon le type de matrice) devrait être envisagée.

Bibliographie

[ABO+12] E. Abdikamalov, A. Burrows, C. D. Ott, F. Löffler, E. O'Connor, J. C. Dolence, and E. Schnetter. A New Monte Carlo Method for Time-Dependent Neutrino Radiation Transport. *The Astrophysical Journal*, 755(111), 2012.

[Amd67] G. Amdahl. Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large-Scale Computing Capabilities. In *AFIPS Conference Proceedings*, volume 30, pages 483–485, 1967.

[AMEa] AMEC. ANSWERS Sotware Service. http://www.answerssoftwareservice.com/. Dernière consultation : avril 2013.

[AMEb] AMEC. Présentation du groupe AMEC. http://www.answerssoftwareservice.com/who.html. Dernière consultation : avril 2013.

[AS72] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, New-York, États-Unis, 1972.

[AWNS11] S. Abe, Y. Watanabe, K. Niita, and Y. Sakamoto. Implementation of a Forced Collision Method in the Estimation of Deposit Energy Distribution with the PHITS Code. *Progress in Nuclear Science and Technology*, 2 :477–480, 2011.

[Ba13] B. Bonin and al. *La neutronique*. e-den. CEA Saclay et Groupe Moniteur, Paris, France, novembre 2013.

[BBD+] A. Baur, L. Bourdet, G. Dejonghe, J. Gonnord, A. Monnier, J. C. Nimal, and T. Vergnaud. *Programme de Monte-Carlo polycinétique à trois dimensions TRIPOLI-02, Tome I.*

[Ber48] T. H. Berlin. Note on the Milne's Problem for a Sphere. *Physical Review*, 73 :437–440, 1948.

[BG86] R. J. Brissenden and A. R. Garlick. Biases in the Estimation of k_{eff} and its Error by Monte Carlo Methods. *Annals of Nuclear Energy*, 13(2), 1986.

[BH84] T. E. Booth and J. S. Hendricks. Importance Estimation in Monte Carlo Calculations. *Nuclear Technology/fusion*, 5(90), 1984.

[BLWH02] R. Buck, E. Lent, T. Wilcox, and S. Hadjimarkos. COG User's Manual : A Multiparticle Monte Carlo Transport Code (Fifth Edition). Technical report, Lawrence Livermore National Laboratory, Californie, États-Unis, 2002.

[Boo85] T. E. Booth. A Sample Problem for Variance Reduction in MCNP. Technical Report LA-10363-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 1985.

[Boo96] T. E. Booth. A Weight (Charge) Conserving Importance-Weighted Comb for Monte Carlo. In *Radiation Protection & Shielding Topical Meeting, No. Falmouth, Massachusetts États-Unis*, avril 1996.

[Bow08] S. M. Bowman. KENO-VI Primer : A Primer for Criticality Calculations with SCALE/KENO-VI Using GeeWiz. Technical Report ORNL/TM-2008/069, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, États-Unis, 2008.

[BR85] J. Bussac and P. Reuss. *Traité de neutronique*. EDP Sciences, Les Ulis, France, 1985.

[Bro07] F. B. Brown. Wielandt Acceleration for MCNP5 Monte Carlo Eigenvalue Calculations. In *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applicatications (M&C + SNA 2007), Monterey, Californie, États-Unis*. American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, États-Unis, 2007.

[Bro09] F. B. Brown. A Review of Monte Carlo Criticality Calculations - Convergence, Bias, Statistics. In *American Nuclear Society Mathematics & Computation Topical Meeting, Saratoga, New York, États-Unis*, mai 2009.

[Bus63] H. D. Bush. *Atomic and Nuclear Physics : Theoretical Principles*. The Nuclear reactor technology series. Ilife Books, Londres, Royaume-Uni, 1963.

[CCY67] R. R. Coveyou, V. R. Cain, and K. J. Yost. Adjoint and Importance in Monte Carlo Application. *Nuclear Science and Engineering*, 27(219), 1967.

[CDP53] K. M. Case, F. De Hoffman, and G. Placzek. *Introduction to the Theory of Neutron Diffusion, Volume I*. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 1953.

[CE59] E. D. Cashwell and C. J. Everett. *A Practical Manual on the Monte Carlo Method for Random Walk Problems*. Pergamon Press, Oxford, Royaume-Uni, 1959.

[CEA] CEA. Commissariat à l'Énergie Atomique et aux énergies Alternatives. http://www.cea.fr. Dernière consultation : octobre 2013.

[Cha10] M. J. Chambers. Jackknike Estimation of Stationary Autoregressive Models, 2010.

[Chr10] S. Christoforou. *A Zero-variance Based Scheme for Monte Carlo Criticality Simulations*. PhD thesis, Technische Universtiteit Delft, Delft, Pays-Bas, 2010.

[Cla66] F. H. Clark. The Exponential Transform as an Importance Sampling Device - A Review. Technical Report ORNL-RSIC-14, Oak Ridge National Laboratory, États-Unis, 1966.

[Coh09] G. Cohen. Les algorithmes, au coeur du raisonnement. *Bibliothèque Tangente. Hors série. Num. 37.*, 2009.

[Cul02] D. E. Cullen. TART 2002 : A Coupled, Neutron-Photon 3-D, Combinatorial Geometry Time Dependent Monte Carlo Transport Code. Technical Report Report UCRL-ID-126455 / Revision 4 (2002), Lawrence Livermore National Laboratory, Californie, États-Unis, 2002.

[DB05] NEA Data Bank. The JEFF-3.0 Nuclear Data Library. Technical Report JEFF Report 19, NEA No. 3711, Nuclear Energy Agency, Organisation for Economic Co-Operation and Development, 2005.

[DC10] E. Dumonteil and T. Courau. Dominance Ratio Assessment and Monte Carlo Criticality Simulations : Dealing with high Dominance Ratio Systems. *Nuclear Technology*, 172(2) :120–131, 2010.

[DG09] J. Dufek and W. Gudowski. Stability and Convergence Problems of the Monte Carlo Fission Matrix Acceleration Methods. *Annals of Nuclear Energy*, 36 :1648–1651, 2009.

[DHD13] B. Dehaye, F.-X. Hugot, and C. M. Diop. A comparison between the fission matrix method, the diffusion model and the transport model. In *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering (M&C 2013), Sun Valley, Idaho, États-Unis*, mai 2013.

[DPD+07] C. M. Diop, O. Petit, E. Dumonteil, F.-X. Hugot, Y. K. Lee, A. Mazzolo, and J.-C. Trama. TRIPOLI-4 : A 3D Continuous-Energy Monte Carlo Transport Code. In *PHYTRA1 : First International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications, Marrakech, Maroc*, 2007.

[DPL+06] E. Dumonteil, A. Le Peillet, Y.-K Lee, O. Petit, C. Jouanne, and A. Mazzolo. Source Convergence Diagnostics Using Boltzmann Entropy Criterion Application to Different OECD/NEA Criticality Benchmarks with the 3-D Monte Carlo Code TRIPOLI-4. In *PHYSOR-2006 : American Nuclear Society's Topical Meeting on Reactor Physics - Advances in Nuclear Analysis and Simulation, Vancouver, BC, Canada*, septembre 2006.

[Duf07] J. Dufek. Accelerated Monte Carlo Eigenvalue Calculations. In *XIII Meeting on Reactor Physics Calculations in the Nordic Countries, Västerå, Suède*, mars 2007.

[Duf09] J. Dufek. *Development of New Monte Carlo Methods in Reactor Physics*. PhD thesis, Royal Institue of Technology (KTH), Stockholm, Suède, 2009.

[Efr77] B. Efron. Bootstrap Methods : Another Look at the Jackknife, 1977.

[EG83] B. Efron and G. Gong. A Leisurely Look at the Bootstrap, the Jackknife, and Cross-Validation. *The American Statistician*, 37(1) :36–48, 1983.

[Erm75] S. M. Ermakov. *Die Monte Carlo Methode und Verwandte Fragen*. Oldenburg Verlag, Munich, Allemagne, 1975.

[ES81] B. Efron and C. Stein. The Jackknife Estimate of Variance. *The Annals of Statistics*, 9(3) :586–596, 1981.

[FB10] J. A. Favorite and K. C. Bledsoe. Eigenvalue Sensitivity to System Dimension. *Annals of Nuclear Energy*, 37 :522–528, 2010.

[FHC05] J. P. Finch, J. S. Hendricks, and C. K. Choi. Vacation Matrix Method for Correct Source Distribution in Monte Carlo Criticality Calculations. In *The Monte Carlo Method : Versatility Unbounded In A Dynamic Computing World, Chattanooga, Tennessee, sur CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL*, avril 2005.

[FP89] H. Flyvbjerg and H. G. Peterson. Error Estimates on Averages of Correlated Data. *The Journal of Chemical Physics*, 91(461), 1989.

[Gau08] F. Gaudier. Manuel utilisateur Uranie Version v1. Technical Report SFME/LGLS/RT/08-003/A, Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, 2008.

[GB08] J. E. Gubernatis and T. E. Booth. Multiple Extremal Eigenpairs by the Power Method. Technical Report LA-UR-07-4046, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, juillet 2008.

[GP74] E. M. Gelbard and R. E. Prael. Monte Carlo Work at Argonne National Library. In *NEACEP Monte Carlo Specialists Meeting*, 1974.

[GW92] W. Glynn and W. Whitt. The asymptotic efficiency of simulation estimators. *Operations Research*, 40(3) :505–520, 1992.

[HLM08] F.-X. Hugot, Y. K. Lee, and F. Malvagi. Recent R&D around the Monte-Carlo Code Tripoli-4 for Criticality Calculation. In *International Conference on the Physics if Reactors "Nuclear Power : A Sustainable Ressource"*, 2008.

[Hoo77] J. E. Hoogenboom. *Adjoint Monte Carlo Method in Neutron Transport Calculations.* Delft University Press, Delft, Pays-Bas, 1977.

[Hoo79] J. E. Hoogenboom. Optimum Biasing of Integral Equations in Monte Carlo Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 80(172), 1979.

[Hoo08] J. E. Hoogenboom. Zero-Variance Monte-Carlo Schemes Revisited. *Nuclear Science and Engineering*, 160(1) :1–22, 2008.

[JAE05] JAERI, Japan Atomic Energy Agency, Japon. *MVP/GMVP II : General Purpose Monte Carlo Codes for Nentron and Photon Transport Calculations based on Continuous Energy and Multigroup Methods*, 2005.

[Kah56] J. H. Kahn. Application of Monte Carlo. Technical Report RM-1237-AEC, Rand Corporation, 1956.

[Kee65] G. R. Keepin. *Physics of Nuclear Kinetics.* Addison-Wesley, London, Royaume-Uni, 1965.

[KH51] H. Kahn and T. E. Harris. Estimation of Particle Transmission by Random Sampling. *National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series*, 12 :27–30, 1951.

[KT01] T. Kitada and T. Takeda. Effective Convergence of Fission Source Distribution in Monte Carlo Simulation. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 38(5) :324–329, 2001.

[Lec13] P. Leconte. Communication privée, 2013.

[Lep10] J. Leppänen. Performance of Woodcock Delta-Tracking in Lattice Physics Applications Using the Serpent Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. *Annals of Nuclear Energy*, 2010.

[Lep12] J. Leppänen. *Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code.* VTT Technical Research Center of Finland, Finlande, 2012.

[LK91] I. Lux and L. Koblinger. *Monte Carlo Particle Transport Methods : Neutron and Photon Caclulations.* CRC Press, Boca Raton, Ann Arbor, Boston, États-Unis, 1991.

[LM84] E. E. Lewis and W. F. Miller. *Computational Methods of Neutron Transport.* Wiley, Hoboken, New Jersey, États-Unis, 1984.

[LN08] S. K. Loyalka and S. Naz. Milne's Half-Space Problem : A Numerical Solution of the Related Integral equation. *Annals of Nuclear Energy*, 35 :1900–1902, 2008.

[Mal] F. Malvagi. Communications personnelles.

[Mar47] R. E. Marshak. The Variational Method for Asymptotic Neutron Densities. *Physical Review*, 71 :699–693, 1947.

[MCN] MCNP. Présentation du code MCNP. http://mcnp.lanl.gov/. Dernière consultation : avril 2013.

[MCU] MCU. Présentation du code MCU. http://www.mcuproject.ru/. Dernière consultation : avril 2013.

[MDH12] F. Malvagi, E. Dumonteil, and F.-X Hugot. Les bonnes pratiques dans les calculs critiques en monte carlo. Technical Report DENS/DANS/DM2S/SERMA/LTSD/RT/12-5330/A, Commissariat à l'Énergie Atomique, 2012.

[Mdta] IRSN MORET development team. Méthode de Wielandt. http://moret.irsn.fr/5B1/doku.php?id=documentation:user_doc:jdd:opt_simu:typsim:wiel. Dernière consultation : mars 2013.

[Mdtb] IRSN MORET development team. Méthode SUPer-Histoire. http://moret.irsn.fr/5B1/doku.php?id=documentation:user_doc:jdd:opt_simu:typsim:suph. Dernière consultation : mars 2013.

[Mil74] R. G. Miller. The Jackknife–A Review. *Biometrika*, 61(1) :1–15, avril 1974.

[MN98] M. Matsumoto and T. Nishimura. Mersenne Twister : A 623-dimensionally Equidistributed Uniform Pseudorandom Number Generator. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS) - Special issue on uniform random number generation*, 8, 1998.

[MU49] N. Metropolis and S. Ulam. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247) :335–341, 1949.

[Nag88] H. Nagao. On the Jackknife Statistics for Eigenvalues and Eigenvectors of a Correlation Matrix. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 40(3) :477–489, 1988.

[NBGC09] P. Norberg, C. M. Baugh, E. Gatzañaga, and D. J. Croton. Statistical Analysis of Galaxy Surveys - I. Robust Error Estimation for Two-point Clustering Statistics. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 396 :19–38, 2009.

[NV90a] J.-C. Nimal and T. Vergnaud. TRIPOLI : a general Monte Carlo code, present state and future prospects. *Progress in Nuclear Energy*, 24(1-3) :195–200, 1990.

[NV90b] J.-C. Nimal and T. Vergnaud. TRIPOLI capabilities proved by a set of solved problems. *Progress in Nuclear Energy*, 24(1-3) :201–210, 1990.

[NY04] Y. Naito and J. Yang. The Sandwich Method for Determining Source Convergence in Monte Carlo Calculation. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 41(5) :559–568, 2004.

[Pah66] S. Pahor. A New Approach to Half-Space Transport Problems. *Nulcear Science and Engineering*, 26 :192–197, 1966.

[PBD+] R. Procassini, P. Brantley, S. Dawson, G. Greenman, M. S. McKinley, M. O'Brien, S. Sepke, D. Stevens, B. Beck, and C. Hagmann. New Features of the Mercury Monte Carlo Particle Transport Code. In *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010), Hitotsubashi Memorial Hall, Tokyo, Japon, 17-21 octobre 2010.*

[PKT+09] N. Petrov, N. P. Kolev, G. Todorova, F.-X. Hugot, and T. Visonneau. TRIPOLI-4 Solutions of VVER-1000 Assembly and Core Benchmarks. In *M&C 2009, Saratoga Springs, New York, États-Unis*, mai 2009.

[PS47] G. Placzek and W. Seidel. Milne's Problem in Transport Theory. *Physical Review*, 72 :550–555, 1947.

[PT05] R. J. Procassini and J. M. Taylor. MERCURY User Guide (Version b.8). Technical Report Report UCRL-TM-204296 / Revision 1 (2005), Lawrence Livermore National Laboratory, Californie, États-Unis, 2005.

[Que56] M. H. Quenouille. Notes on Bias in Estimation. *Biometrika*, 43(3/4) :353–360, décembre 1956.

[Reu03] P. Reuss. *Précis de neutronique*. EDP Sciences, Les Ulis, France, 2003.

[Ric06] Y. Richet. *Suppression du régime transitoire initial des simulations Monte-Carlo de criticité*. PhD thesis, École Supérieure Nationale des Mines de Saint-Étienne, 2006.

[Sap06] G. Saporta. *Probabilités, analyse des données et statistique*. Éditions Technip, Paris, France, 2006.

[Sch82] L. Schruben. Detecting Initialization Bias in Simulation Output. *Operations Research*, 30, 1982.

[SFE] SFEN. Société Française d'Énergie Nucléaire. http://www.sfen.org. Dernière consultation : octobre 2013.

[SG08] J. Spanier and E. M. Gelbard. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Dover Publications, Mineola, NY, États-Unis, 2008.

[Sha48] C. E. Shannon. A Mathematical Theory of Communication. *The Bell System Technical Journal*, 27, 1948.

[SM71] S. F. Su and N. J. McCormick. Extrapolation Distance Calculations. *Journal of Nuclear Energy*, 25 :657–658, 1971.

[Tea03a] X-5 Monte Carlo Team. MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 Volume I : Overview and Theory. Technical Report LA-UR-03-1987, Los Alamos Nationatal Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 2003.

[Tea03b] X-5 Monte Carlo Team. MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 Volume II : User's Guide. Technical Report LA-CP-03-0245, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 2003.

[Tea10] DICE Project Team. DICE : User's Manual. Technical Report NEA/NSC/DOC(95)03/II, OECD, 2010.

[Tea13] TRIPOLI-4 Project Team. *TRIPOLI-4 Version 9 User Guide. Technical report, SERMA/LTSD/RT/13-5495/A*, 2013.

[Tin] J. Tinslay. Implicit Capture Overview. http://geant4.slac.stanford.edu/EBMS/material/ImplicitCapture.pdf. Dernière consultation : avril 2013.

[tri01] *Monte Carlo transport code for neutral particles. Version 3.5. User's Manual. Technical report, CEA-R-5950*, 2001.

[UB02] T. Ueki and F. B. Brown. Stationarity Diagnostics Using Shannon Entropy in Monte Carlo Criticality Calculations i : F test. Technical Report LA-UR-02-3783, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 2002.

[UB03a] T. Ueki and F. B. Brown. Informatics Approach to Stationarity Diagnostics of the Monte Carlo Fission Source Distribution. Technical Report LA-UR-03-3949, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 2003.

[UB03b] T. Ueki and F. B. Brown. Stationarity and Source Convergence in Monte Carlo Criticality Calculation. Technical report, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, Nouveau-Mexique, États-Unis, 2003.

[Ver93] T. Vergnaud. Overview of Monte Carlo Methodologies in TRIPOLI-3. In Nuclear Energy Agency, editor, *Advanced Monte Carlo Computer Programs for Radiation Transport (OECD Documents)*, pages 21–30. 1993.

[VIM] VIM. Présentation du code VIM. http://www.vim.anl.gov/. Dernière consultation : avril 2013.

[vN51] J. von Neumann. *Various Techniques Used in Connection with Random Digits*, volume 12 of *Monte Carlo Methods, Applied Mathematics Series*. National Bureau of Standards, États-Unis, 1951.

[Wol08] A. B. Wollaber. *Advanced Monte Carlo Methods for Thermal Radiation Transport*. PhD thesis, University of Michigan, Michigan, États-Unis, 2008.

[Woo65] E. R. Woodcock. Techniques Used in the GEM Code for Monte Carlo Neutronics Calculations in Reactors and Other Systems of Complex Geometry. Technical report, Argonne National Laboratory, Lemont, Illinois, États-Unis, 1965.

[WW58] A. M. Weinberg and E. P. Wigner. *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors*. University of Chicago Press, Chicago, États-Unis, 1958.

Annexes

Annexe A

Introduction à la méthode de Monte-Carlo

Sommaire

A.1 Nombres aléatoires et rappels de statistiques . . 162
A.2 Échantillonnage 164
A.3 Génération de nombres aléatoires 165
A.4 Intervalle de confiance 166

Les méthodes de Monte-Carlo sont des méthodes numériques stochastiques visant à résoudre des problèmes généralement complexes par la simulation de processus aléatoires. De telles méthodes font appel aux nombres aléatoires pour l'échantillonnage de variables dont dépend la grandeur physique cherchée, à la loi des grands nombres pour l'estimation de sa moyenne (espérance mathématique) ainsi qu'au théorème central limite pour l'estimation de l'intervalle de confiance associé.

Ces méthodes ont connu leur essor au cours de la Deuxième Guerre Mondiale notamment par l'impulsion de von Neumann, Ulam et Metropolis [MU49].

A.1 Nombres aléatoires et rappels de statistiques

Soit X une variable aléatoire. X peut être de deux natures différentes : discrète ou continue.

Dans le cas discret, X peut prendre un nombre fini de valeurs. Chaque valeur est associée à une probabilité $\mathbb{P}(X = x_i)$. Une des propriétés essentielles est que

$$\sum_i \mathbb{P}(X = x_i) = 1. \tag{A.1}$$

La *fonction de répartition* de X, notée F_X, s'exprime ainsi :

$$F_X(x) = \sum_{y \leq x} \mathbb{P}(X = y). \tag{A.2}$$

Cette fonction correspond à la probabilité que X prenne une valeur inférieure ou égale à x.

Dans le cas continu, X peut prendre une infinité de valeurs. Les probabilités associées à ces valeurs sont décrites par une *densité de probabilité* notée f_X. À l'instar du cas discret, on a

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x)\, dx = 1. \tag{A.3}$$

La fonction de répartition associée à X est une primitive de f_X. On a

$$F_X(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = \int_{-\infty}^{x} f_X(y)\, dy. \tag{A.4}$$

Une *espérance*, $\mathbb{E}[X]$ est associée à chaque variable aléatoire X et correspond à la moyenne de toutes les valeurs possibles pondérées par leur

probabilité. Dans le cas discret, on a

$$\mathbb{E}[X] = \sum_i x_i \mathbb{P}(X = x_i). \tag{A.5}$$

Dans le cas continu, l'espérance s'exprime ainsi :

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x)\, dx. \tag{A.6}$$

Nous notons par $\bar{X}_n$ la moyenne de l'échantillon $x_1, x_2, \cdots, x_n$ composé de n variables aléatoires indépendantes suivant la même loi de probabilité et intégrables. On a

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i. \tag{A.7}$$

D'après la loi forte des grands nombres,

$$\bar{X}_n - \mathbb{E}\left[\bar{X}_n\right] \xrightarrow{p.s.} 0, \tag{A.8}$$

c'est-à-dire que la moyenne converge de manière presque sûre vers l'espérance.

La *variance*, quant à elle, permet de mesurer la dispersion des valeurs autour de l'espérance. La variance, $\mathbb{V}[X]$ se définit alors comme

$$\mathbb{V}[X] = \mathbb{E}\left[(X - \mathbb{E}[X])^2\right]. \tag{A.9}$$

Il découle de cette définition et de la linéarité de l'intégrale que

$$\mathbb{V}[X] = \mathbb{E}\left[X^2\right] - (\mathbb{E}[X])^2. \tag{A.10}$$

La notion d'*écart-type* découle directement de la notion de variance. L'écart-type, σ_X, a pour avantage de s'exprimer avec les mêmes unités que l'espérance :

$$\sigma_X = \sqrt{\mathbb{V}[X]}. \tag{A.11}$$

La variance de la moyenne, notée $\sigma^2_{\bar{X}}$, a pour expression :

$$\sigma^2_{\bar{X}} = \frac{\sigma^2_X}{N}, \tag{A.12}$$

où N correspond à la taille de l'échantillon. Cette formule n'est valable que dans le cas où les variables aléatoires considérées ne sont pas corrélées.

Il peut arriver qu'un processus aléatoire fasse intervenir plusieurs variables aléatoires. Il est alors intéressant de pouvoir mesurer la corrélation de

ces variables. Cette corrélation n'a en général de signification que si on soustrait l'espérance des variables aléatoires. Dans ce cas, on l'appelle covariance, notée $\mathrm{Cov}\,[X,Y]$ pour deux variables aléatoires X et Y. On a

$$\mathrm{Cov}\,[X,Y] = E\left(X - \mathbb{E}\,[X]\right) E\left(Y - \mathbb{E}\,[Y]\right). \tag{A.13}$$

On constate que la covariance est une mesure de la variation simultanée des deux variables aléatoires X et Y. Puisque cette mesure est absolue, il peut être préférable d'avoir recours au *coefficient de corrélation* $\rho_{X,Y}$ défini ainsi :

$$\rho_{X,Y} = \frac{\mathrm{Cov}\,[X,Y]}{\sqrt{\mathbb{V}\,[X]\,\mathbb{V}\,[Y]}}. \tag{A.14}$$

Ce coefficient est alors compris entre -1 et 1. Si ce coefficient est égal à 0, alors les variables X et Y ne sont pas corrélées. Dans le cas où $\rho_{X,Y} < 0$, X et Y sont négativement corrélées (elles évoluent dans le sens contraire) et dans le cas où $\rho_{X,Y} > 0$, X et Y sont positivement corrélées (elles évoluent dans le même sens).

Il est important de noter que la non corrélation de deux variables aléatoires n'implique pas leur indépendance. Par contre, deux variables aléatoires indépendantes sont nécessairement non corrélées.

A.2 Échantillonnage

Il existe plusieurs manières d'échantillonner des valeurs selon une distribution donnée. Nous en présentons ici quelques unes.

Une méthode très répandue à l'époque de la création de la méthode de Monte-Carlo est la méthode de rejet (*rejection method* en anglais) mise au point par von Neumann [vN51]. Cette méthode consiste à échantillonner selon une distribution arbitraire, $g(x)$, avec pour condition

$$p(x) < Cg(x), \tag{A.15}$$

où $p(x)$ est la distribution selon laquelle on souhaiterait échantillonner et C une borne supérieure à $\frac{g(x)}{p(x)}$. Il est nécessaire de tirer deux nombres aléatoires : un premier, X, selon g et un second, Y, selon une loi uniforme entre 0 et 1. X est alors accepté si

$$\frac{p\,(X)}{Cg\,(X)} > Y. \tag{A.16}$$

Une autre méthode, fréquemment utilisée dans les codes Monte-Carlo de neutronique, est la méthode de la transformée inverse (*inversion method* en

anglais) [SG08]. Cette méthode utilise la fonction de répartition de la loi à échantillonner. L'idée de cette méthode est de poser

$$F_X(x) = \xi \tag{A.17}$$

et de résoudre alors

$$x = F_X^{-1}(\xi). \tag{A.18}$$

En choisissant ξ de manière aléatoire, par exemple selon une loi uniforme comprise entre 0 et 1, il est possible d'échantillonner selon F_X et donc selon f_X. On peut illustrer cette méthode par l'échantillonnage de la longueur du vol d'un neutron entre deux sites de collision. La probabilité qu'un neutron interagisse en dx après avoir parcouru une distance x est

$$p(x)dx = \Sigma_t e^{-\Sigma_t x} dx. \tag{A.19}$$

La densité de probabilité a donc pour expression

$$p(x) = \Sigma_t e^{-\Sigma_t x} \tag{A.20}$$

et la fonction de répartition

$$\mathbb{P}(x) = \int_0^x \Sigma_t e^{-\Sigma_t x} dx = 1 - e^{-\Sigma_t x}. \tag{A.21}$$

En reprenant le principe de la méthode de la transformée inverse, on tire aléatoirement ξ selon une loi uniforme entre 0 et 1. On a :

$$\xi = 1 - e^{-\Sigma_t x}, \tag{A.22}$$

par conséquent

$$x = \frac{\ln(1-\xi)}{\Sigma_t}. \tag{A.23}$$

Par commodité, on peut poser $\xi' = 1 - \xi$. On a alors :

$$x = \frac{\ln(\xi')}{\Sigma_t}, \tag{A.24}$$

ξ' suivant également une loi uniforme entre 0 et 1.

A.3 Génération de nombres aléatoires

La génération de nombres aléatoires est un problème central pour les méthodes de Monte-Carlo. Dans les faits, ces nombres aléatoires sont générés par des algorithmes. On parle donc de nombres pseudo-aléatoires. Spanier et Gelbard, dans [SG08], présentent les deux enjeux majeurs de tels algorithmes :

1. combien de nombres aléatoires différents peuvent être générés par l'algorithme choisi ?
2. comment se comporte statistiquement la séquence de nombres aléatoires générés du point de vue du « vrai » hasard ?

Afin d'explorer au mieux l'espace des phases, il est nécessaire de tirer le plus de nombres aléatoires différents possibles avec la meilleure qualité de hasard possible.

Un des algorithmes les plus répandus est celui de Lehmer. Il s'agit du générateur congruentiel linéaire. On note X_0 la graine, c'est-à-dire la valeur d'initialisation de la séquence et m la période. m est généralement choisie égale à une puissance de deux, ce qui correspond généralement au nombre de bits nécessaire pour encoder un entier ou un flottant. La séquence est générée de la manière suivante :

$$X_{n+1} = (aX_n + c) \pmod{m}. \tag{A.25}$$

Le nombre maximal de nombres aléatoires différents possibles est alors m.

De nombreuses autres méthodes de génération de nombres aléatoires existent. Parmi elles, on peut citer l'algorithme Mersenne Twister mis au point par Matsumoto et Nishimura en 1997 [MN98].

A.4 Intervalle de confiance

D'après le théorème central limite, en supposant que nos variables aléatoires X soient indépendantes, identiquement distribuées et telles que l'espérance et la variance existent, alors pour N suffisamment grand, les moyennes empiriques $\bar{X}(N)$ seront distribuées selon une loi normale.

Ce théorème nous permet de donner des intervalles de confiance pour l'estimation de la moyenne. On peut, par exemple, dire que la vraie moyenne μ est comprise dans un intervalle de deux sigmas de la moyenne estimée $\bar{X}$ autour de $\bar{X}$ avec une probabilité de 95 % :

$$\mathbb{P}\left(\mu \in \left[\bar{X} - 2\sigma_{\bar{X}} \ ; \ \bar{X} + 2\sigma_{\bar{X}}\right]\right) \approx 95\ \%. \tag{A.26}$$

De même, μ est comprise dans un intervalle à trois sigmas avec une probabilité de 99,7 % :

$$\mathbb{P}\left(\mu \in \left[\bar{X} - 3\sigma_{\bar{X}} \ ; \ \bar{X} + 3\sigma_{\bar{X}}\right]\right) \approx 99{,}7\ \%. \tag{A.27}$$

On peut donc fournir une réponse, un score demandé, avec une estimation de son erreur.

Toutefois, dans le cas de la méthode de l'itération de la puissance, les neutrons issus d'une fission au batch n deviennent les sources du batch $n+1$. Les batches sont donc corrélés. L'hypothèse d'indépendance énoncée dans le paragraphe précédent n'est donc plus vérifiée. Il faut donc tenir compte de ces corrélations pour obtenir une estimation correcte de la variance et par conséquent de l'intervalle de confiance des résultats.

Une des méthodes possibles consiste à remplacer plusieurs valeurs consécutives par leur moyenne. C'est ce qu'on appelle la méthode des paquets [FP89, Tea13, PKT+09]. Cette méthode permet d'éliminer les corrélations entre les valeurs moyennées. La bonne qualité des résultats dépend de la taille des paquets formés. Cette longueur doit être très supérieure à longueur des corrélations.

Une autre méthode consiste à répéter les simulations de manière indépendante et à ne garder que la moyenne finale pour chaque simulation.

Annexe B

Construction du jeu à variance nulle

Sommaire

B.1 Calcul théorique de l'adjoint 170
B.1.1 Définitions et notations 170
B.1.2 Rappels mathématiques sur les opérateurs adjoints 171
B.1.3 Réponse d'un détecteur 171
B.1.4 Densités adjointes 172
B.2 Biaisage par l'adjoint 175
B.2.1 Biaisage des noyaux et des densités 175
B.2.2 Fonction d'importance idéale 177
B.2.3 Biaisage de l'estimateur collision 177
B.2.4 Biaisage des sources 179
B.3 Variance de l'estimateur collision 180
B.3.1 Notations et définitions 180
B.3.2 Moments statistiques 181
B.4 Schéma de calcul pour le jeu à variance nulle en criticité 183
B.4.1 Notations et définitions 183
B.4.2 Poids de biaisage 184

B.1 Calcul théorique de l'adjoint

B.1.1 Définitions et notations

Nous rappelons l'équation intégro-différentielle du transport en régime stationnaire :

$$\begin{aligned}&\vec{\Omega}\cdot\nabla\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)+\Sigma_t\left(\vec{r},E\right)\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)\\&=\iint\Sigma_s\left(\vec{r},E'\right)\phi\left(\vec{r},E',\vec{\Omega}'\right)dE'd\vec{\Omega}'+S\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right).\end{aligned}\tag{B.1}$$

On note $\chi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)$ la densité d'émission qui correspond au nombre moyen de particules démarrant leur vol en P.

Lors d'une simulation Monte-Carlo, une particule, un neutron, est d'abord échantillonné à partir d'une source, puis le site de sa première collision est échantillonné selon T. La collision est ensuite échantillonnée selon C. Ce processus se répète tout au long de la vie de la particule. Hoogenboom propose de schématiser le processus comme présenté sur la figure B.1 [Hoo08].

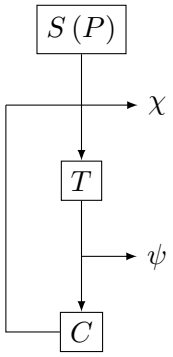


FIGURE B.1 – Schéma du transport d'une particule.

On rappelle que :

$$\psi\left(P\right)=\Sigma_t\left(P\right)\phi\left(P\right).\tag{B.2}$$

On note également

$$\mathcal{L}\left(P'\to P\right)=C\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)T\left(\vec{r'}\to\vec{r},E',\vec{\Omega}'\right).\tag{B.3}$$

Nous cherchons à expliciter χ et ψ. $\chi(P)$ est la somme de la source en P et des neutrons sortant de collision en P. On a donc :

$$\begin{aligned}\chi(P) &= S(P) + \int C\left(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}\right) T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E', \vec{\Omega}'\right) \chi\left(P'\right) dP' \\ &= S(P) + \int \mathcal{L}\left(P' \to P\right) \chi\left(P'\right) dP'. \end{aligned} \tag{B.4}$$

$\psi(P)$, quant à lui, est la somme de la source des neutrons de première collision S_1 – neutrons venant directement de la source et arrivant en P sans avoir subi de collision – en P et de tous les neutrons entrés en collision en n'importe quel point de l'espace des phases P' dont la prochaine collision aura lieu en P :

$$\psi(P) = S_1(P) + \int \mathcal{T}\left(P' \to P\right) \psi\left(P'\right) dP'. \tag{B.5}$$

On peut montrer que

$$\psi(P) = \int T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) \chi\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r}. \tag{B.6}$$

B.1.2 Rappels mathématiques sur les opérateurs adjoints

Soit un opérateur $K(y \to x)$ avec $K : H \longrightarrow H$ et k son noyau. Soient deux fonctions $f, g : H \longrightarrow H$. On note K^* l'opérateur adjoint de K. On montre que

$$K(y \to x) = K^*(x \to y). \tag{B.7}$$

En effet, on a :

$$\int g(x)dx \int k(x,y)f(y)dy = \int f(x)dx \int k(y,x)g(y)dy. \tag{B.8}$$

Autrement dit,

$$< g, Kf > = < K^*g, f > . \tag{B.9}$$

B.1.3 Réponse d'un détecteur

Hoogenboom définit la réponse d'un détecteur R (réel ou virtuel) ainsi [Hoo77] :

$$\begin{aligned} R &= \int f_\phi \phi(P)\, dP, \\ &= \int f_\psi \psi(P)\, dP, \\ &= \int f_\chi \chi(P)\, dP, \end{aligned} \tag{B.10}$$

où f_ϕ correspond à la fonction réponse du détecteur par rapport au flux, f_ψ à la réponse du détecteur par rapport à la densité de collision et f_χ à la réponse du détecteur par rapport à la densité d'émission. On voit d'après la relation (B.2) que

$$f_\psi = \frac{f_\phi}{\Sigma_t}. \tag{B.11}$$

En rappelant la relation (B.6) entre ψ et χ, on en déduit que

$$f_\chi(P) = \int f_\psi\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'}. \tag{B.12}$$

B.1.4 Densités adjointes

Densité de collision

On rappelle (B.5) :

$$\psi(P) = S_1(P) + \int \mathcal{T}\left(P' \to P\right) \psi\left(P'\right) dP' \tag{B.13}$$

et nous calculons $\psi^*(P)$ la densité de collision adjointe :

$$\psi^*(P) = S_1^*(P) + \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right) \psi^*\left(P'\right) dP'. \tag{B.14}$$

Supposons que

$$S_1^* = f_\psi, \tag{B.15}$$

alors nous avons

$$\psi^*(P) = f_\psi(P) + \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right) \psi^*\left(P'\right) dP'. \tag{B.16}$$

On montre que :

$$R = \int S_1(P)\, \psi^*(P)\, dP = \int \psi(P)\, f_\psi(P)\, dP. \tag{B.17}$$

En effet,

$$\begin{aligned} R &= \int \psi(P) f_\psi(P) dP \\ &= \int \left(\psi(P') - \int \mathcal{T}^*(P' \to P) \psi^*(P') dP' \right) \psi(P) dP \\ &= \int \psi(P) \psi^*(P') - \iint \psi^*(P') \mathcal{T}^*(P' \to P) \psi(P) dP' dP \\ &= \int \psi(P) \psi^*(P') - \iint \psi^*(P') \mathcal{T}(P \to P') \psi(P) dP' dP \\ &= \int \psi(P) \psi^*(P') - \int \psi^*(P') (\psi(P) - S_1(P)) dP \\ &= \int S_1(P) \psi^*(P) dP. \end{aligned} \tag{B.18}$$

On déduit de cette relation que la densité de collision adjointe relative à f_ψ permet de calculer la contribution d'une particule entrant en collision en P à la réponse R du détecteur.

Densité d'émission

De la même manière, on peut calculer la densité d'émission adjointe χ^* et définir une réponse R en terme de χ^*.

On rappelle que

$$\chi(P) = S(P) + \int \mathcal{L}(P' \to P) \chi(P') dP'. \tag{B.19}$$

On calcule son adjoint :

$$\chi^*(P) = f_\chi(P) + \int \mathcal{L}(P' \to P) \chi(P') dP'. \tag{B.20}$$

La réponse R se définit alors comme

$$R = \int S(P) \chi^*(P) dP = \int f_\chi(P) \chi(P) dP. \tag{B.21}$$

De la même manière que pour la densité de collision adjointe, on remarque que χ^* correspond à l'importance, vis-vis de la réponse R, d'une particule démarrant son vol en P.

Lien entre f_χ et f_ψ

Nous avons introduit plus tôt la relation (B.6). En utilisant la définition d'une réponse R pour une fonction réponse f_ψ, on a :

$$\begin{aligned} R &= \int f_\psi(P)\,\psi(P)\,dP, \\ &= \int f_\psi(P) \int T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) \chi\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'} dP, \\ &= \int f_\psi\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) \int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \chi(P)\, d\vec{r} dP, \end{aligned} \tag{B.22}$$

or

$$R = \int f_\chi(P)\,\chi(P)\,dP, \tag{B.23}$$

donc

$$f_\chi(P) = \int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) f_\psi\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'}. \tag{B.24}$$

Relation entre les densités ajointes

On souhaite pouvoir exprimer ψ^* en fonction de χ^*. On rappelle la définition de la densité de collision adjointe (B.16) :

$$\psi^*(P) = f_\psi(P) + \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right) \psi^*\left(P'\right) dP'. \tag{B.25}$$

On a

$$\psi^*(P) = f_\psi(P) + \int T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) C\left(\vec{r}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right) \psi^*\left(P'\right) dP'. \tag{B.26}$$

On remplace $\vec{r}$ par $\vec{r'}$, $P = \left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)$ par $P_{\vec{r'}} = \left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right)$, $\vec{r'}$ par $\vec{r''}$ et $P' = \left(\vec{r'}, E', \vec{\Omega'}\right)$ par $P'_{\vec{r''}} = \left(\vec{r''}, E', \vec{\Omega'}\right)$.

En appliquant à gauche l'opérateur de transition $T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right)$ et en intégrant par rapport à $\vec{r'}$, on a :

$$\begin{aligned} &\int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \psi^*\left(P_{\vec{r'}}\right) d\vec{r'} \\ &= \int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) f_\psi\left(P_{\vec{r'}}\right) d\vec{r'} \\ &+ \int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \int T\left(\vec{r''} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) C\left(\vec{r'}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right) \\ &\times \psi^*\left(P'_{\vec{r''}}\right) dP'_{\vec{r''}} d\vec{r'}, \\ &= f_\chi(P) + \int \mathcal{L}\left(P' \to P\right) \int T\left(\vec{r''} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \psi^*\left(P'_{\vec{r''}}\right) dP'_{\vec{r''}} d\vec{r'}. \end{aligned} \tag{B.27}$$

En comparant avec l'équation (B.4), on remarque que

$$\chi^{*}\left(P\right)=\int T\left(\vec{r}\rightarrow\vec{r'},E,\vec{\Omega}\right)\psi^{*}\left(\vec{r'},E,\vec{\Omega}\right)d\vec{r'}. \tag{B.28}$$

En reprenant l'équation (B.16)

$$\begin{aligned}\psi^{*}\left(P\right)&=f_{\psi}\left(P\right)+\int\mathcal{T}\left(P\rightarrow P'\right)\psi^{*}\left(P'\right)dP',\\&=f_{\psi}\left(P\right)+\int C\left(\vec{r},E\rightarrow E',\vec{\Omega}\rightarrow\vec{\Omega'}\right)T\left(\vec{r}\rightarrow\vec{r'},E,\vec{\Omega}\right)\psi^{*}\left(P'\right)dP',\\&=f_{\psi}\left(P\right)+\iint C\left(\vec{r},E\rightarrow E',\vec{\Omega}\rightarrow\vec{\Omega'}\right)\chi^{*}\left(\vec{r},E',\vec{\Omega'}\right)dE'd\vec{\Omega'}.\end{aligned} \tag{B.29}$$

B.2 Biaisage par l'adjoint

L'équipe du projet TRIPOLI-2 propose un biaisage des noyaux de transition et de collision, ainsi que des sources afin d'arriver au jeu à variance nulle. Une implémentation du jeu à variance nulle est disponible dans le code TRIPOLI-2 [BBD+]. Cette implémentation repose sur le biaisage des noyaux de transition et de collision ainsi que sur le biaisage des sources. L'idée directrice est de multiplier l'équation du transport par une fonction d'importance I définie positive et adéquatement normalisée.

Dans ses travaux, Hoogenboom propose également une démonstration de la validité de ces considérations moyennant l'hypothèse d'une simulation sans roulette russe [Hoo08]. Nous discuterons de cette hypothèse d'un point de vue pratique.

B.2.1 Biaisage des noyaux et des densités

On part de la définition de la densité de collision ψ, équation (B.5) :

$$\psi\left(P\right)=S_{1}\left(P\right)+\int\mathcal{T}\left(P'\rightarrow P\right)\psi\left(P'\right)dP'. \tag{B.30}$$

Dans le but d'obtenir une source de première collision S_1 normalisée, on pose :

$$\int I_{\psi}\left(P\right)S_{1}\left(P\right)dP=1. \tag{B.31}$$

Par la suite, on notera $\bar{X}$ un noyau ou une fonction X biaisé. Nous considérons les changements de variables suivants dans la suite de l'exposé :

$$\begin{aligned}\bar{S_{1}}\left(P\right)&=I_{\psi}\left(P\right)S_{1}\left(P\right),\\\bar{\psi}\left(P\right)&=I_{\psi}\left(P\right)\psi\left(P\right),\end{aligned} \tag{B.32}$$

où I_ψ correspond à la fonction d'importance relative à ψ.

On obtient donc l'expression de la densité de collision biaisée suivante

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(P) &= I_\psi(P) S_1(P) + \int \frac{I_\psi(P)\mathcal{T}(P' \to P)}{I_\psi(P')} I_\psi(P') \psi(P') dP', \\ &= \bar{S}_1(P) + \int \bar{\mathcal{T}}(P' \to P) \bar{\psi}(P') dP' \end{aligned} \tag{B.33}$$

et ainsi

$$\bar{\mathcal{T}}(P' \to P) = \frac{I_\psi(P)}{I_\psi(P')} \mathcal{T}(P' \to P). \tag{B.34}$$

Du point de vue de la réponse du détecteur R, on a :

$$\begin{aligned} R &= \int f_\psi(P) \psi(P) dP, \\ &= \int \frac{f_\psi(P)}{I_\psi(P)} I_\psi(P) \psi(P) dP, \\ &= \int \bar{f}_\psi(P) \bar{\psi}(P) dP \end{aligned} \tag{B.35}$$

où

$$\bar{f}_\psi = \frac{f_\psi}{I_\psi}. \tag{B.36}$$

Hoogenboom note [Hoo08]

$$\bar{\kappa}(P') = \int \bar{\mathcal{T}}(P' \to P) dP. \tag{B.37}$$

En effet, le noyau de transport biaisé n'est *a priori* pas normalisé à l'unité. Il propose également d'utiliser $\bar{\kappa}$ comme facteur de correction du poids statistique en échantillonnant alors selon

$$\frac{\bar{\mathcal{T}}(P' \to P)}{\bar{\kappa}(P')}. \tag{B.38}$$

Hoogenboom, en reprenant la démarche précédente, propose de formuler $\bar{\chi}$ ainsi :

$$\bar{\chi}(P) = \chi(P) I_\chi(P), \tag{B.39}$$

$$\bar{\chi}(P) = \bar{S}(P) + \int \bar{\mathcal{L}}(P' \to P) \bar{\chi}(P') dP', \tag{B.40}$$

et $\bar{\mathcal{L}}$ ainsi :

$$\bar{\mathcal{L}}(P' \to P) = \frac{I_\chi(P)}{I_\chi(P')} \mathcal{L}(P' \to P), \tag{B.41}$$

puis

$$R = \int f_\chi(P)\,\chi(P)\,dP = \int \bar{f}_\chi(P)\,\bar{\chi}(P)\,dP, \tag{B.42}$$

où

$$\bar{f}_\chi = \frac{f_\chi}{I_\chi}. \tag{B.43}$$

B.2.2 Fonction d'importance idéale

En reprenant les travaux suivants [Kah56, CCY67, Erm75], Hoogenboom énonce que la fonction d'importance idéale, optimale, vis-à-vis de la densité de collision, est [Hoo79]

$$I_{\psi_{\text{opt}}} = \frac{\psi^*(P)}{R}. \tag{B.44}$$

On a donc, pour $\bar{\kappa}$,

$$\begin{aligned}\bar{\kappa}(P') &= \int \bar{\mathcal{T}}(P' \to P)\,dP,\\ &= \frac{1}{\psi^*(P')}\int \mathcal{T}(P' \to P)\,\psi^*(P)\,dP,\end{aligned} \tag{B.45}$$

or,

$$\psi^*(P) = f_\psi(P) + \int \mathcal{T}(P \to P')\,\psi^*(P')\,dP', \tag{B.46}$$

donc

$$\bar{\kappa}(P') = 1 - \frac{f_\psi(P')}{\psi^*(P)} \leqslant 1. \tag{B.47}$$

$\bar{\kappa}$ est communément appelée « probabilité de non-absorption » dans les codes [BBD+]. En effet, on peut voir que, par définition, $\bar{\kappa}$ étant liée au noyau de transport, il s'agit de la probabilité d'effectuer un transport en P venant de n'importe quel point de l'espace des phases.

B.2.3 Biaisage de l'estimateur collision

On va se servir par la suite de $\bar{\kappa}$ pour obtenir le jeu à variance nulle. Nous faisons l'hypothèse, avec Hoogenboom, d'une simulation sans roulette russe. En effet, cette dernière introduit nécessairement une variance. On remarque toutefois que cette hypothèse induit un problème pratique : la fin de vie de la particule, ainsi que la fin de la simulation. Il est bien entendu nécessaire d'avoir recours à cette technique, toutefois, et pour un but pédagogique, nous ne la considérerons pas.

On note w_0 le poids initial de la particule. P_1, P_2, …, P_n désignent une suite de points de collision. Après une collision en P_1, on a

$$w = w_0 \bar{\kappa}(P_1), \tag{B.48}$$

puis en P_2

$$w = w_0 \bar{\kappa}(P_1)\,\bar{\kappa}(P_2) \tag{B.49}$$

et ainsi de suite.

On considère $\hat{R}_n$ la réponse, à la n-ième collision, cette dernière étant une absorption :

$$\hat{R}_n = w_0 \bar{\kappa}(P_1)\,\bar{\kappa}(P_2)\ldots\bar{\kappa}(P_{n-1})\,\frac{f_\psi(P_n)}{\psi^*(P_n)}R. \tag{B.50}$$

On rappelle toutefois qu'il n'y pas de roulette russe, l'histoire de la particule est donc infinie :

$$\hat{R}_{\text{coll}} = w_0 \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\kappa}(P_1)\,\bar{\kappa}(P_2)\ldots\bar{\kappa}(P_{n-1})\,\frac{f_\psi(P_n)}{\psi^*(P_n)}R. \tag{B.51}$$

On rappelle également que

$$I_{\text{opt}} = \frac{\psi^*(P)}{R} \tag{B.52}$$

et

$$\bar{\kappa}\left(P'\right) = 1 - \frac{f_\psi(P')}{\psi^*(P')}. \tag{B.53}$$

On a

$$\begin{aligned}
\hat{R}_{\text{coll}} &= \frac{f_\psi(P_1)}{\psi^*(P_1)}R + \left(1 - \frac{f_\psi(P_1)}{\psi^*(P_1)}\right)\frac{f_\psi(P_2)}{\psi^*(P_2)}R + \ldots, \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \kappa(\bar{P}_1)\kappa(\bar{P}_2)\ldots\kappa(\bar{P}_{n-1})\frac{f_\psi(P_n)}{\psi^*(P_n)}R, \\
\frac{\hat{R}_{\text{coll}}}{R} &= \frac{f_\psi(P_1)}{\psi^*(P_1)} + \bar{\kappa}(P_1)\,\frac{f_\psi(P_2)}{\psi^*(P_2)} + \bar{\kappa}(P_1)\,\bar{\kappa}(P_2)\,\frac{f_\psi(P_3)}{\psi^*(P_3)} + \ldots.
\end{aligned} \tag{B.54}$$

On rappelle au passage que

$$\frac{f_\psi(P_1)}{\psi^*(P_1)} = 1 - \bar{\kappa}(P_1). \tag{B.55}$$

En factorisant par $-\bar{\kappa}(P_1)$, on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{R}_{\text{coll}}}{R} &= 1 - \bar{\kappa}(P_1)\left[1 - \frac{f_\psi(P_2)}{\psi^*(P_2)} - \bar{\kappa}(P_2)\,\frac{f_\psi(P_3)}{\psi^*(P_3)} - \ldots\right], \\
&= 1 - \bar{\kappa}(P_1)\,\bar{\kappa}(P_2)\left[1 - \frac{f_\psi(P_3)}{\psi^*(P_3)} - \bar{\kappa}(P_3)\,\frac{f_\psi(P_4)}{\psi^*(P_4)} - \ldots\right], \\
&= 1 - \underbrace{\bar{\kappa}(P_1)\,\bar{\kappa}(P_2)\ldots}_{\longrightarrow 0}, \\
&= 1.
\end{aligned} \tag{B.56}$$

$\hat{R}_{\text{coll}}$ est bien un estimateur non biaisé de R.

B.2.4 Biaisage des sources

On rappelle que

$$\bar{S}_1(P) = S_1(P)\frac{\psi(P)}{R} \tag{B.57}$$

et

$$S_1(P) = \int T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) S\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'}. \tag{B.58}$$

On a aussi

$$\bar{S}_1(P) = I(P) S_1(P) \tag{B.59}$$

et

$$I(P) = \frac{\psi^*(P)}{R}. \tag{B.60}$$

Nous avons donc

$$\begin{aligned}\bar{S}_1(P) &= S_1(P)\frac{\psi^*(P)}{R}, \\ &= \frac{\psi^*(P)}{R}\int T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) S\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'}.\end{aligned} \tag{B.61}$$

La densité d'émission adjointe a pour expression

$$\chi^*(P) = \int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \psi^*\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'}. \tag{B.62}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}\bar{S}_1(P) &= \int \frac{T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)}{\chi^*\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right)} S\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \frac{\chi^*\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right)}{R} d\vec{r'}, \\ &= \int \bar{T}\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) \bar{S}\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'},\end{aligned} \tag{B.63}$$

avec

$$\bar{T}\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) = T\left(\vec{r'} \to \vec{r}, E, \vec{\Omega}\right) \frac{\psi^*\left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)}{\chi^*\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right)}. \tag{B.64}$$

$\bar{T}$ est bien un noyau normalisé car

$$\chi^*(P) = \int T\left(\vec{r} \to \vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) \psi^*\left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right) d\vec{r'} \tag{B.65}$$

et enfin, toujours dans le cas où $I(P) = \frac{\psi^*(P)}{R}$,

$$\bar{S}(P) = S(P)\frac{\chi^*(P)}{R}. \tag{B.66}$$

B.3 Variance de l'estimateur collision

B.3.1 Notations et définitions

Hoogenboom nous propose également de calculer la variance de l'estimateur collision adéquatement biaisé par le noyau de transport adjoint [Hoo08].

On commence par rappeler la définition de la source de première collision biaisée :

$$\bar{S}_1(P) = \frac{S_1(P)}{I(P)}. \tag{B.67}$$

On note le noyau de transport biaisé, normalisé à $\bar{\kappa}$, $\bar{\mathcal{T}}$:

$$\bar{\mathcal{T}}(P \to P') = \frac{\mathcal{T}(P \to P')}{\bar{\kappa}(P)}. \tag{B.68}$$

On considère que le poids initial d'une particule démarrant sa vie en P est

$$w_0(P) = \frac{1}{I(P)}. \tag{B.69}$$

À chaque collision, on a

$$w_{n+1}(P) = w_n(P)\,\bar{\kappa}(P)\,\frac{I(P)}{(P')}. \tag{B.70}$$

Hoogenboom, reprenant les travaux de Coveyou, Cain et Yost [CCY67] dans [Hoo08], définit $\bar{\xi}(P)$ comme la contribution présente et future d'une particule entrant en collision en P, pour l'estimateur considéré, en l'occurrence l'estimateur collision.

Pour une particule de poids $w = 1$, on a

$$\bar{\xi}(P) \overset{distr.}{=} f_\psi(P) + \bar{\kappa}(P)\,\frac{I(P)}{(P')}\bar{\xi}(P'), \tag{B.71}$$

où $\overset{distr.}{=}$ signifie égal en distribution [Hoo08], $f_\psi(P)$ est toujours la fonction réponse du détecteur par rapport à la densité de collision et $\bar{\kappa}(P)\,\frac{I(P)}{(P')}\bar{\xi}(P')$ est le terme de collision suivante. Dans le cas où le poids n'est pas égal à 1, il faut multiplier le membre de droite par le poids de la particule.

B.3.2 Moments statistiques

Premier moment

On calcule ensuite l'espérance de $\bar{\xi}$, $E\left[\bar{\xi}\right]$, en rappelant que l'échantillonnage a lieu selon le noyau de transport biaisé $\bar{\mathcal{T}}'$:

$$\begin{aligned} E\left[\bar{\xi}\right] &= \int \bar{\mathcal{T}}\left(P \to P'\right) \bar{\xi}\left(P'\right) dP', \\ &= \int \bar{\mathcal{T}}\left(P \to P'\right) E\left[f_\psi\left(P\right) + \bar{\kappa}\left(P\right) \frac{I\left(P\right)}{\left(P'\right)} \bar{\xi}\left(P'\right)\right] dP', \\ &= f_\psi\left(P\right) + \int \bar{\mathcal{T}}\left(P \to P'\right) \frac{I\left(P\right)}{\left(P'\right)} E\left[\bar{\xi}\left(P'\right)\right] dP', \\ &= f_\psi\left(P\right) + \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right) E\left[\bar{\xi}\left(P'\right)\right] dP', \end{aligned} \tag{B.72}$$

car $\bar{\mathcal{T}}\left(P \to P'\right) = \mathcal{T}\left(P \to P'\right) \frac{I(P)}{(P')}$.

En se rappelant de la définition de la densité de collision adjointe (B.16)

$$\psi^*\left(P\right) = f_\psi\left(P\right) + \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right) \psi^*\left(P'\right) dP', \tag{B.73}$$

on montre par comparaison que

$$E\left[\bar{\xi}\left(P\right)\right] = \psi^*\left(P\right). \tag{B.74}$$

On a ainsi

$$\begin{aligned} E\left[\hat{R}\right] &= \int E\left[\bar{\xi}\left(P\right)\right] \frac{1}{I\left(P\right)} \bar{S}_1\left(P\right) dP, \\ &= \int \psi^*\left(P\right) S_1\left(P\right) dP. \end{aligned} \tag{B.75}$$

On démontre ainsi que l'estimateur est non biaisé.

Deuxième moment

Hoogenboom, se référant toujours aux travaux de Coveyou, Cain et Yost [CCY67], définit $\bar{Q}\left(P\right)$ comme

$$\begin{aligned} \bar{Q}\left(P\right) &= E\left[\bar{\xi}^2\left(P\right)\right], \\ &= \int \bar{\mathcal{T}}'\left(P \to P'\right) E\left[\left(f_\psi\left(P\right) + \bar{\kappa}\left(P\right) \frac{I\left(P\right)}{I\left(P'\right)} \bar{\xi}\left(P'\right)\right)^2\right] dP', \\ &= f_\psi^2\left(P\right) + 2 f_\psi\left(P\right) \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right) E\left[\bar{\xi}\left(P'\right)\right] dP' \\ &+ \bar{\kappa}\left(P\right) \int \bar{\mathcal{T}}\left(P \to P'\right) \frac{I^2\left(P\right)}{I^2\left(P'\right)} \bar{Q}\left(P'\right) dP'. \end{aligned} \tag{B.76}$$

En divisant par $I^2(P)$ et en rappelant l'équation (B.16), on obtient

$$\frac{\bar{Q}(P)}{I^2(P)} = \frac{f_\psi(P)}{I(P)}\left[2\frac{\psi^*(P)}{I(P)} - \frac{f_\psi(P)}{I(P)}\right] + \bar{\kappa_2}(P)\int \bar{\mathcal{T}}(P \to P')\frac{\bar{Q}(P')}{I^2(P')}dP', \tag{B.77}$$

avec $\bar{\kappa_2}(P) = \bar{\kappa}(P) I^2(P)$.

On calcule ensuite l'espérance du carré de l'estimateur :

$$\hat{R}^2 = \int \bar{S}_1(P)\frac{1}{I^2(P)}\bar{Q}(P)\,dP. \tag{B.78}$$

On rappelle que $I(P) = \frac{\psi^*(P)}{R}$, on a

$$R^2 = \frac{\bar{Q}(P)}{I^2(P)}. \tag{B.79}$$

On voit grâce à l'équation (B.78) que la variance de l'estimateur est nulle.

$$\begin{aligned} V\left[\bar{\xi}(P)\right] &= E\left[\bar{\xi}^2(P)\right] - E\left[\bar{\xi}(P)\right]^2, \\ &= R^2 - R^2, \\ &= 0. \end{aligned} \tag{B.80}$$

Hoogenboom multiplie l'équation (B.77) par $I(P)$ et obtient [Hoo08]

$$\frac{\bar{Q}(P)}{I(P)} = f_\psi(P)\left[2\frac{\psi^*(P)}{I(P)} - \frac{f_\psi(P)}{I(P)}\right] + \bar{\kappa_2}(P)\int \bar{\mathcal{T}}(P \to P')\frac{\bar{Q}(P')}{I(P')}dP'. \tag{B.81}$$

Si on remplace $I(P)$ par $\frac{\psi^*(P)}{R}$, on a

$$\frac{\bar{Q}(P)}{\psi^*(P)} = f_\psi(P)\left[2 - \frac{f_\psi(P)}{\psi^*(P)}\right] + \bar{\kappa}(P)\int \mathcal{T}(P \to P')\frac{\bar{Q}(P')}{\psi^*(P')}dP'. \tag{B.82}$$

En reprenant l'équation (B.16) et en multipliant par $1 - \frac{f_\psi(P)}{\psi^*(P)}$, on a

$$\psi^*(P) - f_\psi(P) = f_\psi(P) + \int \mathcal{T}(P \to P')\psi^*(P')\,dP' - \frac{f_\psi^2(P)}{\psi^*(P)} - \frac{f_\psi(P)}{\psi^*(P)}\int \mathcal{T}(P \to P')\psi^*(P')\,dP' \tag{B.83}$$

et ainsi

$$\psi^*(P) = 2f_\psi(P) - \frac{f_\psi^2(P)}{\psi^*(P)} + \bar{\kappa}(P)\int \mathcal{T}(P \to P')\,\psi^*(P')\,dP',$$
$$= f_\psi(P)\left[2 - \frac{f_\psi(P)}{\psi^*(P)}\right] + \bar{\kappa}(P)\int \mathcal{T}(P \to P')\,\psi^*(P')\,dP'. \quad \text{(B.84)}$$

On en conclut que

$$\bar{Q}(P) = \psi^{*2}(P) \quad \text{(B.85)}$$

et que

$$E\left[\hat{R}^2\right] = R^2. \quad \text{(B.86)}$$

B.4 Schéma de calcul pour le jeu à variance nulle en criticité

Nous présentons ici le travail de Christoforou [Chr10], en introduisant ici un schéma de calcul pour le jeu à variance nulle en criticité. La réponse R en question ici sera le k_{eff}.

B.4.1 Notations et définitions

Nous rappelons que le k_{eff} se définit comme le taux de multiplication effectif des neutrons dans le système considéré, ce qui donne :

$$k_{\text{eff}} = \frac{\int S_{n+1}(P)\,dP}{\int S_n(P)\,dP}. \quad \text{(B.87)}$$

On note n la génération, le batch ou encore le cycle. On a aussi

$$S_{n+1}(P) = \frac{1}{4\pi}\chi_f(E)\int \frac{\nu\Sigma_f(\vec{r},E')}{\Sigma_t(\vec{r},E')}\psi_n\left(\vec{r},E',\vec{\Omega}'\right)dE'd\vec{\Omega}'. \quad \text{(B.88)}$$

En rappelant la définition de la densité d'émission (B.4), on a :

$$\chi_n(P) = S(P) + \int \mathcal{L}(P' \to P)\,\chi_n(P')\,dP'. \quad \text{(B.89)}$$

On considère le k_{eff} comme la réponse R d'un détecteur qui serait localisé en tout point du système. La source du batch cosidéré est supposée

normalisée :

$$\begin{aligned} R = k_{\text{eff}} &= \int S_{n+1}(P)\, dP, \\ &= \int \frac{1}{4\pi}\chi_f(E) \iint \frac{\nu\Sigma_f(\vec{r},E')}{\Sigma_t(\vec{r},E')}\psi_n\left(\vec{r},E',\vec{\Omega'}\right) dE' d\vec{\Omega'} dP, \\ &= \int \frac{\nu\Sigma_f(P)}{\Sigma_t(P)}\psi_n(P)\, dP. \end{aligned} \tag{B.90}$$

On établit également la relation

$$\psi_n(P) = S_{1,n}(P) + \int \mathcal{T}\left(P' \to P\right)\psi_n\left(P'\right) dP'. \tag{B.91}$$

En rappelant la relation

$$R = \int S_1(P)\,\psi^*(P)\, dP = \int \psi(P)\, f_\psi(P)\, dP, \tag{B.92}$$

on montre qu'on a dans notre cas

$$f_\psi(P) = \frac{\nu\Sigma_f(P)}{\Sigma_t(P)} \tag{B.93}$$

et donc

$$\psi^*(P) = \frac{\nu\Sigma_f(P)}{\Sigma_t(P)} + \int \mathcal{T}\left(P \to P'\right)\psi^*\left(P'\right) dP'. \tag{B.94}$$

À chaque fission, on encaisse

$$w_f(P) = w\frac{\nu\Sigma_f(P)}{\Sigma_t(P)} = w f_\psi(P). \tag{B.95}$$

Nous précisons que le code TRIPOLI-4®, lui, peut potentiellement générer plusieurs neutrons fils lors de la fission.

B.4.2 Poids de biaisage

Christoforou, dans sa thèse [Chr10], reprenant le travail de Hoogenboom, introduit les notations suivantes :

$$S(P) = W_{\bar{S}}(P)\,\bar{S}(P), \tag{B.96}$$

ce qui donne , en utilisant l'équation (B.66),

$$W_{\bar{S}} = \frac{R}{\chi^*(P)}. \tag{B.97}$$

En rappelant l'équation (B.64), on a de même

$$W_T = \frac{\psi^* \left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)}{\chi^* \left(\vec{r'}, E, \vec{\Omega}\right)}. \tag{B.98}$$

On rappelle la définition de la densité adjointe de collision (B.16)

$$\psi^* (P) = f_\psi (P) + \int \mathcal{T} \left(P \to P'\right) \psi^* \left(P'\right) dP'. \tag{B.99}$$

Comme pour $\bar{T}$, on obtient le noyau de collision biaisé $\bar{C}$:

$$C \left(\vec{R}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right) = W_{\bar{C}} \bar{C} \left(\vec{R}, E' \to E, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega}\right) \tag{B.100}$$

avec

$$W_{\bar{C}} = \frac{\psi^* \left(\vec{r}, E', \vec{\Omega'}\right) - f_\psi \left(\vec{r}, E', \vec{\Omega'}\right)}{\chi^* \left(\vec{r}, E, \vec{\Omega}\right)}. \tag{B.101}$$

Une particule démarre donc sa vie en P avec un poids $W_{\bar{S}} (P)$, puis après avoir subi un transport et une nouvelle collision :

$$w = W_{\bar{S}} W_{\bar{T}} W_{\bar{C}}. \tag{B.102}$$

En conclusion, nous disposons des poids de correction à apporter aux différents noyaux afin de simuler un jeu à variance nulle.

Annexe C

Présentation de quelques codes de simulation Monte-Carlo en criticité

Sommaire

C.1 MCNP 188
C.2 MONK 188
C.3 SCALE/KENO-VI 188
C.4 MERCURY 188
C.5 MVP 189
C.6 MCU 189
C.7 VIM 189
C.8 SERPENT 189
C.9 MORET 189

Nous présentons ici quelques codes principaux de simulation Monte-Carlo en criticité. Nous invitons le lecteur à se référer à la bibliographie pour de plus amples informations ainsi qu'à la bibliographie de ces références.

C.1 MCNP

Le code de simulation MCNP (Monte Carlo N-Particle) est un généraliste de transport de neutrons, photons et électrons. MCNP permet de traiter des géométries en trois dimensions. MCNP permet également un traitement en énergie continue des problèmes. La dernière version disponible du code est la version MNCP6 en version bêta. Cette version a pour vocation de regrouper les deux codes MCNP et MCNPX [MCN].

Nous nous pencherons sur la version 5 de MCNP [Tea03b] dans la suite de la thèse.

C.2 MONK

MONK est un code de simulation Monte-Carlo. Ce code est commercialement géré par le groupe AMEC situé en Angleterre [AMEb].

Le code MONK est développé par ANSWERS Software Service [AMEa]. Ce code est développé depuis plus de 25 ans. Il permet la simulation Monte-Carlo du transport des neutrons en criticité dans des géométries en trois dimensions avec une gestion continue des sections efficaces.

MONK est la version critique du code de protection MCBEND développé également par ANSWERS Software Service [AMEa].

C.3 SCALE/KENO-VI

Le code de simulation SCALE (Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation) est un code développé au Oak Ridge National Laboratory (États-Unis) pour les analyses de sûreté et de criticité [Bow08]. Ce code permet de simuler le transport des neutrons en énergie continue et trois dimensions. KENO-VI est le module de SCALE gérant la criticité.

C.4 MERCURY

MERCURY est un code de simulation développé par le Lawrence Livermore National Laboratory, Calfornie, États-Unis [PT05, PBD+]. Ce code

a pour vocation de remplacer à terme les codes TART [Cul02] et COG [BLWH02].

Le code MERCURY est un code généraliste qui permet la simulation de systèmes en trois dimensions. Il permet également l'utilisation de données nucléaires continues en énergie.

C.5 MVP

Le code MVP, trois dimensions et énergie continue, est un code Monte-Carlo généraliste développé au Japon par la Japan Atomic Energy Agency [JAE05].

C.6 MCU

Le code MCU (Monte Carlo Universal) est un code Monte-Carlo à énergie continue et trois dimensions développé au sein du Kurchatov Institute en Russie. La partie MCU-RFFI/A de MCU est la partie qualifiée du code gérant la criticité [MCU].

C.7 VIM

Le code VIM, développé au Argonne National Laboratory (États-Unis), est un code de simulation Monte-Carlo en énergie continue et géométrie trois dimensions. Ce code peut également être utilisé pour la protection [VIM].

C.8 SERPENT

SERPENT est un code de simulation Monte-Carlo développé au VTT Technical Research Center of Finland, en Finlande, depuis 2004 [Lep12].

Ce code permet de simuler des géométries en trois dimensions. Il a été initialement prévu pour le calcul de burn-up. Il permet d'effectuer des calculs critiques.

La dernière version du code disponible est la version 1.1.7.

C.9 MORET

Le code MORET, développé par l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire), est un code Monte-Carlo de transport de neutrons dans des géométries à trois dimensions.

Ce code a été initialement conçu pour l'évaluation des risques de criticité dans les installations nucléaires en France. Il permet de calculer les valeurs usuelles des calculs critiques (k_{eff}, distribution de sources, etc.). MORET peut utiliser des sections multi-groupes (par appel des codes déterministes externes) ou des sections ponctuelles.

Annexe D

Biaisage et codes de simulation

Sommaire

D.1 Résumé des techniques 192
D.2 Présence et implémentation des techniques dans les codes de simulation Monte-Carlo en criticité 193
D.2.1 MCNP 193
D.2.2 MONK 194
D.2.3 SCALE 195
D.2.4 MORET 195
D.2.5 TRIPOLI-4® 195
D.2.6 Autres codes 195

D.1 Résumé des techniques

Nous résumons dans le tableau D.1 les différentes techniques de réduction de la variance vues au chapitre 4 ainsi que leur(s) champ(s) d'action, et dans le tableau D.2 les différentes techniques d'accélération dans les codes Monte-Carlo en criticité.

Techniques	Biaisage des sources	Biaisage du transport	Biaisage de la collision	Biais statistique
Carte d'importance	oui	oui	oui	non
Roulette russe	non	oui	non	non
Splitting	non	oui	non	non
Capture implicite	non	non	oui	non
Collision forcée	non	non	oui	non
Transformation exponentielle	non	oui	non	non
Absorption continue	non	oui	non	non
Fenêtre de poids	non	oui	non	non
Échantillonnage stratifié	non	oui	non	non
Jeu à variance nulle	oui	oui	oui	non

TABLE D.1 – Tableau récapitulatif des techniques de réduction de la variance.

Techniques	Biaisage des sources	Biaisage du transport	Biaisage de la collision	Biais statistique
Méthode de Woodcock	non	oui	non	non
Méthode de Wielandt	non	non	non	oui
Méthode de la super histoire	non	non	non	oui
Matrice de fission	oui	non	non	oui

TABLE D.2 – Tableau récapitulatif des techniques d'accélération dans les codes Monte-Carlo en criticité.

D.2 Présence et implémentation des techniques dans les codes de simulation Monte-Carlo en criticité

Nous présentons ici, quand les informations sont disponibles, un résumé des techniques de biaisage en criticité utilisées par les codes Monte-Carlo présentés dans l'annexe C.

Certaines techniques de biaisage sont communes aux codes présentés. Il s'agit des techniques suivantes :
- la capture implicite ;
- la roulette russe ;
- le *splitting* ;
- le *quota sampling* ;
- le biaisage de la source ;
- la transformation exponentielle.

D.2.1 MCNP

MCNP dispose de plusieurs méthodes de réduction de la variance ou d'implémentations différentes de ces méthodes.

Roulette russe et *splitting* géométriques

MCNP propose d'appliquer la roulette russe et le *splitting* lors d'un franchissement de surface. Cette implémentation ne tient pas compte du poids de la particule, mais seulement des importances de la zone d'origine I et de la zone d'arrivée I'. On compare alors le ratio des deux valeurs d'importance à 1. Dans le cas où $\frac{I'}{I} < 1$, on applique la roulette russe, dans le cas où $\frac{I'}{I} > 1$, c'est le *splitting* qui est effectué. Seule la dimension spatiale

est prise en compte, c'est pourquoi on parle de roulette russe et de *splitting* géométrique [Tea03a].

Fenêtre de poids

La technique dite de la « fenêtre de poids », est la technique standard de biaisage de MCNP. L'utilisateur définit un seuil pour la roulette russe, une constante permettant de définir le seuil du *splitting* et enfin un poids de survie pour chaque maille du maillage défini par l'utilisateur.

Il est également possible de définir ces paramètres de manière automatique par un générateur interne à MCNP : le *Weight Window Generator*, ou alors, d'avoir recours à un couplage avec un code SN (méthodologie CADIS [1]) [Tea03a].

Matrice de fission

MCNP permet de calculer une matrice de fission. Il est alors possible de se servir du premier vecteur propre de cette matrice pour biaiser les sources.

Autres techniques

MCNP permet également un biaisage des sources (angulaire, spatial et énergétique) soit en précisant la fréquence d'échantillonnage, soit en précisant la forme analytique de la source.

Les techniques de la transformation exponentielle, de l'absorption continue et de la collision forcée sont présentes également [Tea03a].

Il est également possible d'utiliser la méthode de Wielandt pour accélérer la convergence des simulations.

D.2.2 MONK

À l'instar de MCNP, MONK dispose d'une roulette russe et d'un *splitting* géométrique. Il est également possible de définir une carte d'importance en espace et en énergie. Les roulettes russes et le *splitting* ont lieu lors du franchissement d'une frontière. Les particules « splittées » sont alors traitées selon la méthode du *quota sampling* présentée dans ce chapitre.

Le code MONK peut également faire appel à la méthode de la *super histoire*.

1. Consistent Adjoint Driven Importance Sampling

Outre ces techniques, MONK dispose également d'une implémentation de la méthode de Woodcock [AMEa].

D.2.3 SCALE

En plus des techniques usuelles de réduction de la variance, le code SCALE possède une implémentation des fenêtres de poids, de la transformation exponentielle et de la méthodologie CADIS.

Il est également possible de définir une carte d'importance et de biaiser les sources [Bow08].

SCALE dispose enfin d'une implémentation de la *super histoire* [Bow08].

D.2.4 MORET

Le code MORET, développé par l'IRSN, dispose des méthodes de la *super histoire* et de Wielandt. Ce code permet également de calculer des matrices de fission qui peuvent être utilisées à des fins de biaisage. Enfin, MORET dispose également d'une implémentation des méthodes usuelles de réduction de la variance.

D.2.5 TRIPOLI-4®

En criticité, TRIPOLI-4® dispose des techniques usuelles de réduction de la variance que sont la roulette russe, le *splitting*, la capture implicite et la transformation exponentielle.

Ce code permet également l'utilisation d'une carte d'importance. Il dispose d'un module de calcul automatique des coefficients de biaisage appelé *INIPOND*. Il est toutefois possible de fixer les coefficients de Placzek manuellement.

TRIPOLI-4® possède aussi une implémentation de la matrice de fission [Tea13].

D.2.6 Autres codes

Concernant les autres codes, assez peu de documentation a pu être réunie. On peut toutefois trouver quelques informations. MERCURY et MVP disposent d'une implémentation de la méthode des fenêtres de poids [PT05, JAE05]. SERPENT utilise la méthode de Woodcock [Lep12].

Annexe E

Calcul du coefficient de biaisage k pour la méthode de la transformation exponentielle avec utilisation d'une carte d'importance

Sommaire

E.1 Équation de Placzek 198
E.1.1 Hypothèses 198
E.1.2 Résolution 198
E.1.3 Discussion sur k 200
E.1.4 Cas multi-groupe 200
E.2 Calcul des coefficients de Placzek 201
E.2.1 État originel du code 201
E.2.2 Approximation de Weinberg et Wigner 201
E.2.3 Approximation de Case, De Hoffmann et Placzek . 202
E.2.4 Méthode de Newton 202
E.2.5 Résultats 203

E.1 Équation de Placzek

Afin d'obtenir une bonne estimation du flux dans notre géométrie, nous simplifions notre problème en un problème à une dimension, mono-énergétique et à diffusion isotrope.

E.1.1 Hypothèses

On commence par rappeler l'équation du transport :

$$\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)+\Sigma_t\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)= \int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}'\right)d\vec{\Omega}'dE'+S\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right). \quad \text{(E.1)}$$

On pose

$$\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)=f\left(x,\mu\right), \quad \text{(E.2)}$$

où $\mu=\cos(\theta)$. Puisqu'on considère la diffusion isotrope et le milieu homogène, on a :

$$\Sigma_s\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)=\Sigma_s \quad \text{(E.3)}$$

En insérant ceci dans l'équation (E.1), on obtient :

$$\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)+\Sigma_t\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)=\mu\frac{\partial}{\partial x}f\left(x,\mu\right)+\Sigma_t f\left(x,\mu\right) \quad \text{(E.4)}$$

et

$$\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s\left(\vec{r},E'\to E,\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\right)\phi\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}'\right)d\vec{\Omega}'dE'+S\left(\vec{r},E,\vec{\Omega}\right)= \frac{\Sigma_s}{2}\int_{-1}^{1}f\left(x,\mu'\right)d\mu'+S\left(x,\mu\right) \quad \text{(E.5)}$$

E.1.2 Résolution

On résout cette dernière équation par la méthode de la séparation des variables en posant :

$$f\left(x,\mu\right)=\chi\left(x\right)\nu\left(\mu\right). \quad \text{(E.6)}$$

Ce qui nous donne, par insertion dans l'équation (E.5) :

$$\mu\nu(\mu)\chi'(x) + \Sigma_t\chi(x)\nu(\mu) = \frac{\Sigma_s}{2}\chi(x)\int_{-1}^{1}\nu(\mu')\,d\mu',$$
$$\mu\chi'(x) + \Sigma_t\chi(x) = \frac{\Sigma_s}{2}\frac{\chi(x)}{\nu(\mu)}\int_{-1}^{1}\nu(\mu')\,d\mu',$$
$$\mu\frac{\chi'(x)}{\chi(x)} + \Sigma_t = \frac{\Sigma_s}{2}\frac{1}{\nu(\mu)}\int_{-1}^{1}\nu(\mu')\,d\mu',$$
$$\frac{\chi'(x)}{\chi(x)} = \frac{\Sigma_s}{2}\frac{1}{\mu\nu(\mu)}\int_{-1}^{1}\nu(\mu')\,d\mu' - \frac{\Sigma_t}{\mu} = k. \tag{E.7}$$
$$\tag{E.8}$$

On cherche maintenant à résoudre cette équation pour x. En prenant le membre de gauche, on a :

$$\frac{\chi'(x)}{\chi(x)} = k,$$
$$\chi'(x) = k\chi(x). \tag{E.9}$$

Pour finir,

$$\chi(x) = e^{kx}. \tag{E.10}$$

On résout maintenant l'équation (E.5) pour μ. On a :

$$\frac{\Sigma_s}{2}\frac{1}{\mu\nu(\mu)}\int_{-1}^{1}\nu(\mu')\,d\mu' - \frac{\Sigma_t}{\mu} = k. \tag{E.11}$$

On note :

$$\int_{-1}^{1}\nu(\mu')\,d\mu' = \alpha. \tag{E.12}$$

On a alors

$$\frac{\Sigma_s}{2}\frac{1}{\mu\nu(\mu)}\alpha - \frac{\Sigma_t}{\mu} = k,$$
$$\frac{\Sigma_s}{2}\frac{1}{\mu\nu(\mu)}\alpha = k + \frac{\Sigma_t}{\mu},$$
$$\frac{1}{\nu(\mu)} = \frac{2\mu}{\alpha\Sigma_s}\left(k + \frac{\Sigma_t}{\mu}\right),$$
$$\nu(\mu) = \frac{\alpha\Sigma_s}{2\mu\left(k + \frac{\Sigma_t}{\mu}\right)}. \tag{E.13}$$

Ce qui nous donne donc

$$\nu(\mu) = \frac{\alpha\Sigma_s}{2(\Sigma_t + \mu k)}. \tag{E.14}$$

E.1.3 Discussion sur k

On se propose de discuter la valeur du coefficient k. Tout d'abord, on a :

$$\int_{-1}^{1} \nu\left(\mu'\right) d\mu' = \int_{-1}^{1} \frac{\alpha\Sigma_s}{2\left(\Sigma_t + \mu' k\right)} d\mu'. \tag{E.15}$$

En rappelant la définition de α,

$$\alpha = \frac{\alpha\Sigma_s}{2} \int_{-1}^{1} \frac{1}{\left(\Sigma_t + \mu' k\right)} d\mu', \tag{E.16}$$

on peut alors simplifier cette équation de la manière suivante :

$$1 = \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^{1} \frac{1}{\left(\Sigma_t + \mu' k\right)} d\mu' \tag{E.17}$$

On calcule alors l'intégrale :

$$\begin{aligned} &\frac{\Sigma_s}{2} \left[\frac{1}{k} \ln\left(\Sigma_t + \mu k\right)\right]_{-1}^{1} = 1, \\ &\frac{\Sigma_s}{2k} \ln\left(\frac{\Sigma_t + k}{\Sigma_t - k}\right) = 1 \end{aligned} \tag{E.18}$$

qui nous fournit une condition nécessaire sur k.

E.1.4 Cas multi-groupe

Par définition, en appelant k^g les coefficients k pour le groupe d'énergie g, $\Sigma_s^{g\to g'}$ la section efficace macroscopique de diffusion du groupe g vers le groupe g' et I^g l'importance pour le groupe g, on a :

$$\frac{\sum\limits_{g'\geq g} \Sigma_s^{g\to g'} \frac{I^{g'}}{I^g}}{2k^g} \ln\left(\frac{\Sigma_t^g + k^g}{\Sigma_t^g - k^g}\right) = 1. \tag{E.19}$$

Dans cette équation, on définit :

$$I^g = \frac{1}{\beta+1} \frac{{E_{\text{sup}}^g}^{\beta+1} - {E_{\text{inf}}^g}^{\beta+1}}{{E_{\text{sup}}^g}^{\beta} - {E_{\text{inf}}^g}^{\beta}}, \tag{E.20}$$

$$= \frac{\int_{E_{\text{inf}}^g}^{E_{\text{sup}}^g} E^\beta dE}{\int_{E_{\text{inf}}^g}^{E_{\text{sup}}^g} E^0 dE}, \tag{E.21}$$

où E_{sup} et E_{inf} correspondent respectivement à l'énergie maximale et minimale du groupe g. On remarque également que si β vaut 0, I^g est constant en énergie, si $\beta > 0$ alors I^g augmente avec l'énergie. Dans le cas où β est proche de 0, I^g commence par augmenter avec l'énergie puis par devenir quasiment constante. Les grandes valeurs de β favorisent les hautes énergies.

E.2 Calcul des coefficients de Placzek

Afin de calculer les coefficients k^g, il est nécessaire de mettre en place une technique de recherche de racines de l'équation (E.19) ou d'en connaître une approximation.

E.2.1 État originel du code

Le code TRIPOLI-4® [Tea13] calcule tout d'abord

$$I^g_{\text{loss}} = \sum_{g' \geq g} \Sigma_s^{g \to g'} \frac{I^{g'}}{I^g}. \tag{E.22}$$

Une solution, pour x, de l'équation

$$\frac{1}{2x} \ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right) = 1 \tag{E.23}$$

est trouvée en balayant l'intervalle [0,1]. Dès que $x \leq 1$, on arrête la boucle de recherche. Sinon, la valeur minimisant $|1 - xI_{\text{loss}}|$ est choisie. Cette valeur x est ensuite multipliée par Σ_t^g pour trouver k^g.

On met en évidence que

$$x^g = \frac{k^g}{\Sigma_t^g}. \tag{E.24}$$

En effet,

$$\begin{aligned} I^g_{\text{loss}} \frac{1}{2x^g} \ln\left(\frac{1+x^g}{1-x^g}\right) &= I^g_{\text{loss}} \frac{1}{2\frac{k^g}{\Sigma_t^g}} \ln\left(\frac{1+\frac{k^g}{\Sigma_t^g}}{1-\frac{k^g}{\Sigma_t^g}}\right), \\ &= \frac{\sum\limits_{g' \geq g} \Sigma_s^{g \to g'} \frac{I^{g'}}{I^g}}{2k^g} \ln\left(\frac{\Sigma_t^g + k^g}{\Sigma_t^g - k^g}\right). \end{aligned} \tag{E.25}$$

Dans le cas où la valeur de k est supérieure à $0{,}9 \times \Sigma_t$, un écrêtage est effectué afin d'éviter d'avoir de trop grands facteurs de biaisage. On impose $k = 0{,}9 \times \Sigma_t$.

E.2.2 Approximation de Weinberg et Wigner

Weinberg et Wigner, dans [WW58], proposent une approximation pour k dans l'équation (E.19) :

$$k = \sqrt{3\Sigma_t \Sigma_a}\left(1 - \frac{2\Sigma_a}{5\Sigma_t}\right). \tag{E.26}$$

Cette approximation est issue du développement limité au premier ordre de l'équation (E.18). Elle est raisonnablement précise pour des rapports $\frac{\Sigma_a}{\Sigma_t}$ suffisamment faibles (inférieurs à environ 0,3).

E.2.3 Approximation de Case, De Hoffmann et Placzek

Case, De Hoffmann et Placzek proposent, dans [CDP53], une approximation pour k, dans le cas où le rapport $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \ll 1$:

$$k = 1 - e^{-2/c}\left(1 + \frac{4-c}{c}e^{-2/c} + \dots\right). \tag{E.27}$$

E.2.4 Méthode de Newton

Présentation

Afin d'obtenir une meilleure solution pour les valeurs de k, il est possible de recourir à des méthodes numériques plus performantes. On s'intéresse ici au cas de la méthode de Newton [AS72, Coh09].

On rappelle que la méthode de Newton est une méthode itérative de recherche de racine. Soit f une fonction dérivable dont on cherche une racine x. On note n l'itération.

Formellement, on a :

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \tag{E.28}$$

Il existe plusieurs propriétés assurant la convergence de cette méthode [AS72]. On peut citer, par exemple, que la méthode ne convergera pas si x_n n'appartient pas au domaine de définition de f ou si $f'(x_n)$ est nulle.

Il est nécessaire de définir un critère d'arrêt à partir duquel on statuera sur la convergence de la méthode. Par exemple, on peut décider que la méthode a convergé à l'itération n si

$$||x_n - x_{n-1}|| < \epsilon, \tag{E.29}$$

avec ϵ une erreur fixée par l'utilisateur.

Afin de démarrer la méthode, il est nécessaire d'estimer la racine x_0 de la fonction f. D'une manière générale, plus l'approximation s'avère exacte, plus la méthode convergera vite.

Application au calcul de k

Dans la cas du calcul des coefficients k, on pose :

$$f(x) = I_{\text{loss}}\frac{1}{2x}\ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right) - 1. \tag{E.30}$$

On calcule $f'(x)$:

$$f'(x) = -\frac{I_{\text{loss}}}{2x(1+x)}\left(1+\frac{1+x}{1-x}\right)+\left(\frac{I_{\text{loss}}}{2x^2}\right)\ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right). \tag{E.31}$$

Initialisation

Nous avons mené des expériences numériques sur la valeur d'initialisation de la méthode. L'approximation de Weinberg et Wigner fournit de meilleurs résultats que celle de Case, De Hoffmann et Placzek pour des rapports $\frac{\Sigma_a}{\Sigma_t} < 0{,}6$, en terme de nombre d'itérations. Au-delà, une initialisation de la méthode de Newton par l'approximation de Weinberg et Wigner conduit à une divergence de la méthode. Il est alors nécessaire de recourir à l'approximation de Case, De Hoffmann et Placzek qui permet à la méthode de converger pour des rapports $\frac{\Sigma_a}{\Sigma_t} < 0{,}99$. Pour des milieux encore plus absorbants, il semble raisonnable de poser $k = \Sigma_t$.

Conclusion

On dispose ainsi d'une nouvelle méthode de calcul pour le calcul des coefficients k dans l'équation de Placzek.

E.2.5 Résultats

On présente dans cette section quelques résultats obtenus par la méthode originelle de TRIPOLI-4® et la méthode de Newton quant à l'obtention des coefficients k^g. On présente deux cas : un matériau avec peu d'isotopes et un autre en possédant davantage.

Cas à quatre noyaux

Le matériau considéré, de l'air, est composé de quatre noyaux : ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O et ^{17}O. Trois groupes d'énergie sont considérés. On choisit $\beta = 0$. L'erreur ϵ pour la méthode de Newton est fixée à 10^{-8}. Les résultats sont présentés dans le tableau E.1.

Méthodes	Origine	Wigner et Weinberg	Newton
Groupe 1	$4{,}504085 \times 10^{-5}$	$4{,}507580 \times 10^{-5}$	$4{,}501889 \times 10^{-5}$
Groupe 2	$7{,}359916 \times 10^{-5}$	$7{,}363220 \times 10^{-5}$	$7{,}363182 \times 10^{-5}$
Groupe 3	$7{,}350983 \times 10^{-4}$	$7{,}407597 \times 10^{-4}$	$7{,}355032 \times 10^{-4}$
Temps (μs)	274	/	10

TABLE E.1 – Coefficients k^g et temps de calcul pour un matériau à quatre isotopes.

Le temps de calcul, pour la méthode de Wigner et Weinberg, n'est pas affiché car il ne s'agit, informatiquement, que de l'affectation d'une variable. La méthode de Newton, pour la précision donnée, a convergé, pour les trois groupes, en trois itérations.

On montre que les valeurs obtenues sont raisonnablement similaires. Les écarts relatifs entre la méthode originelle de TRIPOLI-4® et la méthode de Newton sont inférieurs à 0,1 % et les écarts relatifs entre la méthode originelle et l'approximation de Wigner et Weinberg sont inférieure à 1 %.

Le gain de temps entre les deux méthodes numériques est assez important : on peut calculer une baisse de plus de 96 % de temps de calcul.

Cas à trente-six noyaux

On considère maintenant un matériau, du béton, constitué de trente-six noyaux. On se place dans le cas où $\beta = 1$. L'erreur ϵ est toujours fixée à 10^{-8}. Les résultats sont présentés dans le tableau E.2.

Méthodes	Origine	Wigner et Weinberg	Newton
Groupe 1	$8{,}235800 \times 10^{-2}$	$2{,}170548 \times 10^{-2}$	$1{,}018022 \times 10^{-1}$
Groupe 2	$1{,}323580 \times 10^{-1}$	$5{,}562005 \times 10^{-2}$	$1{,}518022 \times 10^{-1}$
Groupe 3	$1{,}823580 \times 10^{-1}$	$1{,}056200 \times 10^{-1}$	$2{,}018022 \times 10^{-1}$
Temps (μs)	142	/	7

TABLE E.2 – Coefficients k^g et temps de calcul pour un matériau à trente-six isotopes.

Une fois encore, la méthode de Newton a convergé en trois itérations.

Les écarts entre les valeurs de la méthode originelle de TRIPOLI-4® et la méthode de Newton vont de -23 % pour le premier groupe à -10 %. Les écarts semblent ici assez élevés. Il est à noter, toutefois, que la méthode de Newton est *a priori* censée donner de meilleurs résultats numériques.

Le gain en terme de temps est ici également constaté. On observe une baisse de 95 % du temps de calcul.

Conclusion

La méthode de Newton permet d'accélérer très efficacement le calcul des coefficients k de biaisage. Précisons toutefois que le temps de calcul gagné demeure très faible par rapport au temps total de la simulation : quelques

centaines de microsecondes par rapport à des heures voire des journées de calcul.

Annexe F

Matrice de vacance

La méthode de la matrice de vacance (*vacation matrix*) est une méthode visant à réduire le bruit statistique présent dans la matrice de fission [FHC05]. Elle a pour but de calculer le fondamental mais pas les valeurs propres du système.

Le principe de la méthode consiste à séparer la matrice de fission K_{ij} en deux matrices fondées sur des probabilités différentes.

On rappelle que

$$\begin{aligned} k_{\text{eff}} S_i &= \sum_{j=1}^{N} s_{ij}, \\ &= \sum_{j=1}^{N} \frac{s_{ij}}{S_j} S_j, \\ &= \sum_{j=1}^{N} k_{ij} S_j, \end{aligned} \tag{F.1}$$

où s_{ij} correspond à la source de neutrons issus de j et provoquant des fissions en i. Finch, Hendricks et Choi proposent de réécrire l'équation précédente sous la forme

$$\begin{aligned} k_{\text{eff}} S_i &= \sum_{j=1}^{N} s_{ij}, \\ &= \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{s_{ij}}{l_{ij}}\right) \left(\frac{l_{ij}}{L_j}\right) \left(\frac{L_j}{S_j}\right) S_j, \\ &= \sum_{j=1}^{N} (A_{ij})^{-1} V_{ij} \cdot \alpha_j S_j. \end{aligned} \tag{F.2}$$

Dans ces relations, L_j correspond au nombre de neutrons nés en j et ayant quitté j ; l_{ij} correspond, quant à lui, au nombre de neutrons issus d'une fission en i d'un neutron né en j et ayant quitté j.

Les auteurs montrent que

$$s^{(n+1)} = K^{(n+1)} s^{(n)} = (V - V_d + A \cdot V_d)^{(n+1)} \cdot \alpha^n \cdot s^{(n)}, \tag{F.3}$$

où A correspond à la matrice diagonale inverse contenant les éléments A_{ii}, V à la matrice d'éléments V_{ij}, α à la matrice diagonale d'éléments α_i et V_d à la diagonale de la matrice V. On a donc, *in fine*,

$$K = (V - V_d + A \cdot V_d) \cdot \alpha. \tag{F.4}$$

Cette méthode est considérée comme davantage indépendante de la phase de convergence des sources et moins bruitée que la matrice de fission. En effet, les probabilités considérées sont moins dépendantes de la distribution de sources que celles de la matrice de fission puisque dans le cas de la méthode de la matrice de vacance, les neutrons considérés quittent leur volume d'origine. Cette méthode peut présenter une alternative à la méthode de la matrice de fission.