



HAL
open science

Etudes de la convergence d'un calcul Monte Carlo de criticité : utilisation d'un calcul déterministe et détection automatisée du transitoire

Alexis Jinaphanh

► **To cite this version:**

Alexis Jinaphanh. Etudes de la convergence d'un calcul Monte Carlo de criticité : utilisation d'un calcul déterministe et détection automatisée du transitoire. Physique Nucléaire Expérimentale [nucl-ex]. Université de Grenoble, 2012. Français. NNT : 2012GRENY063 . tel-00846504

HAL Id: tel-00846504

<https://theses.hal.science/tel-00846504>

Submitted on 19 Jul 2013

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

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

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Physique**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

JINAPHANH ALEXIS

Thèse dirigée par **BILLEBAUD ANNICK**

préparée au sein **Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire**
et de **École doctorale de Physique**

Études de la convergence d'un calcul Monte Carlo de criticité : Utilisation d'un calcul déterministe et détection automatisée du transitoire

Thèse soutenue publiquement le **3 Décembre 2012**,
devant le jury composé de :

Dr. Alain Hébert

École Polytechnique de Montréal, Président

Dr. Kenneth Burn

Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico
sostenibile (ENEA), Rapporteur

Dr. Nicolas Authier

Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Examineur

Dr. Olivier Méplan

Université Joseph Fourier, Examineur

Dr. Annick Billebaud

Centre National de la Recherche Scientifique, Directeur de thèse

Dr. Joachim Miss

Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, Co-Encadrant de thèse



Table des matières

Abréviations	5
Introduction	6
Contexte	7
Codes de calculs	11
Organisation du document	12
1 L'équation de transport neutronique	14
1.1 Équation Directe	14
1.2 Équation Adjointe	18
2 Présentation des méthodes déterministes et Monte Carlo	22
2.1 Les méthodes déterministes	22
2.1.1 Discrétisations	22
2.1.2 La méthode des caractéristiques	25
2.1.3 L'approximation de la diffusion	33
2.2 La méthode Monte Carlo	34
2.2.1 Quelques notions de calcul des probabilités	35
2.2.2 L'algorithme Monte Carlo appliqué au calcul de criticité	37
2.2.3 Les différents estimateurs	42
2.3 Traitement théorique de l'équation de transport par séries de Neumann	44
2.3.1 Solution des équations de Fredholm du premier type .	44
2.3.2 Solution des équations de Fredholm du second type . .	45
2.3.3 Noyaux et densités	47
2.3.4 Mise en œuvre pour les calculs de criticité	51
2.3.5 Modification du noyau de transport et réduction de variance	53
3 Convergence des sources et critères de détection associés	59
3.1 Le ratio de dominance	59
3.2 L'entropie de Shannon	61
3.3 Problématiques de convergence	65
3.3.1 Le placement de la première génération	65

3.3.2	Maintien de la solution numérique sur le mode fondamental	66
3.4	Amélioration de la convergence des sources	71
3.4.1	Échantillonnage Stratifié	71
3.4.2	Super-histoire	73
3.4.3	Méthode de Wielandt	73
3.4.4	Matrice K_{ij}	74
4	Couplage Déterministe - Monte Carlo	76
4.1	Mise en place du couplage	76
4.1.1	Calcul du flux adjoint avec le code DRAGON	77
4.1.2	Repérage dans la géométrie déterministe	78
4.2	Modifications apportées à la simulation Monte Carlo	81
4.2.1	Initialisation du terme source	81
4.2.2	Échantillonnage inter-génération	82
4.2.3	Stratégies de Splitting et Roulette Russe	84
4.2.4	Roulette russe sur le poids	85
4.3	Organisation du jeu de données	86
4.4	Validation du couplage dans le cas d'un adjoint S_n	88
4.4.1	Cas d'une configuration asymétrique	89
4.4.2	Cas d'une configuration symétrique	98
4.4.3	Temps de calcul	111
4.4.4	Test de l'utilisation d'un pré-calcul déterministe direct	112
4.4.5	Résumé et conclusions sur ce cas	114
4.5	Validation du couplage dans le cas d'un adjoint de diffusion	115
4.5.1	Apport de la méthode d'initialisation	117
4.5.2	Impact de l'échantillonnage inter-génération	123
4.5.3	Utilisation de Stratégies de Splitting et de Roulette	125
4.6	Conclusion	127
5	Détection automatisée du transitoire	129
5.1	Introduction aux tests statistiques	129
5.1.1	Un exemple	129
5.1.2	Quelques généralités	132
5.2	Test de Stationnarité	133
5.2.1	Les Hypothèses de test	133
5.2.2	Le pont de Student	134
5.2.3	Distribution de référence	135
5.3	Troncature du transitoire	137
5.4	Applications Numériques	139
5.4.1	Réseau de crayons	139
5.4.2	Réseau de sphères en interactions	140
5.4.3	Solutions de nitrate d'uranyle faiblement couplées	144
5.5	Implémentation dans le code MORET	146

5.6 Conclusion	147
Perspectives et Conclusions	149
Perspectives	149
Conclusions	152
Bibliographie	158
A Jeux de données du cas cœur	164
A.1 Jeu de données DRAGON	164
A.2 Jeu de données DONJON	168
A.3 Jeu de données MORET	170

Abréviations

P_{ij} méthode des probabilités de première collision
 S_n méthode aux ordonnées discrètes
AEN Agence à l'Énergie Nucléaire
APOLLO code déterministe développé au CEA
CADIS Consistent Adjoint Driven Importance Sampling
CEA Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives
DRAGON code déterministe développé à l'EPM
EDF Électricité De France
ENIAC Electronic Numerical Integrator Analyser and Computer
EPM École Polytechnique de Montréal
FORTTRAN FORmula TRANslator
FW-CADIS Forward Weighted CADIS
IRSN Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire
JEF 2.2 Joint Evaluated file - version 2.2
JEFF3.1 Joint Evaluated Fission and Fusion File - version 3.1
LANL Los Alamos National Laboratory
LGPL Licence publique générale limitée
MCNP Monte Carlo N-Particles
MOC Methods Of Characteristics
MORET code Monte Carlo développé à l'IRSN
ORNL Oak Ridge National Laboratory
REP Réacteur à Eau sous Pression
SCALE formulaire développé à ORNL
SEC Service d'Études de Criticité
SHEM Santamarina-Hfaiedh Energy Mesh
SNC Service de Neutronique et des risques de Criticité (anciennement SEC)
pcm Pour Cent Mille (10^{-5})

Introduction

La manipulation des matières fissiles peut permettre de réunir accidentellement les conditions d'amorçage et d'entretien d'une réaction en chaîne. Ce risque est appelé risque de criticité. Ces conditions sont, par exemple, réunies pour une masse de 60 kg d'uranium semblable à celui utilisé par EDF et mélangés à de l'eau [1].

Le risque de criticité est caractérisé par le coefficient de multiplication effectif qui peut être défini comme le rapport entre le nombre de neutrons de deux générations successives. Trois cas se distinguent selon la valeur du facteur de multiplication effectif, k_{eff} :

- $k_{eff} < 1$, le milieu est dit **sous-critique** : condition de sécurité hors réacteur
- $k_{eff} = 1$, le milieu est dit **critique** : condition recherchée dans les réacteurs
- $k_{eff} > 1$, le milieu est dit **sur-critique** : condition d'accidents de criticité

Le risque de criticité est présent à toutes les étapes du cycle où il y a manipulation de matières fissiles, ce risque doit donc être maîtrisé et évalué. Les configurations industrielles étant généralement complexes et multiparamétriques, le k_{eff} est, le plus souvent, estimé par un calcul informatique. Afin d'estimer ce coefficient, l'IRSN développe, en collaboration avec le CEA, EDF et AREVA, le formulaire CRISTAL [2]. Ce formulaire regroupe un ensemble d'outils permettant l'évaluation du risque de criticité. Ce formulaire est constitué de :

- Bibliothèques de données nucléaires (JEF 2.2)
- Codes de calculs déterministe et Monte Carlo (APOLLO2, MORET4, TRIPOLI4)
- Interfaces Homme-Machine (CIGALES, OPOSSUM, PROMETHEE)
- Schémas de calculs recommandés
- Dossiers de qualification

Ce formulaire a pour but de permettre aux exploitants et aux analystes de sûreté d'utiliser dans leurs dossiers d'études une estimation informatique du k_{eff} dans les installations ou procédés.

Le code MORET est un code, développé à l'IRSN, basé sur la méthode de Monte Carlo. Les codes basés sur la méthode de Monte Carlo sont utilisés comme codes de référence pour la simulation des systèmes nucléaires. Ils permettent notamment de s'affranchir de la discrétisation des variables mais leur convergence est relativement lente. Avec le développement de la puissance de calcul des ordinateurs, ces codes ne sont plus seulement utilisés afin de déterminer le coefficient de multiplication effectif mais aussi pour des estimations de grandeurs locales telles que les flux ou les taux de réaction.

L'objet du travail de thèse présenté est de contribuer à faire avancer la sûreté nucléaire en participant à l'amélioration de la qualité des algorithmes implémentés dans les codes de simulation Monte Carlo permettant de caractériser la réactivité neutronique des systèmes.

Contexte

Comme dans tous les domaines des sciences et de l'ingénierie, la simulation numérique joue un rôle de plus en plus important dans les études de neutronique. Cette prépondérance est due principalement au fait que la résolution analytique d'une équation n'est accessible que dans certains cas souvent très simplifiés ainsi qu'à l'accessibilité croissante des ressources informatiques. En effet, ces dernières années ont vu les prix des moyens de calculs informatiques chuter et les performances, de calcul et de stockage, augmenter de façon spectaculaire. Les méthodes numériques nous permettent d'approximer la solution d'une équation par un programme informatique. Cela nous donne accès à une certaine prédiction de la physique, dans la mesure de ce que décrit l'équation, et à une meilleure compréhension du phénomène physique.

Les méthodes numériques, de résolution de l'équation de la neutronique, sont divisées en deux principales voies : les méthodes déterministes et les méthodes stochastiques aussi appelées méthodes de Monte Carlo. Les méthodes déterministes et Monte Carlo sont par nature très différentes. Les méthodes déterministes permettent de résoudre l'équation de transport sur un espace des phases $(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega})$ discrétisé, ou projeté sur une base, et donc d'obtenir le flux sur cet espace. Ainsi une fois le flux obtenu, il est possible de dériver toutes les grandeurs basées sur ce flux comme par exemple des taux de réaction ou une distribution de puissance.

La méthode de Monte Carlo, quant à elle, ne résout pas à proprement parler l'équation de transport [3]. En effet elle résout un problème de transport en simulant des neutrons et en déduit le comportement moyen des neutrons dans le système physique par la loi forte des grands nombres et le théorème central limite [4], mais aucune équation n'a besoin d'être écrite. Cependant, une équation peut être obtenue à partir de ce comportement. Celle-ci s'avère être l'équation de transport sous sa forme intégrale. De plus, comme la méthode de Monte Carlo nous permet de calculer des intégrales, il n'est pas possible de déduire un taux de réaction à partir du flux calculé. Il faut donc estimer ce taux de réaction pour chaque neutron simulé puis en effectuer la moyenne. Pour chaque information désirée, l'utilisateur doit donc définir un encaissement spécifique. Enfin, l'espace des phases ne nécessite pas d'être discrétisé.

La première version connue de la méthode de Monte Carlo est apparue au *XVIII^e* siècle avec l'expérience des aiguilles du comte de Buffon qui permet d'estimer la valeur de π à partir d'aiguilles lancées au hasard sur un parquet [5]. La quantité d'opérations nécessaires pour estimer les grandeurs de la résolution de l'équation de Boltzmann a repoussé l'essor de cette méthode à la mise au point des premiers ordinateurs, notamment l'ENIAC, à partir de la seconde guerre mondiale. L'idée semble être venue à Stanislaw Ulam lorsqu'il était convalescent comme il le racontera plus tard [6] :

The first thoughts and attempts I made to practice [the Monte Carlo Method] were suggested by a question which occurred to me in 1946 as I was convalescing from an illness and playing solitaires. The question was what are the chances that a Canfield solitaire laid out with 52 cards will come out successfully? After spending a lot of time trying to estimate them by pure combinatorial calculations, I wondered whether a more practical method than "abstract thinking" might not be to lay it out say one hundred times and simply observe and count the number of successful plays. This was already possible to envisage with the beginning of the new era of fast computers, and I immediately thought of problems of neutron diffusion and other questions of mathematical physics, and more generally how to change processes described by certain differential equations into an equivalent form interpretable as a succession of random operations. Later [in 1946], I described the idea to John von Neumann, and we began to plan actual calculations.

Pour l'anecdote, cette méthode a été nommée ainsi, par N. Metropolis avec lequel S. Ulam travaillait à LANL, en référence au casino de Monte

Carlo et aux jeux de hasard [7] :

It was at that time that I suggested an obvious name for the statistical method - a suggestion not unrelated to the fact that Stan (Ulam) had an uncle who would borrow money from relatives because he « just had to go to Monte Carlo ». The name seems to have endured.

Le développement des moyens de calculs informatiques a modifié l'utilisation et rendu plus accessible la méthode de Monte Carlo. Dans une simulation neutronique des années 60, seul le k_{eff} (coefficient de multiplication effectif) était recherché sur une géométrie simplifiée alors qu'aujourd'hui la méthode de Monte Carlo peut être utilisée pour modéliser un cœur complet de façon détaillée ou réaliser des calculs d'évolution avec un temps de calcul raisonnable. La méthode de Monte Carlo est aujourd'hui appliquée dans des domaines divers et variés tels que la météorologie, la mécanique quantique, l'astrophysique, la finance, la biologie, ou encore l'évaluation des performances des réseaux de télécommunication.

Dans le cadre de la neutronique, il existe deux grandes familles de calculs Monte Carlo. Les calculs dits à « source fixe », comme les calculs de radioprotection, pour lesquels la source de neutrons est connue et la grandeur recherchée est une réponse liée à un détecteur, par exemple la dose reçue par un détecteur dont les caractéristiques sont connues. La seconde grande famille concerne les calculs dits aux « valeurs propres » (ou de « criticité ») pour lesquels la distribution de neutrons n'est pas connue, et détermine les grandeurs recherchées, par exemple le k_{eff} ou les taux de réaction. Cette dernière famille est utilisée dans les calculs de neutronique des cœurs ou dans les calculs de criticité. Le calcul de criticité se fait de manière itérative à partir d'une initialisation donnée par l'utilisateur, c'est ce type de calculs auxquels nous allons nous intéresser dans ce mémoire.

La modélisation de systèmes de plus en plus grands (vis-à-vis du libre parcours moyen) et complexes peut poser certains problèmes, notamment de sous-échantillonnage ou de convergence. Le premier problème de sous-échantillonnage fut exprimé dans les années 70 par G. E. Whitesides dans son problème du « k_{eff} of the world » [8]. Ces difficultés peuvent mener à de mauvaises estimations du k_{eff} ou des grandeurs locales (flux et taux de réaction).

Afin d'illustrer ces difficultés, prenons l'exemple d'un transport d'assemblages fortement irradiés. Dans ce cas, les zones les plus réactives sont les extrémités des crayons combustibles. Considérons des assemblages chimi-

sés d'absorbant neutronique, assurant ainsi leur découplage et donc la sous-criticité du système.

Imaginons le cas où des assemblages seraient sortis de leur chemisage par le bas. La partie basse concentre alors le maximum de la réactivité, compte tenu du couplage de zones fissiles en vis-à-vis direct sans bore neutrophage séparateur. La figure (1) présente les résultats pour trois placements différents de la première génération de neutrons. Les trois cas correspondent respectivement aux placements initiaux suivants : la zone basse des assemblages, de manière uniforme sur la zone médiane fortement irradiée et sur la zone haute des assemblages.

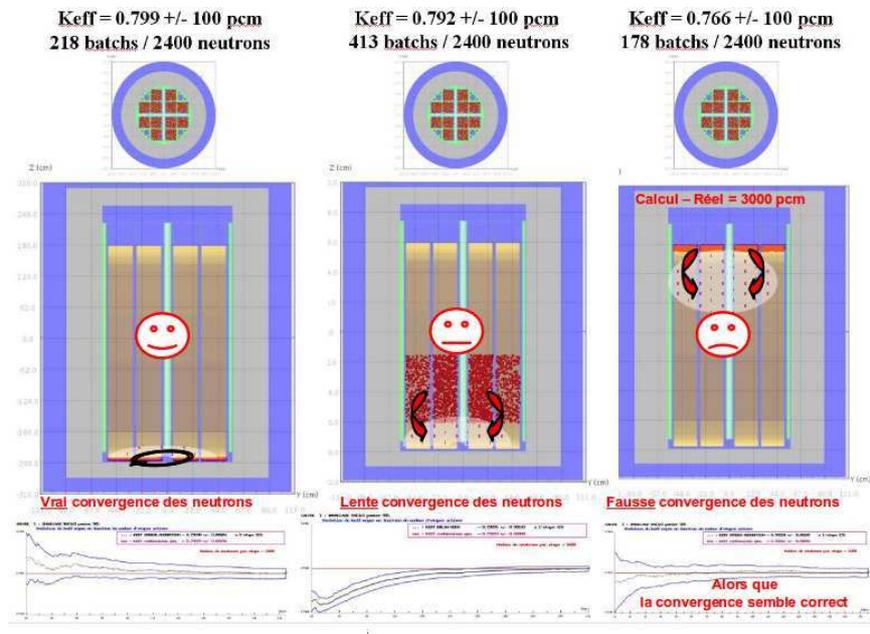


FIGURE 1 – Exemple de fausse convergence

Dans le premier cas, la convergence est bonne et rapide. Le second présente une convergence beaucoup plus lente vers le k_{eff} réel. Le troisième cas met en évidence une fausse convergence vers une valeur du k_{eff} sous-estimée. Ce dernier cas, le plus sévère pour mettre en défaut les algorithmes Monte Carlo, montre une possible « convergence » vers un sous-système moins réactif. Le k_{eff} est sous-estimé d'environ 3000 pcm. En réalité, si une infinité de neutrons est simulée, certains neutrons finiraient par aller visiter la partie la plus réactive (la partie basse) car la probabilité de traverser les crayons dans leur hauteur n'est pas nulle. Il est aussi à noter que, dans ce cas, la convergence est suffisamment lente pour mettre en défaut les tests de stationnarité.

Cet exemple illustre parfaitement les problématiques liées au placement de la première génération des sources de fission.

La référence actuelle sur ces problèmes de convergence est un rapport de l'AEN [9] qui regroupe les études de quatre configurations soulignant les difficultés actuelles des codes Monte Carlo pour cette problématique. Ces configurations servent, pour les équipes de développement de codes Monte Carlo, de benchmarks de référence pour tester les algorithmes d'amélioration, les méthodes de détection du transitoire et les indicateurs de convergence.

Le schéma de résolution de l'équation de Boltzmann pour les calculs de criticité est un schéma itératif, il requiert donc des phases d'initialisation et de convergence. Cette phase de convergence doit être achevée avant de commencer à estimer les grandeurs d'intérêts afin de ne pas obtenir de biais significatif. En effet, contrairement aux méthodes déterministes, la méthode de Monte Carlo nécessite la répétition dans la simulation de générations de neutrons après cette première phase de convergence géométrique. Cette seconde phase sert à accumuler de la statistique. Dans la pratique, il est très difficile de discerner, en cours de calcul, la fin de la phase de convergence.

Afin d'améliorer la convergence et la détection du transitoire, deux approches envisagées dans ce travail de thèse sont présentées dans les chapitres suivants. À savoir :

- Réduire la phase de convergence « géométrique » et améliorer la robustesse du calcul en le modifiant grâce à l'utilisation d'un flux adjoint calculé par un code déterministe
- Détecter a posteriori les générations de neutrons appartenant au transitoire afin de les supprimer de l'estimation finale

La première approche a été étudiée par le couplage du code Monte Carlo MORET avec le code déterministe DRAGON. L'objectif est de déterminer si un pré-calcul déterministe adjoint peut servir à améliorer la convergence du calcul Monte Carlo. La seconde approche, relative à la suppression du transitoire, a conduit à généraliser les travaux de la thèse de Y. Richet [10] à une série quelconque issue d'un Monte Carlo itératif.

Codes de Calculs

Les codes de calculs utilisés dans le couplage sont décrits dans les deux paragraphes qui suivent. Les codes MORET et DRAGON ont servi de « véhicules » aux développements menés.

MORET

Le code MORET est un code Monte Carlo, développé à l'IRSN, qui simule le transport des neutrons dans la matière. Il est dédié aux études de sûreté-criticité et pour les réacteurs. Ce code permet de calculer le k_{eff} d'une configuration complexe, les flux et taux de réaction des différents volumes ainsi que les fuites en dehors du système. La géométrie est modélisée en trois dimensions. La variable énergétique peut être traitée de façon multigroupe ou continue. Dans le cas multigroupe, les sections macroscopiques sont préparées par un code « cellule » tels qu'APOLLO, DRAGON ou via le formulaire SCALE. Ce code est développé en FORTRAN 2003. Les travaux, de la thèse présentée ici, ont été conduits au sein de l'équipe de développement du code MORET. Ils ont nécessité l'implémentation de nouveaux algorithmes et fonctionnalités dans la version multigroupe du code.

DRAGON

DRAGON est un code déterministe, développé à l'École Polytechnique de Montréal, dont le but principal est de produire les grandeurs nécessaires aux codes de calculs de cœur. Pour cela il résout l'équation du transport en utilisant les méthodes MOC, P_{ij} ou S_n . Récemment un module Monte Carlo utilisant les tables de probabilités [11] y a été développé. Une des particularités de ce code de calcul est sa licence LGPL qui le rend accessible librement. Celui-ci est principalement développé en FORTRAN 77. La prise en main du code DRAGON et le développement de fonctionnalités spécifiques dans ce code pour en optimiser le couplage avec MORET ont été rendus possible grâce à un travail au sein de l'équipe de développement du code dans le cadre d'une collaboration IRSN-EPM.

Organisation du document

Nous commencerons par décrire au chapitre 1 les différentes versions directes et adjointes de l'équation du transport.

Après cette brève description, nous nous attellerons à expliciter deux méthodes de résolution de l'équation de transport. Une méthode de résolution déterministe et la méthode de Monte Carlo seront décrites au chapitre 2.

Comme rapidement illustré précédemment, la méthode de Monte Carlo peut présenter des problèmes de convergence. Une participation à leur résolution étant au cœur de ce sujet de thèse, ils seront décrits en détail au chapitre 3. Ce chapitre présentera également les méthodes déjà envisagées pour pallier ces difficultés.

Le chapitre 4 s'attache à décrire le couplage réalisé entre les codes DRAGON et MORET, les modifications du calcul Monte Carlo envisagées et les résultats obtenus sur quelques cas tests.

Enfin le chapitre 5 présente la méthode de détection du transitoire mise au point et son application à plusieurs cas tests. Cette méthode repose sur un test statistique construit à partir de la statistique de Student.

Les perspectives et les conclusions générales feront l'objet du dernier chapitre.

Un exemple de jeu de données est donné en annexe.

Chapitre 1

L'équation de transport neutronique

1.1 Équation Directe

La loi qui régit le comportement des neutrons peut être établie à partir de considérations statistiques. En effet, l'évolution de la population neutronique peut être traduite par une distribution n qui dépend de sept variables :

- \mathbf{r} les coordonnées spatiales (x,y,z)
- $\boldsymbol{\Omega}$ les coordonnées angulaires qui peuvent être représentées par deux angles (θ,ϕ) avec les relations $\boldsymbol{\Omega} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$
- E la variable énergétique
- t la variable temporelle

La densité de neutrons $n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)d\mathbf{r}d\boldsymbol{\Omega}dE$ représente le nombre de neutrons au temps t dans l'hypercube $d\mathbf{r}d\boldsymbol{\Omega}dE$ autour du point de coordonnées $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)$. Bien que la densité soit la grandeur utilisée en statistique pour caractériser une population, la grandeur habituellement employée en neutronique est le flux défini par :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = V_n n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) = \sqrt{\frac{2E}{m}} n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \quad (1.1)$$

$$V_n : \text{vitesse du neutron} \quad (1.2)$$

Notons que c'est une distribution par rapport à $\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}$ et E et une fonction vis-à-vis de t . Par la suite, nous nous placerons dans l'approximation statique, c'est à dire qu'aucune grandeur ne dépend du temps. Il convient aussi de noter que ce flux ne correspond pas à la définition d'un flux usuellement adopté en physique (ce n'est pas une quantité traversant une surface) mais s'exprime aussi en cm^{-2} . Le flux neutronique est défini de cette façon car le

terme $V_n n$ apparait de façon récurrente dans la définition des taux de réaction qui sont les grandeurs fondamentales en neutronique.

Le flux, défini par l'équation (1.1), est régi par l'équation de Boltzmann qui est une équation de bilan sur le volume élémentaire $d\mathbf{r}d\mathbf{\Omega}dE$ autour de $(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ entre la disparition et l'apparition de neutrons. En se plaçant dans le cas statique, ce qui sera le cas tout au long de ce travail, cette équation s'écrit :

$$\underbrace{\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})}_{\text{transport}} + \underbrace{\Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})}_{\text{disparitions}} = \underbrace{Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})}_{\text{apparitions}} \quad (1.3)$$

Les apparitions de neutrons sont dues aux fissions Q_{fiss} , diffusions Q_s et aux sources externes S_{ext} . Ces termes s'écrivent respectivement :

$$Q_{fiss}(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{J_{fiss}} \chi_j(\mathbf{r}, E) \int_0^\infty \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') dE' \quad (1.4)$$

$$Q_s(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\mathbf{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}') \phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') \quad (1.5)$$

Les notations suivantes sont utilisées :

- $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ le flux de neutrons
- $\phi(\mathbf{r}, E)$ le flux scalaire, soit le flux précédent intégré en angle
- Σ_t la section efficace totale
- Σ_s la section efficace de diffusion
- Σ_f la section efficace de fission
- ν le nombre moyen de neutrons produits par fission
- χ_j le spectre en énergie de fission de l'isotope j

Par la suite, et afin d'alléger l'écriture, la notation $\mathbf{E} = (E, \mathbf{\Omega})$ sera régulièrement utilisée. L'interprétation physique des différents termes est :

- $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ le terme de fuite des neutrons
- $\Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ la sortie des neutrons du volume élémentaire par interaction
- $Q_{fiss}(\mathbf{r}, E)$ l'apparition de neutrons par une fission
- $Q_s(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ l'apparition de neutrons suite à des diffusions vers le volume élémentaire
- S_{ext} les sources externes de neutrons

Dans le cas des calculs de criticité, le terme des sources extérieures est pris nul, l'équilibre n'est alors pas assuré et l'équation n'admet généralement pas de solution. Pour pallier ce problème, il est usuel d'introduire un paramètre

pour forcer cet équilibre. Le terme d'apparition par fission est alors divisé par une constante (k_{eff}) qui est à déterminer. Cette constante représente la « distance » à l'équilibre, c'est à dire la distance à la criticité. En effet, l'équilibre implique l'apparition d'un neutron pour un neutron disparu, donc l'entretien de la réaction en chaîne. Dans ce cas, l'équation de transport devient une équation aux valeurs propres et s'écrit :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = & \quad (1.6) \\ \int_{4\pi} d^2\boldsymbol{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \boldsymbol{\Omega} \leftarrow \boldsymbol{\Omega}')\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') \\ + \frac{1}{k_{eff}} \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{J_{fiss}} \chi_j(\mathbf{r}, E) \int_0^\infty \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E')\phi(\mathbf{r}, E')dE' \end{aligned}$$

Une notation souvent retenue pour écrire l'équation précédente de manière plus compacte est celle sous forme d'opérateurs :

$$(\mathbb{L} + \mathbb{T} - \mathbb{S})\phi = \frac{1}{k_{eff}}\mathbb{M}\phi \quad (1.7)$$

avec :

- \mathbb{L} : opérateur de fuites
- \mathbb{T} : opérateur de collision
- \mathbb{S} : opérateur de diffusion
- \mathbb{M} : opérateur de multiplication par fission

Le traitement numérique de cette équation sera détaillé dans le chapitre 2. Il s'effectue selon deux grandes philosophies : déterministe et stochastique. La voie déterministe présente des avantages de rapidité et d'exactitude des résultats (pas d'incertitudes statistiques) mais requiert une discrétisation spatiale, angulaire et énergétique du problème. La voie stochastique, aussi appelée approche Monte Carlo, permet de modéliser exactement (sans discrétisations) le problème, mais demande des temps de calcul plus longs et donne des résultats avec une incertitude statistique.

Le choix de l'une ou l'autre des voies se fait, en général, selon le nombre de dimensions du système, c'est à dire le nombre de variables indépendantes, et l'objectif recherché. Si l'objectif est de réaliser un calcul de référence, une simulation uniquement Monte Carlo sera privilégiée. A contrario si l'utilisateur désire faire des calculs liés à la production, les méthodes déterministes seront privilégiées avec la mise en place d'un schéma de calcul (entièrement déterministe ou combiné à un Monte Carlo). De façon grossière, les vitesses de convergence des deux méthodes numériques peuvent s'écrire, $\mathcal{O}(\frac{1}{N^{2/d}})$

et $\mathcal{O}(\frac{1}{N^{1/2}})$ pour, respectivement, les méthodes déterministes et la méthode Monte Carlo. Ici N est une caractéristique du système (nombre de volumes discrétisés ou nombre de neutrons simulés) et d est le nombre de dimensions du problème. Il est intéressant de remarquer que la vitesse de convergence de la méthode Monte Carlo est indépendante du nombre de dimensions. Ainsi, il devient avantageux de recourir à ces méthodes pour des équations (ou calculs d'intégrales) ayant plus de quatre dimensions, ce qui convient à l'équation de transport stationnaire qui est de dimension six (\mathbf{r}, \mathbf{E}) . Cependant, s'il existe des invariances qui réduisent le nombre de dimensions, les méthodes déterministes sont souvent préférées, notamment dans le cadre de dimensionnements de systèmes où le nombre de calculs peut être conséquent.

La formulation (1.6) de l'équation de transport est dite **intégro différentielle**. Cette formulation permet un traitement de l'équation par les méthodes aux harmoniques sphériques ou aux ordonnées discrètes [12] mais ne convient pas à un traitement par la méthode de Monte Carlo, la méthode des probabilités de collision (P_{ij}) ou la méthode des caractéristiques (MOC). En effet, ces méthodes nécessitent une écriture sous forme **intégrale** [12, 13, 14]. Explicitons cette forme intégrale : En partant de l'équation (1.6), un changement de variable va être effectué. Soit $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\mathbf{\Omega}$, où \mathbf{r} est un point fixe, s devenant alors la variable.

$$\begin{aligned}\frac{d}{ds} &= \frac{dx'}{ds} \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{dy'}{ds} \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{dz'}{ds} \frac{\partial}{\partial z'} \\ &= -\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{i} dx - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{j} dy - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{k} dz \\ \frac{d}{ds} &= -\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \\ \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}', \mathbf{E}) &= -\frac{d\phi}{ds}(\mathbf{r}', \mathbf{E})\end{aligned}\tag{1.8}$$

En introduisant l'exponentielle décroissante du chemin optique $\tau(s, \mathbf{E})$, l'équation devient :

$$\begin{aligned}\tau(s, \mathbf{E}) &= \int_0^s \Sigma_t(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}, E) ds' \tag{1.9} \\ -\frac{d}{ds}[\phi(\mathbf{r}', \mathbf{E}) \exp(-\tau(s, \mathbf{E}))] &= \exp(-\tau(s, \mathbf{E}))[-\frac{d\phi}{ds}(\mathbf{r}', \mathbf{E}) + \Sigma_t(\mathbf{r}', \mathbf{E})\phi(\mathbf{r}', \mathbf{E})] \\ &= \exp(-\tau(s, \mathbf{E}))[\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}', \mathbf{E}) + \Sigma_t(\mathbf{r}', \mathbf{E})\phi(\mathbf{r}', \mathbf{E})] \\ &= \exp(-\tau(s, \mathbf{E}))[\mathcal{Q}_{fiss}(\mathbf{r}', E) + \mathcal{Q}_s(\mathbf{r}', \mathbf{E})]\end{aligned}\tag{1.10}$$

En supposant que le premier terme s'annule à l'infini, ce qui est une hypothèse raisonnable, l'intégration entre $s = 0$ et $s = \infty$ nous donne la formula-

tion intégrale :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = & \int_0^\infty \exp(-\tau(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{E})) \\ & \times [\mathcal{Q}_{fiss}(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, E) + \mathcal{Q}_s(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{E})] ds \end{aligned} \quad (1.11)$$

Il est important de noter que les quantités \mathcal{Q}_{fiss} et \mathcal{Q}_s dépendent du flux et que l'équation obtenue est bien une équation aux valeurs propres mais avec cette fois un opérateur uniquement intégral.

1.2 Équation Adjointe

A l'équation de transport peut être associée une équation dite « adjointe » caractéristique de l'importance neutronique. La solution de cette équation est la grandeur qui sera déterminée par le pré calcul déterministe afin d'accélérer la convergence des sources de fission du calcul Monte Carlo. Pour définir cette équation, notons $\langle f, g \rangle$ le produit scalaire défini par :

$$\langle f, g \rangle = \int_V \int_{4\pi} \int_E f(r, \Omega, E) g(r, \Omega, E) d^3r d^2\Omega dE \quad (1.12)$$

Ici g désigne une distribution et f une fonction à valeurs réelles. En notant A un opérateur, A^* est l'opérateur adjoint associé si pour tout (f, g) , il vérifie la relation :

$$\langle f, Ag \rangle = \langle A^*f, g \rangle \quad (1.13)$$

Dans la pratique, avec le produit scalaire défini précédemment, l'opérateur adjoint peut être explicité en partant de l'opérateur direct en effectuant des intégrations par parties¹ si l'opérateur est différentiel ; ou en effectuant un échange d'intégrale si l'opérateur est intégral¹. Exprimons pour quelques cas simples, fonctions d'une seule variable, la détermination de l'opérateur adjoint. Commençons par l'opérateur de dérivation :

$$\begin{aligned} \langle f, \frac{\partial g}{\partial x} \rangle &= \int f \frac{\partial g}{\partial x} dx \\ &= [fg]_{-\infty}^{+\infty} - \int g \frac{\partial f}{\partial x} dx \\ \langle f, \frac{\partial g}{\partial x} \rangle &= \langle -\frac{\partial f}{\partial x}, g \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

L'opérateur de multiplication scalaire donne en notant R un réel :

$$\langle f, Rg \rangle = \int f Rg dx = \int Rfg dx = \langle Rf, g \rangle \quad (1.15)$$

1. les conditions de régularité nécessaires sont supposées vérifiées

Un opérateur intégral H devient :

$$Hg = \int h(x, x')g(x')dx' \quad (1.16)$$

$$\langle f, Hg \rangle = \int_x \left[\int_{x'} f(x)h(x, x')g(x')dx' \right] dx \quad (1.17)$$

$$= \int_{x'} \left[\int_x h(x, x')f(x)g(x')dx \right] dx' \quad (1.18)$$

$$= \langle H^*f, g \rangle \quad (1.19)$$

L'extension de cette façon de déterminer les opérateurs adjoints à des opérateurs s'appliquant à des fonctions ou distributions de plusieurs variables se fait assez facilement. Ainsi, en explicitant les différents opérateurs adjoints de l'équation de Boltzmann, l'équation adjointe s'écrit :

$$-\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi^*(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \mathcal{Q}^* \quad (1.20)$$

avec comme source adjointe :

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}^* &= \iint \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mathbf{\Omega}' \leftarrow \mathbf{\Omega})\phi^*(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}')dE'd\mathbf{\Omega}' \\ &+ \frac{1}{k_{eff}} \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^J \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E) \int \chi_j(E')\phi^*(\mathbf{r}, E')dE' \end{aligned} \quad (1.21)$$

Remarquons que la plus grande valeur propre de l'opérateur adjoint est la même que celle de l'opérateur direct (k_{eff}).

Nous appellerons flux adjoint la solution de l'équation adjointe. Il est important de remarquer que le flux adjoint est une fonction de l'énergie et non une distribution. En effet, étant donné que $\chi_j(E')$ est une distribution, le terme $\chi_j(E')\phi^*(\mathbf{r}, E')$ impose que le flux adjoint soit une fonction.

En mettant en regard les équations (1.6) et (1.20), nous remarquons que le problème adjoint peut être écrit sous la forme d'un problème de transport de particules. Ce problème est similaire au transport des neutrons avec des noyaux différents, plus précisément des noyaux « inversés ». L'image d'une particule effectuant le trajet inverse du neutron est ainsi souvent utilisée. En effet, en explicitant les noyaux et les sources de l'équation adjointe, il peut être remarqué que ces « particules » commencent leurs vies là où les neutrons meurent et les lois de parcours et de collision sont « inversées ». Dans le terme de diffusion, contrairement à l'équation directe, l'énergie d'intégration est celle d'arrivée. Ce qui signifie que lors d'une simulation, la diffusion va se faire dans le sens inverse par rapport au cas direct. La particule va donc remonter en énergie. On dit souvent qu'un calcul adjoint consiste à « remonter le temps » le long de la vie des neutrons. Selon plusieurs ouvrages, le flux

adjoint quantifie, du point de vue physique, l'importance d'un neutron pour la réaction en chaîne [12, 13, 15, 16, 17].

Une des interprétations physiques les plus connues est celle de H. Hurwitz [18] qui relie le flux adjoint à une fonction appelée « Iterated Fission Probability ». Cette fonction est définie de la manière suivante :

*A definition now follows for a function, $F(r,u)$, called the **iterated fission probability**, according to the following occurrences visualized for a reactor which is just critical :*

Let a neutron be introduced in the assembly, which is assumed to be just critical, at point r and with lethargy u . This neutron will, on the average, produce a certain number of fissions with a certain spatial distribution. Neutrons from these fissions will produce further fissions, etc., each succeeding generation having a distribution closer to the actual power distribution in the operating assembly. Furthermore, since the assembly is critical, the number of fissions produced in the n th generation will approach a limit as n approaches infinity, and this limit is defined as $F(r,u)$.

*$F(r,u)$ is similar to the probability $P(r,u)$ that a neutron introduced at point r with lethargy u will produce a fission. ... The relation between F and P can be crudely expressed by saying that **F is the infinite order iteration of P** .*

$F(r,u)$ is proportional to the self-consistent adjoint function, $\phi^*(r,u)$

$P(r,u)$ is proportional to the constant source adjoint function.

Cette interprétation a été récemment utilisée pour le calcul des paramètres cinétiques et des variations de réactivité [19, 20, 21]. Une seconde interprétation régulièrement utilisée est celle de G.R. Keepin [22].

The fundamental-mode adjoint flux $\phi^(r,u)$ has the physical significance of being proportional to the asymptotic power level resulting from the introduction of a neutron of velocity v , at point r in a critical system at zero power. It is thus a measure of the "importance" or "worth" of a neutron as a function of energy and position of the neutron.*

Comme pour l'adjoint de criticité, il est possible de définir un adjoint à source fixe en ajoutant une source externe adjointe. En général, les systèmes à source fixe ne sont pas multiplicatifs. Cependant, si le système est

suffisamment sous critique, il est possible de prendre en compte les réactions multiplicatives. Dans ce cadre, D.C. Irving démontre [14] la relation entre le flux adjoint et la « valeur » d'une particule (au sens de contribution à un score dans le cas de calculs à source fixe) sortant d'une collision reliant ainsi le flux adjoint à une « importance » neutronique. Dans ce cas, le terme source de l'équation adjointe est le détecteur du cas direct associé. Le flux adjoint représente alors l'importance du neutron vis-à-vis de sa contribution à la réponse du détecteur. C'est cet adjoint qui est utilisé pour définir les paramètres de biaisage dans le couplage TORT/MCNP [23] en utilisant la méthode CADIS pour le biaisage des calcul à source fixe.

De façon plus générale, il est possible de définir un adjoint généralisé [12] qui s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{A}\Gamma^* - \mu\mathbb{M}\Gamma^* = S^* \quad (1.22)$$

$$\mu \text{ vérifie } \mathbb{A}\phi^* - \mu\mathbb{M}\phi^* = 0 \quad (1.23)$$

$$\mathbb{A} = \mathbb{L} + \mathbb{T} - \mathbb{S}$$

L'équation directe associée est :

$$\mathbb{A}\Gamma - \mu\mathbb{M}\Gamma = S \quad (1.24)$$

$$\mu \text{ vérifie } \mathbb{A}\phi - \mu\mathbb{M}\phi = 0 \quad (1.25)$$

Il est facile de démontrer que le flux adjoint doit être orthogonal à la source directe et inversement :

$$\langle \phi, S^* \rangle = 0 \quad (1.26)$$

$$\langle \phi^*, S \rangle = 0 \quad (1.27)$$

Ce type d'adjoint et de flux direct sont surtout utilisés dans la théorie des perturbations généralisées [12].

Après cette brève description des principales versions de l'équation de transport, nous nous intéresserons aux méthodes de résolution numériques de l'équation de transport en commençant par la description d'une méthode déterministe puis la méthode de Monte Carlo dont notre principal objectif est d'améliorer la convergence.

Chapitre 2

Présentation des méthodes déterministes et Monte Carlo

2.1 Les méthodes déterministes

Les méthodes déterministes, telles que les méthodes des caractéristiques ou des probabilités de collision, permettent de résoudre explicitement l'équation de transport. Ces méthodes requièrent une discrétisation de toutes les variables de l'espace des phases (espace, angle, énergie). Commençons par exprimer la discrétisation des variables avant de décrire la résolution en elle-même.

2.1.1 Discrétisations

Énergétique

Le formalisme multigroupe consiste à discrétiser la variable énergétique en G intervalles (usuellement entre 100 et 400) appelés groupes d'énergie. Notons $E_1 > E_2 > \dots > E_{G+1}$ les bornes des groupes d'énergies. Dans chacun de ces groupes, le flux de neutrons s'exprime :

$$\phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE \quad (2.1)$$

Le principe de conservation des taux de réaction conduit à exprimer les sections efficaces multigroupe de la façon suivante :

$$\sigma_g(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE}{\phi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})} \quad (2.2)$$

Les sections de diffusion sont :

$$\sigma_s^{g \rightarrow g'}(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_{g'}-1}^{E_{g'}-1} dE' \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_s(E \rightarrow E') \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE}{\phi_{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})} \quad (2.3)$$

Cette définition n'est pas directement utilisable en pratique. En effet, il est nécessaire de connaître le flux pour déterminer les sections efficaces qui sont elles-mêmes nécessaires pour déterminer le flux. L'approximation multigroupe réside alors dans le fait d'utiliser un flux analytique qui « ressemble » au flux réel pour le calcul des sections efficaces multigroupe. Ce flux est généralement composé d'un spectre de fission pour le domaine rapide, d'un spectre en $\frac{1}{E}$ pour la partie épithermique et d'un spectre de Maxwell pour la partie thermique.

Le calcul de ces sections efficaces multigroupe nécessite aussi une étape dite d'autoprotection qui consiste à prendre en compte les absorptions dans le domaine des résonances ainsi que le comportement du flux au niveau de ces résonances. Nous renvoyons le lecteur à [12] pour plus de précisions.

Angulaire

Pour la discrétisation angulaire, deux approches sont possibles : la décomposition en série (sur les harmoniques sphériques) ou le choix judicieux de points de discrétisations (ordonnées discrètes). C'est cette dernière que nous allons décrire car c'est la plus répandue. L'idée est de choisir N points de base pour discrétiser la variable angulaire, de résoudre l'équation de transport le long de ces directions, puis de reconstruire la solution. Si la dépendance n'est que vis-à-vis de la variable θ , la discrétisation de $\mu = \cos\theta$ se fait selon une quadrature de Gauss-Legendre [12] :

$$\int_{-1}^1 f(\mu)d\mu = \sum_{n=1}^N \mathcal{W}_n f(\mu_n) \quad (2.4)$$

avec \mathcal{W}_n et μ_n respectivement les poids et les points de base de la quadrature classique de Gauss-Legendre. Le nombre de points de base est choisi pair pour éviter les difficultés numériques liées au traitement du cas $\mu = 0$.

Dans le cas général, les points de base de la quadrature sont choisis sur la sphère unité de façon à respecter une invariance par rotation de $\frac{\pi}{2}$. Cette invariance permet de se limiter à la description de l'octant positif de la sphère unité. L'octant positif est l'ensemble des points de la sphère unité dont les trois coordonnées sont positives, ce qui représente un huitième de la sphère. La figure (2.1) schématise une quadrature particulière sur un octant.

Les points de base appartiennent à la sphère unité. Leur coordonnées (μ, ξ, η) respectent donc la relation suivante et laissent ainsi 2 degrés de libertés.

$$\mu^2 + \xi^2 + \eta^2 = 1 \quad (2.5)$$

Le choix d'invariance par rotation impose le même découpage selon les trois axes. Le découpage d'un axe se fait selon le modèle suivant :

$$\mu_n^2 = \mu_1^2 + (n-1) \frac{2(1-3\mu_1^2)}{N-2}, n \in [1; \frac{N}{2}] \quad (2.6)$$

Le choix de μ_1 est indépendant de la quadrature choisie. Le découpage total s'écrit alors (μ_i, μ_j, μ_k) avec $i, j, k \in [1; \frac{N}{2}]$. Les points de bases sont alors les points dont le découpage total respecte la condition de normalisation (2.5). Les poids associés à ces points de base sont déterminés par le rapport entre l'angle solide associé et 4π . Le nombre d'ordonnées discrètes (N) est $N(N+2)$, soit $N(N+2)/8$ par octant.

La figure (2.1) illustre le découpage S_n , pour $n = 6$, de l'octant positif de la sphère unité [12].

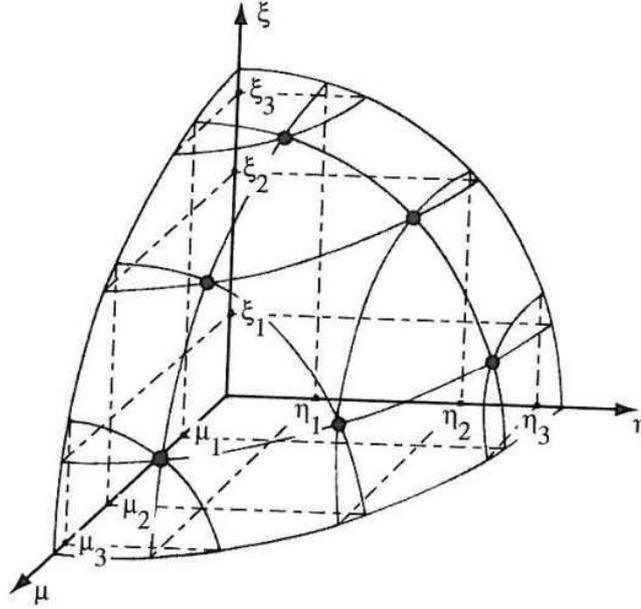


FIGURE 2.1 – Quadrature S6 d'un octant de la sphère unité

Spatiale

La discrétisation spatiale consiste à subdiviser les volumes de manière suffisamment fine pour le schéma de résolution associé. En effet, dans chaque sous-volume, les grandeurs seront considérées constantes, c'est-à-dire indépendantes de la variable d'espace. La suite de ce chapitre décrit une méthode déterministe particulière : la méthode des caractéristiques (dite méthode « MOC »).

2.1.2 La méthode des caractéristiques

Le choix de décrire cette méthode a été retenu car elle permet de traiter de nombreuses géométries et peut s'étendre à des géométries à trois dimensions. De plus, des tentatives sont en cours pour construire les matrices MOC à partir d'une géométrie Monte Carlo [24], ce qui pourrait être un niveau d'intégration supplémentaire pour un couplage. Cependant, pour les exemples traités dans cette thèse, la méthode de résolution déterministe sera choisie en fonction des caractéristiques du problème.

La résolution des méthodes déterministes appliquées au calcul de criticité se découpent généralement en trois niveaux d'itérations :

- Calcul du terme de fission
- Détermination des diffusions inter-groupes
- Résolution transport

La méthode des caractéristiques [12, 25] se situe à ce dernier niveau d'itérations. Le flux est déterminé en considérant les contributions des autres groupes ainsi que les contributions des fissions fixes. Une fois une solution calculée, les contributions des autres groupes via la diffusion sont mises à jour. Une nouvelle solution est obtenue, puis l'itération sur les sources de fission commence.

Définition d'une caractéristique

Une caractéristique est une droite définie par une direction $\boldsymbol{\Omega}$ et un point \mathbf{p} d'un plan $(\pi_{\boldsymbol{\Omega}})$ orthogonal à cette direction. Par la suite, nous appellerons segment l'intersection entre une caractéristique et un volume. Une trajectoire est un ensemble de caractéristiques.

L'équation de transport le long d'une caractéristique

Le long d'une caractéristique, les opérateurs différentiels peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} &= \frac{dx}{ds} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{dy}{ds} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{dz}{ds} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{dt}{ds} \frac{\partial}{\partial t} \\ \text{Or } ds\boldsymbol{\Omega} &= d\mathbf{r} = dx\mathbf{i} + dy\mathbf{j} + dz\mathbf{k} \\ \text{D'où } \frac{d}{ds} &= \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla + \frac{1}{V_n} \frac{\partial}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.7)$$

L'expression de l'équation de transport 1.6 le long d'une caractéristique s'écrit alors :

$$\begin{aligned} -\frac{d}{ds} \phi(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t - s/V_n) + \Sigma(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n) \phi(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t - s/V_n) \\ = \mathcal{Q}(\mathbf{r} - s\boldsymbol{\Omega}, V_n, \boldsymbol{\Omega}, t - s/V_n) \end{aligned} \quad (2.8)$$

L'équation à l'état d'équilibre et à énergie constante s'écrit :

$$\frac{d}{ds}\phi(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega})\phi(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) = \mathcal{Q}(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.9)$$

L'intégration

Dans le cadre de la résolution qui nous intéresse, les variables énergie et temps sont considérées constantes. L'idée de la méthode des caractéristiques est de transformer l'intégration spatiale en une intégration le long de trajectoires avec le changement de variables suivant :

$$\int_{V_i} d^3r \int_{4\pi} f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d^2\Omega = \int_{\Gamma} d^4T \int_{-\infty}^{+\infty} ds \chi_{V_i}(\mathbf{T}, s) f(\mathbf{p} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.10)$$

La figure (2.2), reprise de [25], illustre le changement de variable précédent :

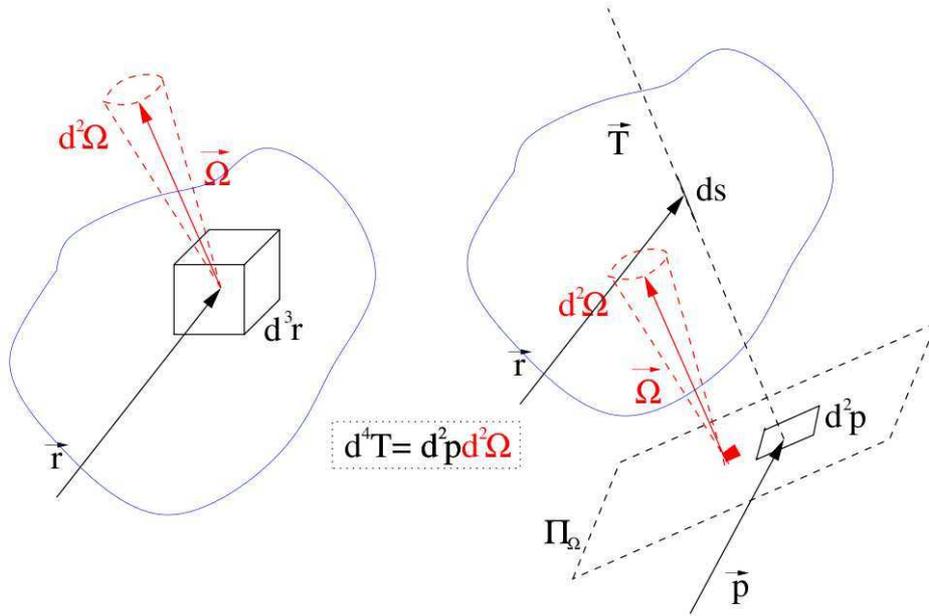


FIGURE 2.2 – Schéma du changement de variable opéré dans la méthode MOC

Commençons par exprimer le flux moyen dans un volume $i \in [1, I]$ où I est le nombre total de volumes distincts :

$$\begin{aligned} V_i \phi_i &= \int_{V_i} d^3r \int_{4\pi} \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \\ &= \int_{\Gamma} d^4T \int_{-\infty}^{+\infty} ds \chi_{V_i}(\mathbf{T}, s) \phi(\mathbf{p} + s\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Les notations utilisées sont :

- $\Upsilon = \{\mathbf{T}\}$ l'ensemble des caractéristiques
- s la distance au plan π_Ω
- χ_{V_i} la fonction caractéristique du volume V_i

Définissons les grandeurs nécessaires à la méthode des caractéristiques. Considérons la caractéristique \mathbf{T} , notons ℓ_k et N_k respectivement les longueurs des segments et les indices des volumes traversés. L'indice k représente l'indice local le long de la caractéristique. Les intersections de la caractéristique avec les frontières des régions et les flux associés sont notés :

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k + \ell_k \boldsymbol{\Omega}, \quad k \in [1, K] \quad (2.12)$$

$$\phi_k(\mathbf{T}) = \phi(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\Omega}), \quad k \in [1, K] \quad (2.13)$$

Le flux moyen le long d'une caractéristique s'écrit :

$$\bar{\phi}_k(\mathbf{T}) = \frac{1}{\ell_k(\mathbf{T})} \int_0^{\ell_k(\mathbf{T})} ds \phi(\mathbf{r}_k + s \boldsymbol{\Omega}) \quad (2.14)$$

On peut alors exprimer le flux moyen dans une région en fonction des flux moyens sur les segments :

$$V_i \phi_i = \int_\Upsilon d^4 T \sum_k \delta_{iN_k} \ell_k(T) \bar{\phi}_k(T) \quad (2.15)$$

La discrétisation de l'intégrale sur Υ se fait de la même façon que la discrétisation pour les méthodes Sn :

$$\int_\Upsilon d^4 T f(T) \simeq 4\pi \sum_{m=1}^M \omega_m f(T_m) \quad (2.16)$$

avec

- M le nombre total de caractéristiques
- T_m une caractéristique et ω_m le poids associé.

L'estimation numérique du flux s'écrit donc :

$$\frac{\phi_i}{4\pi} \sum_{m=1}^M \omega_m \sum_k \delta_{iN_k} \ell_k(T) = \sum_{m=1}^M \omega_m \sum_k \delta_{iN_k} \ell_k(T) \bar{\phi}_k(T) \quad (2.17)$$

Ce qui nous permet d'exprimer le flux moyen dans un volume en fonction de la longueur des segments, des choix de discrétisation et du flux moyen le long de chaque segment. Afin d'exprimer cette grandeur, l'équation (2.9) est résolue le long de chaque caractéristique. Pour cela une hypothèse est requise sur l'expression des sources sur les segments. Un choix possible est celui du schéma *Step Characteristic* qui s'exprime de la manière suivante :

$$\forall s \in [0, \ell_k] \mathcal{Q}(\mathbf{r}_k + s \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}) = \mathcal{Q}_{N_k}(\boldsymbol{\Omega}) \quad (2.18)$$

Cela signifie que les sources sont constantes le long de la caractéristique dans chaque région traversée par la caractéristique. Cette approximation nous permet d'intégrer analytiquement l'équation (2.9). Cette intégration nous permet d'obtenir les deux relations suivantes :

$$\phi_{k+1}(T) = \mathcal{A}_k(T)\phi_k(T) + \mathcal{B}_k(T)\mathcal{Q}_{N_k}(\boldsymbol{\Omega}) \quad (2.19)$$

$$\bar{\phi}_k(T) = \frac{1}{\ell_k(T)}(\mathcal{B}_k(T)\phi_k(T) + \mathcal{C}_k(T)\mathcal{Q}_{N_k}(\boldsymbol{\Omega})) \quad (2.20)$$

Pour $\Sigma_{N_k} \neq 0$ les coefficients s'écrivent :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_k(T) &= e^{-\tau_k(T)} \\ \mathcal{B}_k(T) &= \frac{1}{\Sigma_{N_k}}(1 - e^{-\tau_k(T)}) \\ \mathcal{C}_k(T) &= \frac{\ell_k(T)}{\Sigma_{N_k}}\left(1 - \frac{1 - e^{-\tau_k(T)}}{\tau_k(T)}\right) \\ \tau_k(T) &= \ell_k(T)\Sigma_{N_k} \end{aligned}$$

Dans le cas où $\Sigma_{N_k} = 0$ on a :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_k(T) &= 1 \\ \mathcal{B}_k(T) &= \ell_k(T) \\ \mathcal{C}_k(T) &= \frac{\ell_k(T)^2}{2} \end{aligned}$$

Le terme source est alors séparé en deux termes, un terme regroupant la diffusion inter-groupes, les fissions et les sources fixes si elles existent, l'autre terme décrivant la diffusion intra-groupe. Cette séparation s'écrit :

$$\mathcal{Q}_{N_k}(\boldsymbol{\Omega}) = \mathcal{Q}_{N_k}^{\diamond} + \Sigma_{\omega, N_k}\phi_i$$

Appliquons cette théorie à un exemple avec une géométrie simple.

Cas de deux volumes

Nous allons présenter ici la méthode des caractéristiques appliquée à une géométrie ne contenant que deux volumes (géométrie dite de type crayon (cf figure (2.3) et (2.4))), en ne considérant qu'une seule caractéristique afin d'explicitier la construction des matrices.

On notera avec un indice en chiffres romains l'indice de volume global et en chiffres arabes les indices de volume le long de la caractéristique. La fonction $N(i)$ notée N_i nous fournira le passage des indices locaux aux globaux. Par exemple, en reprenant la figure (2.4), les sections efficaces dans

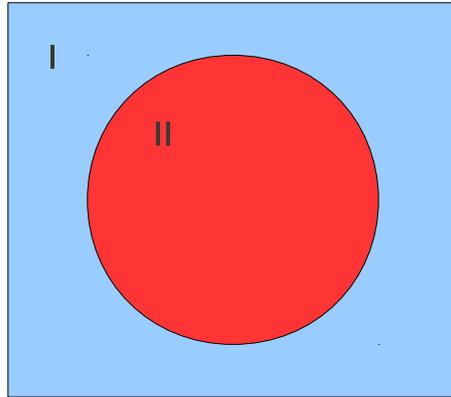


FIGURE 2.3 – Exemple d’une configuration pour la méthode des caractéristiques

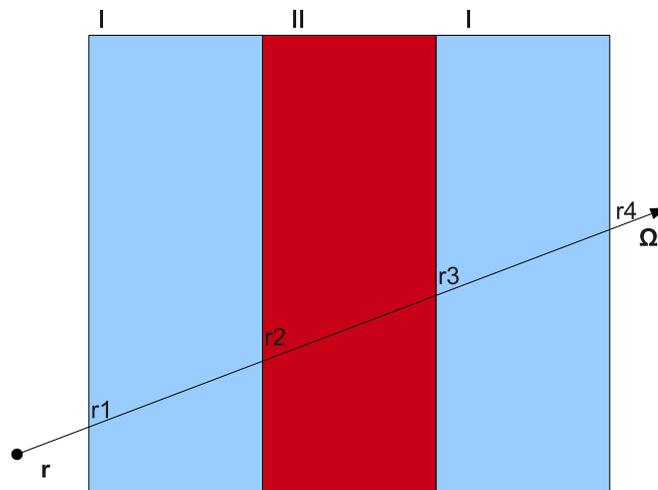


FIGURE 2.4 – Exemple d’une configuration où le volume II est inclus dans le volume I pour la méthode des caractéristiques

les volumes I et II sont notées Σ_I et Σ_{II} et seront notées le long de la caractéristique $\Sigma_{1,2,3}$. Ces distinctions sont faites afin de considérer les volumes traversés deux fois de manière distincte par la caractéristique. La caractéristique T est définie par deux éléments : \mathbf{r} et $\mathbf{\Omega}$. Les grandeurs $r_i, i \in \{1, 2, 3, 4\}$ représentent les abscisses des frontières entre les volumes sur la caractéristique T . Les notations suivantes seront utilisées :

- T : la caractéristique
- ϕ_α avec $\alpha \in \{I, II\}$: les flux moyens dans les volumes I et II
- $\phi_i = \phi(r_i, \mathbf{\Omega})$ avec $i \in \{1, 2, 3, 4\}$: les flux aux intersections entre les frontières et la caractéristique
- $\bar{\phi}_i$ avec $i \in \{1, 2, 3\}$: les flux moyens le long de la caractéristique

Les flux moyens le long de la caractéristique sont décrits de la manière suivante :

$$\bar{\phi}_i = \frac{1}{\ell_i(T)} \int_0^{\ell_i(T)} \phi(r_i + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) ds$$

où $\ell_i(T)$ est la longueur d'intersection entre un volume et la caractéristique : par exemple $\ell_1(T)$ est tel que $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \ell_1(T)\mathbf{\Omega}$.

Par la suite nous ne mentionnerons plus la dépendance à T car le problème est ici explicité avec une seule caractéristique. Le long d'une caractéristique, l'équation de transport (2.9) s'écrit :

$$\frac{d}{ds} \phi(\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) + \Sigma(\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}) \phi(\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = \mathcal{Q}(\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) \quad (2.21)$$

Écrivons l'intégrale du flux :

$$V_\alpha \phi_\alpha = \int_{V_\alpha} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \phi(r, \mathbf{\Omega}) \quad (2.22)$$

$$= \int_{\Upsilon} d^4T \int_{-\infty}^{+\infty} ds \chi_{V_\alpha}(T, s) \phi(\mathbf{p} + s\mathbf{\Omega}) \quad (2.23)$$

$$= \int_{\Upsilon} d^4T \sum_i \delta_{\alpha, N_i} \ell_i \bar{\phi}_i \quad (2.24)$$

Υ est l'ensemble des caractéristiques recouvrant le domaine. Ici elle se résume à une seule caractéristique. En explicitant ces intégrales :

$$V_I \phi_I = \int_{\Upsilon} d^4T \ell_1 \bar{\phi}_1 + \ell_3 \bar{\phi}_3 \quad (2.25)$$

$$V_{II} \phi_{II} = \int_{\Upsilon} d^4T \ell_2 \bar{\phi}_2 \quad (2.26)$$

En effet, la troisième région que traverse la caractéristique est le volume I, la contribution de ce segment de la caractéristique est donc ajoutée au flux moyen du volume I. Les contributions des différents segments à un même

volume sont différenciées car la longueur de ce segment intervient dans la résolution du problème.

Concernant la discrétisation angulaire de l'équation, elle se fait selon les méthodes S_n soit :

$$\int_{\Upsilon} d^4T f(T) = 4\pi \sum_{m=1}^M \omega_m f(T_m) \quad (2.27)$$

Dans notre cas, $M=1$ et la somme n'a pas lieu d'être.

L'équation (2.9) est une équation à une variable que l'on peut facilement intégrer si on dispose d'informations sur \mathcal{Q} . Une hypothèse possible est le schéma « Step Characteristic » qui considère que \mathcal{Q} est constante dans les différents volumes ($\mathcal{Q}(r_i + s\Omega) = \mathcal{Q}_{N_i}$). L'intégration sur le segment i nous donne alors :

$$\tilde{\phi}_i(s) = \phi_i e^{-\Sigma_i s} + \frac{\mathcal{Q}_{N_i}}{\Sigma_i} (1 - e^{-\Sigma_i s})$$

En effectuant la moyenne de la solution précédente et en la prenant pour $s = \ell_i$, les relations suivantes sont obtenues pour $i \in \{1, 2, 3\}$:

$$\phi_{i+1} = A_i \phi_i + B_i \mathcal{Q}_{N_i} \quad (2.28)$$

$$\bar{\phi}_i = \frac{1}{\ell_i} (B_i \phi_i + C_i \mathcal{Q}_{N_i}) \quad (2.29)$$

Avec $A_i = e^{-\tau_i}$

$$B_i = \frac{1 - e^{-\tau_i}}{\Sigma_i}$$

$$C_i = \frac{\ell_i}{\Sigma_i} \left(1 - \frac{1 - e^{-\tau_i}}{\tau_i}\right)$$

$$\tau_i = \Sigma_i \ell_i$$

La relation (2.28) liant les flux aux interfaces, nous permet d'exprimer tous les flux aux différentes surfaces en fonction du flux entrant :

$$\phi_2 = A_1 \phi_1 + B_1 \mathcal{Q}_{N_1} \quad (2.30)$$

$$\phi_3 = A_1 A_2 \phi_1 + A_2 B_1 \mathcal{Q}_{N_1} + B_2 \mathcal{Q}_{N_2} \quad (2.31)$$

$$\phi_4 = A_3 A_1 A_2 \phi_1 + A_3 A_2 B_1 \mathcal{Q}_{N_1} + A_3 B_2 \mathcal{Q}_{N_2} + B_3 \mathcal{Q}_{N_3} \quad (2.32)$$

Ici :

$$\mathcal{Q}_{N_1} = \mathcal{Q}_{N_3} = \mathcal{Q}_I \quad (2.33)$$

$$\mathcal{Q}_{N_2} = \mathcal{Q}_{II} \quad (2.34)$$

Les équations, la discrétisation (2.27) ainsi que les équations (2.25) et (2.26) donnent :

$$\begin{aligned} V_I \phi_I &= 4\pi((B_1 + B_3 A_1 A_2) \phi_1 + (C_1 + B_3 A_2 B_1 + C_3) \mathcal{Q}_I \\ &\quad + B_3 B_2 \mathcal{Q}_{II}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$V_{II} \phi_{II} = 4\pi(B_2 A_1 \phi_1 + B_1 B_2 \mathcal{Q}_I + C_2 \mathcal{Q}_{II}) \quad (2.36)$$

Les sources de neutrons peuvent s'exprimer de la manière suivante :

$$\mathcal{Q}_\alpha = \mathcal{Q}_\alpha^\diamond + \Sigma_{w,\alpha} \phi_\alpha \quad (2.37)$$

où $\mathcal{Q}_\alpha^\diamond$ représente les sources de diffusions des autres groupes et les sources de fission, et $\Sigma_{w,\alpha} \phi_\alpha$ représente la diffusion intra-groupe. Les équations suivantes sur le flux sont alors obtenues :

$$\begin{aligned} V_I \phi_I &= 4\pi((B_1 + B_3 A_1 A_2) \phi_1 + (C_1 + B_3 A_2 B_1 + C_3)(\mathcal{Q}_I^\diamond + \Sigma_{w,I} \phi_I) \\ &\quad + B_3 B_2 (\mathcal{Q}_{II}^\diamond + \Sigma_{w,II} \phi_{II})) \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} V_{II} \phi_{II} &= 4\pi(B_2 A_1 \phi_1 + B_1 B_2 (\mathcal{Q}_I^\diamond + \Sigma_{w,I} \phi_I) \\ &\quad + C_2 (\mathcal{Q}_{II}^\diamond + \Sigma_{w,II} \phi_{II})) \end{aligned} \quad (2.39)$$

Les équations (2.38), (2.39) et (2.32) nous donnent le système suivant :

$$A\Phi = B\mathcal{Q}^\diamond \quad (2.40)$$

avec

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_I \\ \phi_{II} \\ \phi_1 \\ \phi_4 \end{pmatrix} \text{ et } \mathcal{Q}^\diamond = \begin{pmatrix} \mathcal{Q}_I^\diamond \\ \mathcal{Q}_{II}^\diamond \end{pmatrix}$$

Les matrices s'écrivent :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{V_I}{4\pi} - (C_1 + B_3 A_2 B_1 + C_3) \Sigma_{w,I} & -B_3 B_2 \Sigma_{w,II} & -B_1 - B_3 A_1 A_2 & 0 \\ -B_1 B_2 \Sigma_{w,I} & \frac{V_{II}}{4\pi} - C_2 \Sigma_{w,II} & -B_2 A_1 & 0 \\ 0 & 0 & -A_3 A_1 A_2 & 1 \end{pmatrix}$$

et

$$B = \begin{pmatrix} C_1 + B_3 A_2 B_1 + C_3 & B_3 B_2 \\ B_1 B_2 & C_2 \\ A_3 A_2 B_1 + B_3 & A_3 B_2 \end{pmatrix}$$

Lorsqu'il y a plusieurs caractéristiques, ces matrices sont construites pour chaque caractéristique, puis sont sommées, ce qui demande souvent d'ajouter des lignes et des colonnes aux matrices. Les flux entrants et sortants locaux sont reliés aux courants globaux entrants (-) et sortants (+) grâce aux relations suivantes :

$$\varphi_{\beta}^{-} \sum_{m=1}^M \omega_m \chi_{\beta}(T_m, r_1) = -4\pi \sum_{m=1}^M \omega_m \chi_{\beta}(T_m, r_1) \phi_1(T_m) \quad (2.41)$$

$$\varphi_{\beta}^{+} \sum_{m=1}^M \omega_m \chi_{\beta}(T_m, r_{K+1}) = 4\pi \sum_{m=1}^M \omega_m \chi_{\beta}(T_m, r_{K+1}) \phi_{K+1}(T_m) \quad (2.42)$$

où K est le nombre de régions non distinctes traversées par K , et β la surface du système considéré. Cela aboutit à un système fermé avec autant d'équations que d'inconnues qu'il est donc possible de résoudre.

2.1.3 L'approximation de la diffusion

Le traitement numérique de l'équation de transport ne permet pas de traiter des systèmes ayant la dimension d'un cœur de réacteur dans un temps et avec un espace de stockage raisonnable. Afin de remédier à cette limitation, des schémas de calculs à deux niveaux se sont mis en place. Un premier calcul de transport sur une cellule ou un assemblage est réalisé pour obtenir des grandeurs homogénéisées et des sections macroscopiques. Puis un calcul sur une équation de transport approximée par une équation de la diffusion sur le cœur est fait avec des volumes homogénéisés et souvent sur 2 groupes d'énergies. Ce type de calcul sera utilisé dans à la partie 4.5. L'approximation de la diffusion repose sur la loi de Fick.

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\mathcal{D}(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}) \quad (2.43)$$

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\Sigma_t(\mathbf{r})} \quad (2.44)$$

Les hypothèses sur lesquelles reposent cette loi sont :

- La diffusion isotrope
- Une faible variation de Σ_t
- Un faible gradient de flux
- L'absorption est faible devant la diffusion

En utilisant la loi de Fick, l'équation de la diffusion monocinétique en régime permanent s'écrit :

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}) \Delta \phi - \Sigma_a \phi + S = 0 \quad (2.45)$$

Le traitement numérique de cette équation se fait le plus souvent selon des méthodes de différences finies, des éléments finis ou des méthodes nodales. Nous renvoyons le lecteur aux références [13, 26] pour des versions

détaillées de l'équation de la diffusion. Les simplifications introduites par la loi de Fick permettent de traiter des cas de grandes dimensions.

Ce type d'approche, par mise en place de schémas de calculs, permet effectivement un traitement déterministe plus facile de l'équation de transport à trois dimensions, mais nécessite une validation plus étendue compte tenu des approximations supplémentaires induites par les simplifications.

2.2 La méthode Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo consiste à simuler le cheminement d'un certain nombre de particules, dans notre cas des neutrons, à travers la matière pour en déduire un ensemble de valeurs macroscopiques caractéristiques. Elle a connu son essor peu après la seconde guerre mondiale sous l'impulsion de S. Ulam, N. Metropolis et J. Von Neumann. Cet essor a été rendu possible par l'apparition des premiers ordinateurs, notamment l'ENIAC, à la même époque [7].

Afin d'illustrer cette méthode, prenons un exemple simple : le calcul du nombre π . Pour cela, considérons un quart de disque dont le rayon est R. L'aire de ce quart de disque et l'aire du carré de côté R sont données par :

$$\mathcal{A}(\text{disque}) = \frac{\pi}{4}R^2 \quad (2.46)$$

$$\mathcal{A}(\text{carre}) = R^2 \quad (2.47)$$

Le ratio des deux aires nous donne donc accès à une estimation de π . La méthode de Monte Carlo permet d'estimer le ratio des deux aires et par conséquent la valeur de π . Cette estimation suit l'algorithme (1) et est illustrée par la figure (2.5) dans le cas R=1.

```

1 Définir  $\mathcal{N}$  le nombre de tirage à effectuer ;
2 Initialiser le compteur T=0 ;
3 pour  $i = 1, \mathcal{N}$  faire
4   Tirer un nombre aléatoire x selon une loi uniforme  $\mathcal{U}(0, 1)$  ;
5   Tirer un nombre aléatoire y selon une loi uniforme  $\mathcal{U}(0, 1)$  ;
6   si  $x^2 + y^2 < 1$  alors T = T + 1;
7 L'estimation de  $\pi$  est alors donnée par  $4T/\mathcal{N}$ ;

```

Algorithme 1: Algorithme d'acceptation-rejet pour l'estimation de π

Cette méthode permet donc de calculer des intégrales. L'avantage par rapport aux techniques déterministes est que la vitesse de convergence ne

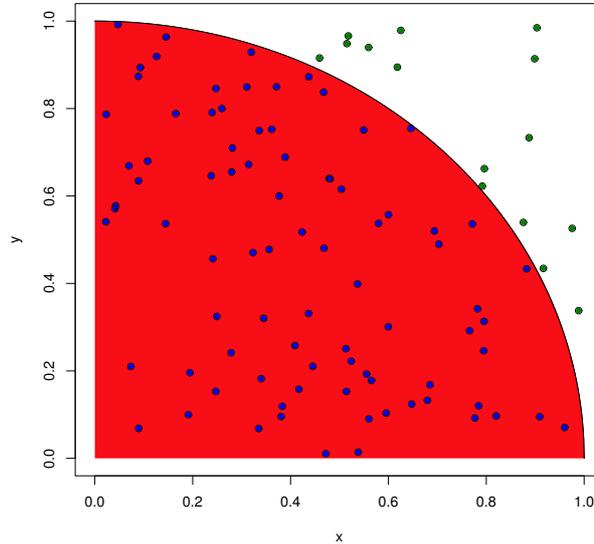


FIGURE 2.5 – Calcul de π par la méthode de Monte Carlo

varie pas avec la dimension de l'intégrale. En revanche, la vitesse de convergence est assez lente, car la variance décroît de façon proportionnelle à $\frac{1}{\sqrt{n}}$ où n est le nombre de particules simulées.

Avant d'aborder l'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour la résolution de l'équation de Boltzmann (1.6), commençons par décrire de façon sommaire quelques notions concernant les probabilités.

2.2.1 Quelques notions de calcul des probabilités

Nous n'aborderons ici que quelques notions sommaires, pour plus de précisions sur le sujet, nous renvoyons le lecteur à la référence [4].

Variables aléatoires

Une variable aléatoire continue X est une fonction qui prend un certain nombre de valeurs x dont la probabilité d'occurrence est décrite par une densité de probabilité, c'est à dire :

$$P(X \in A) = \int_A f(x) \text{ pour tout ensemble } A \quad (2.48)$$

f est une densité de probabilité décrivant X si f est positive et vérifie :

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) = 1 \quad (2.49)$$

$$P(X \in A) = \int_A f(x) \text{ pour tout ensemble } A \quad (2.50)$$

La loi gaussienne est la loi qui va être utilisée dans les méthodes de Monte Carlo. Sa densité est caractérisée par deux paramètres : la moyenne et l'écart type (cf figure (2.6))

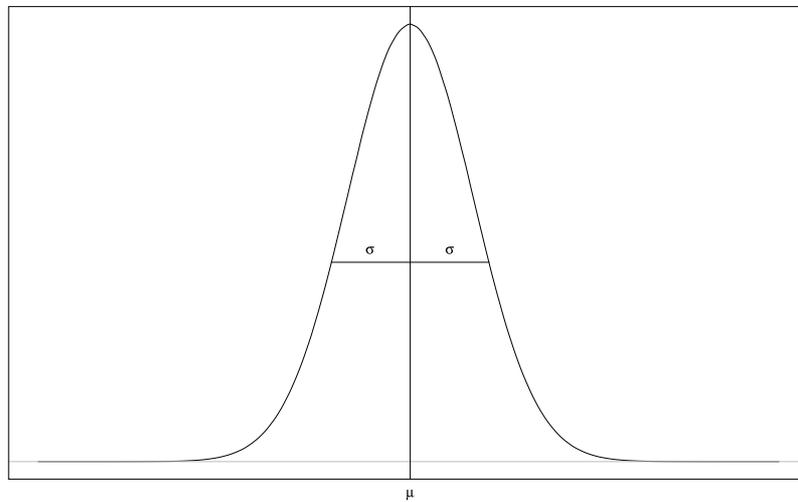


FIGURE 2.6 – Densité de la loi gaussienne $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

Loi forte des grands nombres

Soit $(X_n, n \in \mathcal{N}^*)$ une suite de variables aléatoires réelles indépendantes, de même loi et intégrables ($E[X_1] < +\infty$); alors la moyenne empirique converge presque sûrement vers $E[X_1]$ c'est-à-dire :

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k \rightarrow E[X_1] \text{ pour } n \rightarrow \infty \quad (2.51)$$

Théorème central limite

Soit $(X_n, n \in \mathcal{N}^*)$ une suite de variables aléatoires réelles indépendantes, de même loi et de carré intégrable ($E[X_n^2] < +\infty$).

Notons $\mu = E[X_n]$, $\sigma^2 = Var(X_n)$ et la moyenne empirique $\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k$. La suite de variables aléatoires $\sqrt{n}(\bar{X}_n - \mu)$ converge en loi vers la loi gaussienne $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

$$\sqrt{n}(\bar{X}_n - \mu) = \frac{\sum_{k=1}^n X_k - n\mu}{\sqrt{n}} \rightarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2) \text{ pour } n \rightarrow \infty \quad (2.52)$$

La loi forte des grands nombres nous donne la convergence de la moyenne empirique vers la moyenne. Le théorème central limite nous donne la vitesse de convergence en $\frac{1}{\sqrt{n}}$. Ces deux théorèmes sont à la base de la convergence des méthodes de Monte Carlo.

2.2.2 L'algorithme Monte Carlo appliqué au calcul de criticité

La principale différence par rapport à l'exemple du calcul de π vient du fait que la fonctionnelle à intégrer est inconnue. La solution à ce problème a été développée par N. Metropolis, à l'origine pour déterminer les grandeurs macroscopiques d'un gaz, et porte le nom de Monte Carlo par Chaînes de Markov [27, 28, 29].

Cette méthode consiste à simuler le cheminement des neutrons dans la matière depuis leur naissance jusqu'à leur disparition. Puis de se servir des sites de fission obtenus afin de déterminer les lieux de naissance des neutrons de la génération suivante comme l'illustre la figure (2.7).

Toutes les interactions que pourront avoir les neutrons avec la matière seront modélisées par des probabilités obtenues grâce aux bases de données nucléaires [30]. Chaque évènement (interaction ou déplacement) que subit un neutron est utilisé pour déterminer des grandeurs macroscopiques du système étudié.

Les figures (2.8 et 2.9) et algorithmes (2 et 3) schématisent le fonctionnement d'un code Monte Carlo pour ce qui est du suivi d'une population de neutrons en criticité.

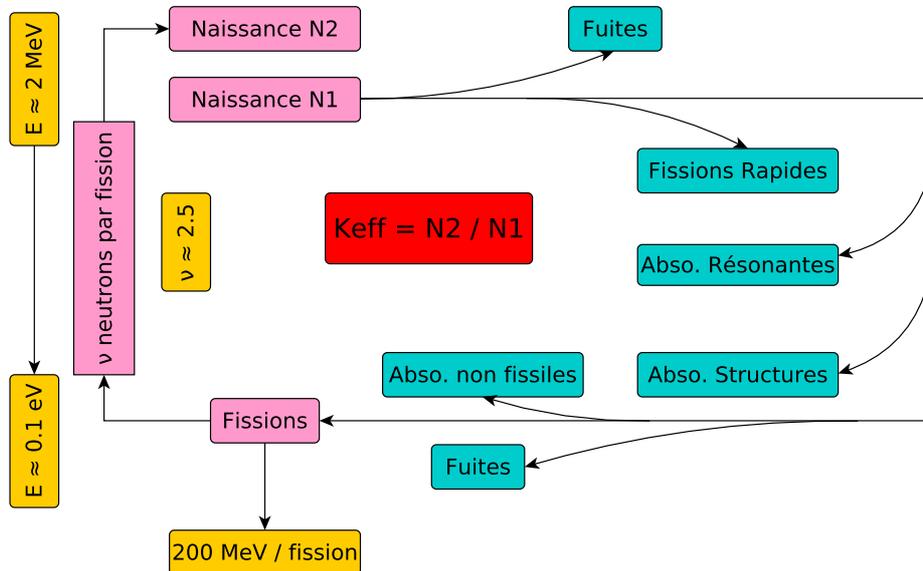


FIGURE 2.7 – Algorithme Monte Carlo appliqué au calcul de criticité

```

1 Utilisateur : initialisation de la population de neutrons ;
2 Utilisateur : critère arrêt (écart type ou nombre d'étape) ;
3 Utilisateur : Nombre de neutrons par étapes ( $\mathcal{N}_{neutrons}$ ) ;
4 Initialisation : Numéro_étape ;
5 Nature sites de naissance : diffusion ou absorption ;
6 tant que critère non atteint faire
7   Tirage aléatoire des sites de naissance selon la production ;
8   Mise à zéro des encaissements d'étape ;
9   pour  $i = 1, \mathcal{N}_{neutrons}$  faire
10    Simuler la vie du neutron  $i$ ;
11    Calcul du  $k_{eff}$  et des grandeurs d'étape ;
12    Estimation du  $k_{eff}$  et des grandeurs moyennes ;
13    Numéro_étape = Numéro_étape + 1 ;
14    si Critère atteint alors Sortie Boucle;
15 Fin de la simulation ;

```

Algorithme 2: Organisation des générations

```

1 Choix des coordonnées dans la base des sites de fission ;
2 Sélection énergie de naissance selon le spectre de fission ;
3 Échantillonnage de la direction selon une loi uniforme ;
4 tant que Neutron vivant faire
5   Calcul de la distance parcourue sans interactions  $\ell$  ;
6    $\ell = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi)$  avec  $\xi \in \mathcal{U}(0, 1)$  ;
7   Comparaison avec la distance de sortie et les distances d'entrées
   dans d'autres volumes ;
8    $d = \min(\ell, \text{distance sortie volume courant})$  ;
9   cas où  $d < \ell$  et Entrée dans un autre volume
10     Flux_corde + =  $w d$  ;
11     Production_corde + =  $w \nu \Sigma_f d$  ;
12     Repérage du volume où le neutron entre ;
13   cas où  $d < \ell$  et Sortie du système
14     Flux_corde + =  $w d$  ;
15     Production_corde + =  $w \nu \Sigma_f d$  ;
16     Fuites + =  $w$  ;
17     Mort neutron ;
18   cas où  $d \geq \ell$  Neutron reste dans le volume : Interaction
19     Flux_corde + =  $w \ell$  ;
20     Production_corde + =  $w \nu \Sigma_f \ell$  ;
21     Flux_choc + =  $\frac{w}{\Sigma_t}$  ;
22     Production_choc + =  $\frac{w \nu \Sigma_f}{\Sigma_t}$  ;
23     Sélection réaction : soit  $\xi \in \mathcal{U}(0, 1)$ . La réaction sélectionnée,
      $r_1$ , est la première qui vérifie  $\xi \leq \sum_{r \leq r_1} \frac{\Sigma_r}{\Sigma_t}$  ;
24     suivant Réaction faire
25       cas où Diffusion
26         Stockage site diffusion ;
27         Modification du poids si réaction  $(n, xn)$  ;
28         Sélection angle et énergie en fonction ;
29       cas où Absorption
30         Stockage site absorption ;
31         Flux_absorp + =  $\frac{w}{\Sigma_a}$  ;
32         Production_absorp + =  $\frac{w \nu \Sigma_f}{\Sigma_a}$  ;
33         Mort du Neutron ;
34 Fin de la simulation de la vie d'un neutron;

```

Algorithme 3: Schématisation de la vie d'un neutron

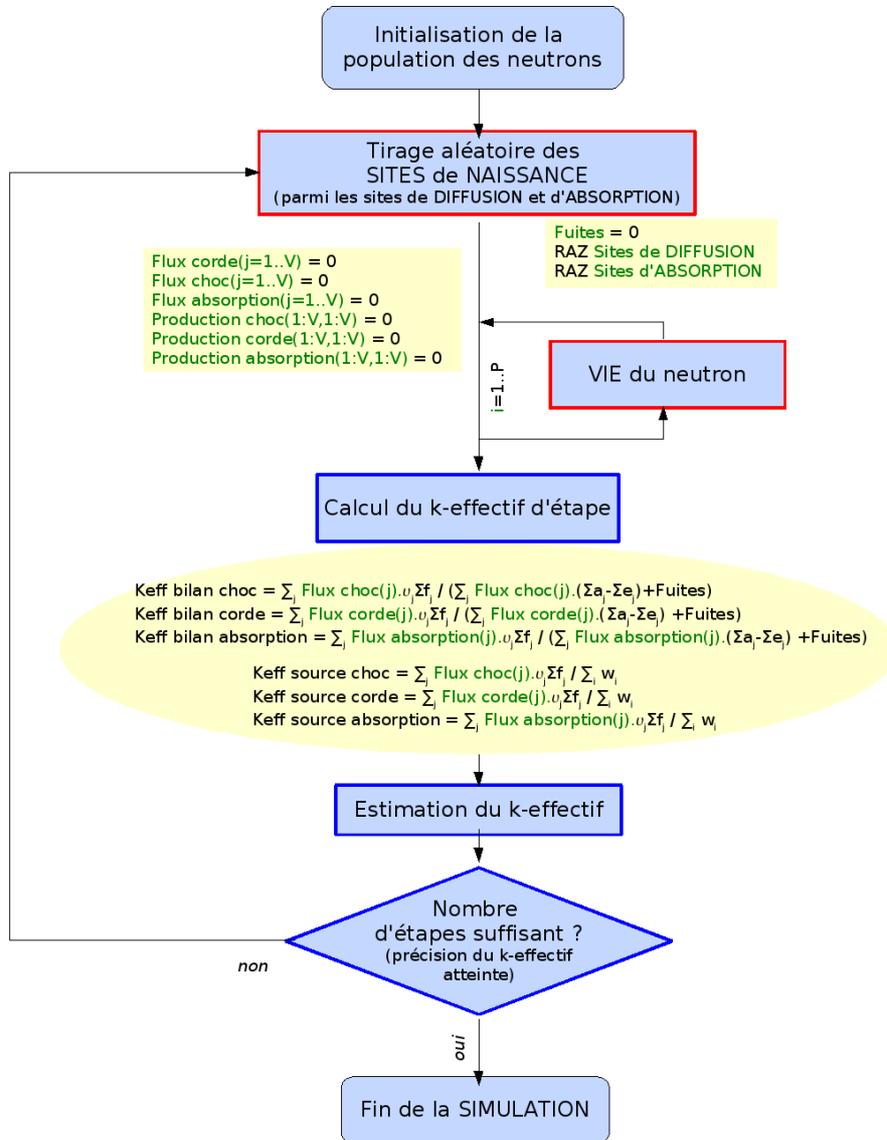


FIGURE 2.8 – Schéma de l’algorithme des itérations sur les générations et identification de la localisation de quelques estimateurs

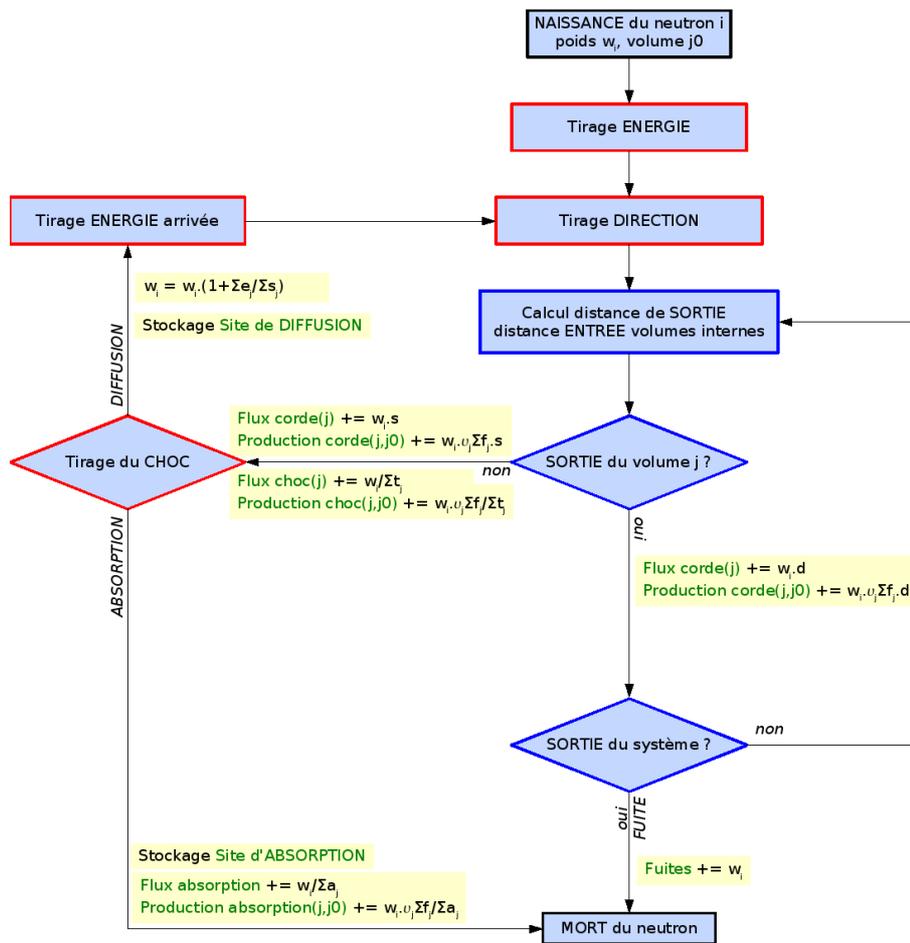


FIGURE 2.9 – Schéma de l’algorithme de la vie d’un neutron et identification de la localisation de quelques estimateurs

En théorie, deux grandes phases caractérisent la convergence du facteur de multiplication (k_{eff}) : les premières générations servent à faire converger la distribution des neutrons vers la distribution recherchée (qui est stationnaire), suivie d'une phase de convergence statistique (cf. figure (2.10)). Cependant, en pratique, il est délicat de déterminer à quel moment est atteinte la stationnarité de la distribution des sites de fission.

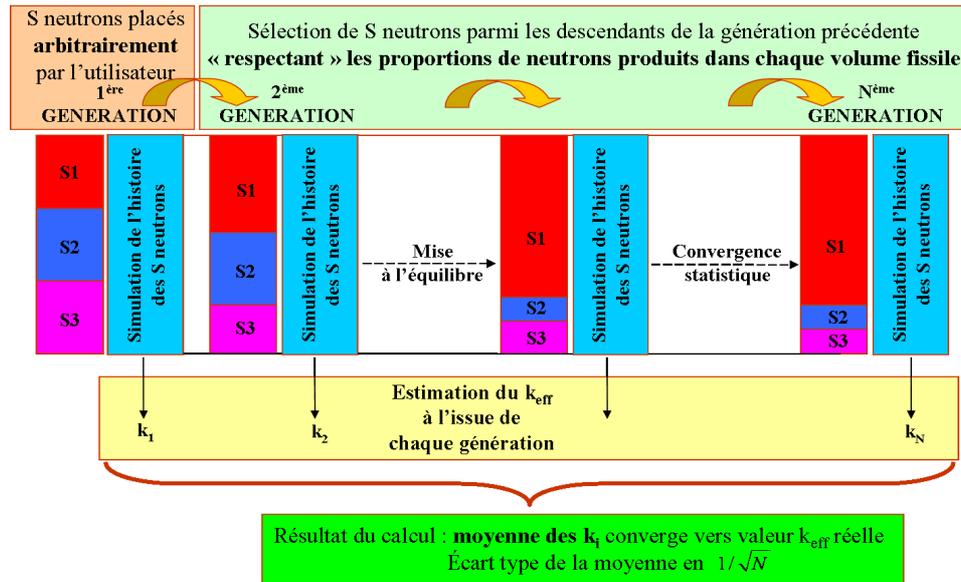


FIGURE 2.10 – Etapes de convergence d'un calcul Monte Carlo

Le chapitre 3 sera dédié à la description de la convergence des sources. La partie suivante s'emploie à décrire les façons d'obtenir l'estimation d'une grandeur.

2.2.3 Les différents estimateurs

Pour obtenir une grandeur lors d'un calcul Monte Carlo, il faut estimer cette grandeur à chaque étape, puis en faire la moyenne. La moyenne obtenue est un estimateur de cette grandeur. Les estimateurs peuvent être basés sur différents événements subis par le neutron : les déplacements, les collisions et les absorptions. Dans le code MORET, les estimateurs associés sont notés respectivement CORDE, CHOC et ABSO. Par exemple, le calcul à une étape i du taux de fission T peut s'estimer selon les événements retenus pour son estimation.

$$T^{choc} = \frac{\sum_{neut} \sum_{coll} \omega \frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}}{S} \quad (2.53)$$

$$T^{abso} = \frac{\sum_{neut} \sum_{abso} \omega \frac{\Sigma_f}{\Sigma_a}}{S} \quad (2.54)$$

$$T^{corde} = \frac{\sum_{neut} \sum_{parcours} \ell \omega \Sigma_f}{S} \quad (2.55)$$

Ici S représente le nombre de neutrons simulés par étape car l'estimation se ramène à un neutron pour des questions de normalisation. Le poids statistique est noté ω , et les sections efficaces totale, d'absorption, et de fission sont notées respectivement $\Sigma_t, \Sigma_a, \Sigma_f$ et ℓ est la distance parcourue par le neutron entre deux collisions.

Pour l'estimation du k_{eff} , six estimateurs différents sont disponibles dans le code MORET. Une possibilité est de considérer que le k_{eff} à la génération i est le nombre de neutrons produits par fission pendant cette génération, rapporté au nombre de neutrons simulés. Comme le nombre de neutrons simulé est constant d'une étape à l'autre, il suffit d'estimer la production de neutrons par fission à l'étape i pour estimer le k_{eff} . Comme décrit précédemment, l'estimation de la production par fission peut se baser sur un des trois évènements. Cela mène donc aux estimateurs suivants qui sont nommés SOURCE dans le code MORET :

$$k_{eff\ source}^{choc} = \frac{\sum_{neut} \sum_{coll} \omega \nu \frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}}{S} \quad (2.56)$$

$$k_{eff\ source}^{abso} = \frac{\sum_{neut} \sum_{abso} \omega \nu \frac{\Sigma_f}{\Sigma_a}}{S} \quad (2.57)$$

$$k_{eff\ source}^{corde} = \frac{\sum_{neut} \sum_{parcours} \ell \omega \nu \Sigma_f}{S} \quad (2.58)$$

Dans le code MORET, les réactions multiplicatives autres que la fission (réactions (n,xn)) sont considérées comme des diffusions avec une modification du poids statistique. Une seconde approche consiste à voir le k_{eff} comme le ratio entre la production et la disparition de neutron. La disparition de neutron peut être estimée selon trois estimateurs différents. Ces estimateurs notés BILAN dans le code MORET s'écrivent :

$$k_{eff\ bilan}^{choc} = \frac{\sum_{neut} \sum_{coll} \omega \nu \frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}}{A^{choc} + F - E^{choc}} \quad (2.59)$$

$$k_{eff\ bilan}^{abso} = \frac{\sum_{neut} \sum_{abso} \omega \nu \frac{\Sigma_f}{\Sigma_a}}{A^{abso} + F - E^{choc}} \quad (2.60)$$

$$k_{eff}^{corde\ bilan} = \frac{\sum_{neut} \sum_{parcours} \ell \omega \nu \Sigma_f}{A^{corde} + F - E^{corde}} \quad (2.61)$$

$$A^{xx} = \text{estimation xx de l'absorption} \quad (2.62)$$

$$E^{xx} = \text{estimation xx des excès : réactions (n,xn)} \quad (2.63)$$

$$F = \text{Fuite des neutrons} \quad (2.64)$$

Nous remarquerons que pour l'estimation sur les absorptions, les excès utilisés sont ceux estimés sur les collisions. Cela provient du fait que les excès proviennent des réactions (n, xn) qui n'existent pas lors des absorptions.

Nous allons dans la partie suivante décrire le traitement Monte Carlo de l'équation de transport de façon plus théorique.

2.3 Traitement théorique de l'équation de transport par séries de Neumann

Pour résoudre l'équation de transport grâce à la méthode de Monte Carlo, il existe deux approches qui aboutissent à la même démarche. La première consiste à considérer la simulation de la vie de plusieurs neutrons et d'en déduire des grandeurs qui correspondent à la physique du système. Ces grandeurs vérifient bien évidemment l'équation de transport qui décrit, elle aussi, la physique du système. La seconde approche consiste à voir le problème comme une résolution de système intégral.

Cette approche va nous permettre d'explicitier les possibilités de modification des règles d'échantillonnage, notamment à des fins de réduction de variances. Commençons par développer les solutions des équations intégrales de Fredholm. Les équations de Fredholm sont un cas général de résolution d'équation de transport de particule grâce aux méthodes de Monte Carlo. Nous ne développerons ici qu'une partie de la théorie, pour des démonstrations complètes nous renvoyons le lecteur à [27, 29].

2.3.1 Solution des équations de Fredholm du premier type

Nous allons chercher à estimer l'intégrale suivante :

$$\mathcal{I} = \int h(x) \varphi_j(x) dx \quad (2.65)$$

Où φ_j est une densité de probabilité, et h une fonction intégrable. Admettons qu'il existe une fonction positive $K(x', x)$, appelée noyau, et φ_{j-1} une densité de probabilité telles que :

$$\varphi_j(x) = \int K(x', x) \varphi_{j-1}(x') dx' \quad (2.66)$$

Notons k la densité de probabilité conditionnelle définie par :

$$k(x|x') = \frac{K(x', x)}{w(x')} \quad (2.67)$$

$$w(x') = \int K(x', x) dx \quad (2.68)$$

On peut alors estimer l'intégrale \mathcal{I} de la manière suivante :

- tirer N valeurs (x'_i) selon la loi de probabilité φ_{j-1}
- choisir N valeurs (x_i) suivant les distributions conditionnelles $k(x|x'_i)$
- calculer :

$$\bar{\mathcal{I}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w(x'_i) h(x_i) \quad (2.69)$$

$\bar{\mathcal{I}}$ est un estimateur sans biais de \mathcal{I} . Il est bon de remarquer que la définition de la probabilité conditionnelle revient à une normalisation du noyau K .

2.3.2 Solution des équations de Fredholm du second type

Les équations de Fredholm du second type s'écrivent :

$$\varphi(x) = \mathcal{Q}(x) + \int K(x', x) \varphi(x') dx' \quad (2.70)$$

La fonctionnelle à déterminer est

$$I = \int dx f(x) \varphi(x) \quad (2.71)$$

Les notations prises sont :

- φ une densité de probabilité inconnue
- \mathcal{Q} est le terme source de l'équation
- $K(x', x)$ est le noyau intégral
- f est la fonction de coût

Construisons φ comme une série de Neumann qui respecte les relations suivantes :

$$\varphi(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j(x) \quad (2.72)$$

$$\varphi_0(x) = \mathcal{Q}(x) \quad (2.73)$$

$$\varphi_j(x) = \int K(x', x) \varphi_{j-1}(x') dx' \quad (2.74)$$

Cette construction donne φ solution de l'équation (2.70) :

$$\text{Soit } \varphi(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j(x)$$

$$\text{Alors } \varphi(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(x) + \varphi_0(x)$$

$$\varphi(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \int K(x', x) \varphi_{j-1}(x') dx' + \varphi_0(x)$$

Sous des conditions de régularité, l'intégrale et la série peuvent être inversées et ce qui donne

$$\varphi(x) = \int K(x', x) \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_{j-1}(x') dx' + \mathcal{Q}(x) \quad (2.75)$$

Un changement d'indice permet de conclure. Le calcul de la fonctionnelle à estimer se fait alors sous forme de série :

$$\mathcal{I} = \sum_{j=0}^{\infty} \mathcal{I}_j \quad (2.76)$$

$$\mathcal{I}_j = \int f(x) \varphi_j(x) dx \quad (2.77)$$

La démarche pour obtenir une estimation de l'intégrale \mathcal{I} par la méthode de Monte Carlo s'écrit :

1. choisir N éléments $(x_{i,j=0})_{i=1,N}$ de la densité de probabilité suivante :

$$q(x) = \frac{\mathcal{Q}(x)}{\int \mathcal{Q}(x) dx}$$

2. Choisir les $j+1$ ème coordonnées $(x_{i,j+1})_{i=1,N}$ selon la probabilité conditionnée :

$$k(x|x_{i,j}) = \frac{K(x_{i,j}, x)}{w_{i,j}}$$

où

$$w_{i,j} = \int K(x_{i,j}, x) dx$$

la fonctionnelle \mathcal{I}_j est alors approchée par un estimateur sans biais $\bar{\mathcal{I}}_j$ défini par :

$$\bar{\mathcal{I}}_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N W_{i,j} f(x_{i,j})$$

$$W_{i,j} = \prod_{\ell=0}^j w_{i,\ell}$$

3. mettre j à $j+1$ et retourner à l'étape 2.
4. La fonctionnelle à évaluer est la série des contributions de tous les termes de la série de Neumann :

$$\bar{\mathcal{I}} = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{\mathcal{I}}_j \quad (2.78)$$

Cet algorithme découle de l'application récursive de la résolution des équations de Fredholm du premier ordre. En pratique, il n'est bien sûr pas possible de décrire des séries infinies. Un critère d'arrêt doit être défini et est discuté plus loin dans ce chapitre.

Afin de faire le lien avec le problème de l'équation de transport appliqué au cas du neutron, nous allons décrire les différentes grandeurs (noyaux et densités de probabilité) à utiliser pour le transport de neutrons. Le noyau de transport K se décompose en deux noyaux (collision et transition) qui agissent sur la vitesse (E, Ω) ou la position (\mathbf{r}) . Les coordonnées dans l'espace des phases sont $P = (\mathbf{r}, \Omega, E)$. Afin d'alléger les équations, nous reprendrons la notation $\mathbf{E} = (E, \Omega)$. Nous écrirons les noyaux dans ce système de coordonnées pour plus de clarté.

2.3.3 Noyaux et densités

Noyau de collision

Lorsqu'un neutron interagit avec un isotope, il peut subir une diffusion (élastique ou inélastique), une absorption (fissile ou stérile), des réactions (n, xn) . Le noyau de collision décrit toutes les interactions possibles avec les éléments présents dans le milieu.

Supposons qu'il y ait n éléments dans le milieu considéré, ainsi que m interactions possibles pour chaque élément. Notons alors $\nu_{i,j}$ le nombre moyen de neutrons issus de la réaction j avec le noyau i et $\sigma_{i,j}$ la section efficace correspondant à cette réaction. Le nombre de neutrons sortant en (\mathbf{r}, \mathbf{E}) à $d\mathbf{E}$ près après une interaction aux coordonnées $(\mathbf{r}, \mathbf{E}')$ s'écrit :

$$C(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E}|\mathbf{r})d\mathbf{E} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \nu_{i,j} \sigma_{i,j}(\mathbf{r}|\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E})}{\sigma(\mathbf{r}, E')} \quad (2.79)$$

Les sommes sur i et j sont interchangeables, ce qui signifie que lors de la résolution on peut choisir le type de réaction puis l'isotope collisionné ou inversement sans que cela n'affecte le résultat. En pratique, l'élément collisionné est choisi, puis la réaction est déterminée.

Le noyau de collision peut être décomposé selon les types de réaction. Ici une réaction dénote un couple (isotope, réaction).

$$\hat{C}(P', P'') = \sum_r \hat{c}_r(P') \hat{C}_r(P', P'') \quad (2.80)$$

où $\hat{c}_r(P')$ est la probabilité de la réaction r au point P' :

$$\hat{c}_r(P') = \frac{\sigma_r(P')}{\sigma(P')} \quad (2.81)$$

et $\hat{C}_r(P', P'')$ le noyau associé à la réaction r . En pratique, la réaction est choisie selon les probabilités (2.81) puis le noyau associé à cette réaction est utilisé afin de déterminer les coordonnées de sortie de collision. Pour cela, les noyaux liés aux réactions doivent être normalisés.

Noyau de transition

L'énergie et la direction d'un neutron entre deux interactions ne varient pas. La probabilité pour qu'une particule partant de \mathbf{r}' ait sa prochaine collision en \mathbf{r} à $d\mathbf{r}$ près est :

$$T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} | \mathbf{E}) d\mathbf{r}$$

$$T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} | \mathbf{E}) = \sigma(\mathbf{r}, E) \exp\left[-\int_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \sigma(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}, E) ds\right] \frac{\delta(\boldsymbol{\Omega}, \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|})}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \quad (2.82)$$

La notation $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ pour l'intégrale représente l'intégrale curviligne selon la ligne droite de \mathbf{r}' vers \mathbf{r} . Le premier terme représente la probabilité d'interaction en \mathbf{r} qui est proportionnelle à la section efficace. Le second terme est l'atténuation exponentielle, c'est à dire la probabilité que la particule aille jusqu'au point \mathbf{r} sans rencontrer de collision. Le dernier terme, un dirac, assure que le point d'arrivée est selon la direction $\boldsymbol{\Omega}$. En écrivant $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + R\boldsymbol{\Omega}$ où R est la distance entre \mathbf{r} et \mathbf{r}' , la formulation suivante est obtenue :

$$T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} | \mathbf{E}) d\mathbf{r} = \sigma(R, E) \exp[-\tau(R)] dR \quad (2.83)$$

$$\tau(R) = \int_0^R \sigma(s) ds \quad (2.84)$$

Cette forme présente l'avantage de se ramener à une fonction d'une seule dimension. Cela permettra d'échantillonner plus facilement ce noyau.

Après avoir défini les noyaux de collision et de transition, nous allons définir les densités de collision ainsi que les relations qui les régissent.

Densités de collision

Nous appellerons densité de collision sortante le nombre moyen de particules sortant d'une collision dans un élément de volume $d\mathbf{r}d\mathbf{E}$ autour de (\mathbf{r}, \mathbf{E}) . Nous adopterons cette dénomination bien qu'elle ne soit pas correcte puisque cette densité n'est pas normalisée à un. Nous la noterons :

$$\chi(\mathbf{r}, \mathbf{E})d\mathbf{r}d\mathbf{E} \quad (2.85)$$

Définissons aussi la densité de collision entrante comme le nombre moyen de particules arrivant à une collision en (\mathbf{r}, \mathbf{E}) à $(d\mathbf{r}, d\mathbf{E})$ près. Nous la noterons :

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{E})d\mathbf{r}d\mathbf{E} \quad (2.86)$$

Ces densités peuvent être développées en série de Neumann :

$$\chi(P) = \sum_0^{\infty} \chi_i(P) \quad (2.87)$$

$$\psi(P) = \sum_0^{\infty} \psi_i(P) \quad (2.88)$$

Ici χ_i représente la densité de particules quittant la i -ème collision et ψ_i la densité de particules arrivant à la $i+1$ ème collision. Nous allons alors faire le lien entre ces différentes grandeurs et les équations de Fredholm (2.66) et (2.70). D'après les définitions données ci-dessus, et en considérant que le terme source de particules est la densité de collision sortante d'ordre zéro, les densités de collision entrante et sortante vérifient les équations :

$$\chi(P) = \mathcal{Q}(P) + \int \psi(\mathbf{r}, \hat{E}')C(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E}|\mathbf{r})d\mathbf{E}' \quad (2.89)$$

$$\psi(P) = \int \chi(\mathbf{r}', \mathbf{E}')T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}|\mathbf{E})d\mathbf{r}' \quad (2.90)$$

En combinant les équations (2.89) et (2.90) :

$$\chi(P) = \mathcal{Q}(P) + \iint \chi(\mathbf{r}', \mathbf{E}')T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})C(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E})d\mathbf{E}' d\mathbf{r}' \quad (2.91)$$

$$\begin{aligned} \psi(P) &= \int \mathcal{Q}(\mathbf{r}')T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})d\mathbf{r}' + \\ &\iint \psi(\mathbf{r}', \mathbf{E}')C(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E})T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})d\mathbf{E}' d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (2.92)$$

Ces équations sont bien de la forme des équations de Fredholm du second type. De manière générale, on cherche à résoudre l'équation en ψ car cette densité est directement reliée au flux neutronique par la relation :

$$\psi = \Sigma_t \phi \quad (2.93)$$

Pour faire le lien avec la résolution de la seconde équation de Fredholm, commençons par identifier la signification des indices de la résolution de la seconde équation de Fredholm. L'indice i correspond à l'indice de particule simulée et l'indice j à l'indice de « collision », en fait à l'application du noyau transition plus collision. Dans l'algorithme pour la résolution de l'équation de Fredholm décrit dans la partie 2.3.2, la boucle externe est appliquée sur l'indice des collisions et l'indice i des particules est appliqué dans une « boucle interne ». Remarquons que l'estimation de la fonctionnelle fait intervenir une somme sur les deux indices. Ainsi il est possible d'inverser les deux indices de sommation dans l'estimation. Ce qui revient à faire passer l'indice de particule à la boucle externe et l'indice de collision à la boucle interne. Toutes les applications des noyaux sont ainsi simulées pour une particule avant de passer à la particule suivante. En conclusion, pour déterminer ψ , des particules vont être sélectionnées selon la densité source, puis les noyaux de transition et de collision vont être appliqués successivement, ce qui conduit à un système à deux relations. Bien que cette estimation soit une série, la réalisation pratique ne donne jamais lieu à une véritable série, mais à une somme l'approchant. La question de l'arrêt de l'approximation sur l'application des noyaux sera abordée plus loin.

En résolvant ce système sur ψ , χ est déterminée en même temps. Le calcul peut alors se résumer par le schéma (figure 2.11) issu de [31] :

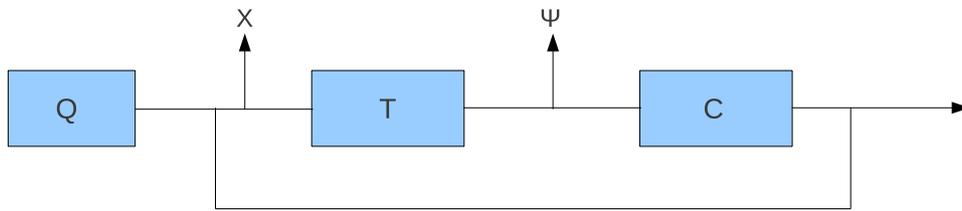


FIGURE 2.11 – Diagramme représentant l'enchaînement d'un calcul Monte Carlo

La résolution en utilisant les séries de Neumann est pratique d'un point de vue théorique mais sa mise en œuvre nécessite un critère d'arrêt des itérations. Dans le cas où le milieu suffisamment sous critique, le critère d'arrêt est la sortie de la particule des limites du système. En effet, la série s'arrête lorsque la particule sort des limites du système (géométrique ou en énergie) ou qu'elle est absorbée. Ces critères sont discutés de manière rigoureuse dans [27].

Dans les calculs considérés à source fixe, tels que les calculs de radioprotection, l'implémentation se fait exactement selon le modèle présenté ci-

dessus. Lorsque le milieu est multiplicatif sans source fixe (cas des calculs de criticité) une stratégie un peu différente doit être mise en place, c'est ce que nous allons expliciter dans la partie suivante.

2.3.4 Mise en œuvre pour les calculs de criticité

Contrairement aux descriptions précédentes, la source de neutrons dépend de la solution. Les calculs de criticité s'expriment sous la forme d'une équation aux valeurs propres où le coefficient de multiplication effectif est la plus grande valeur propre et le vecteur propre associé est la seule solution positive sur le domaine de définition. Cette équation est du type :

$$\psi(P) = \int \psi(P') [K_s(P', P) + \frac{1}{k_{eff}} K_f(P', P)] dP' \quad (2.94)$$

$$\psi(P) = \int \psi(P') K_s(P', P) dP' + \frac{1}{k_{eff}} \int \psi(P') K_f(P', P) dP' \quad (2.95)$$

$$K_s(P', P) = \int c_s(P') \mathcal{C}_s(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E}) T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) dP'$$

$$K_f(P', P) = \int c_f(P') \mathcal{C}_f(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E}) T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) dP'$$

$$\mathcal{C}_f(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E}) = \sum_{n=1}^{\infty} n q_n(P') \mathcal{C}_n(\mathbf{E}' \rightarrow \mathbf{E})$$

q_n est la probabilité que la fission engendre n neutrons et \mathcal{C}_n le noyau associé. K_s représente le noyau de collision hors fission et K_f le noyau de fission. $c_r(P) = \frac{\sigma_r(P)}{\sigma_{total}(P)}$ est la probabilité d'occurrence de la réaction r au point P.

Pour résoudre ce problème, l'idée est de se ramener au cas d'un calcul à source fixe. Les termes correspondant au noyau de collision hors fission et au noyau de fission sont séparés, afin d'isoler le terme de multiplication par fission des neutrons. Par contre, le terme de multiplication des neutrons par des réactions (n,xn) est conservé dans le noyau de collision. Les réactions (n,xn) sont considérées, dans le code MORET, comme des réactions de diffusion avec une modification du poids statistique.

La distribution de fission d'une itération est la source « fixe » pour l'itération suivante. Chaque itération consiste alors en la résolution d'un système non multiplicatif avec une source fixe. Introduisons une constante de normalisation, le but étant de se ramener à une équation avec des densités normalisées. Cela permettra notamment de normaliser le terme source. Notons $\bar{\Psi}$ la densité normalisée et W la constante de normalisation.

$$\bar{\Psi}(P) = \frac{\psi(P)}{W} \quad (2.96)$$

La source de neutrons va alors s'écrire :

$$\mathcal{Q}(P) = \frac{1}{k_{eff}} \int \bar{\Psi}(P') c_f(P') \sum_{n=1}^{\infty} n q_n(P') \mathcal{C}_n(P', P) dP' \quad (2.97)$$

La normalisation de la densité de neutrons sources donne l'expression de la normalisation :

$$\int \mathcal{Q}(P) dP = 1 \quad (2.98)$$

$$k_{eff} = \int \bar{\Psi}(P') c_f(P') \nu(P') dP' \quad (2.99)$$

$$W = \frac{\int \psi(P') c_f(P') \nu(P') dP'}{k_{eff}} \quad (2.100)$$

Ce qui nous mène à la méthode suivante :

Soit \mathcal{Q}_0 une distribution initiale quelconque. A l'étape n, le problème suivant est résolu :

$$\bar{\Psi}^n(P) = \int \bar{\Psi}^n(P'') K_s(P'', P) dP'' + \bar{\Psi}_0^n(P) \quad (2.101)$$

$$\bar{\Psi}_0^n(P) = \int \mathcal{Q}^{n-1}(P') T(P', P) dP' \quad (2.102)$$

La source est alors mise à jour :

$$\mathcal{Q}^n(P) = \frac{\int \bar{\Psi}^n(P'') \mathcal{C}_f(P'', P) dP''}{k^n} \quad (2.103)$$

$$k^n = \int \bar{\Psi}^n(P) c_f(P) \nu(P) dP \quad (2.104)$$

Puis l'étape n+1 peut être commencée.

Une estimation du facteur de multiplication effectif est alors obtenue en prenant la moyenne de toutes les itérations. Ce processus est itéré jusqu'à atteindre la précision souhaitée sur le facteur de multiplication effectif.

Dans cette description, il est clair que la source de l'étape n est la densité de neutrons issus de fissions en utilisant la densité de l'étape n-1. Les réactions de fission produites à l'étape n-1 sont alors utilisés pour choisir les sites de naissance des neutrons de la génération suivante n.

L'introduction d'une constante de normalisation permet de normaliser la source initiale par k_{eff} . Ainsi le nombre de neutrons simulés par génération est constant et permet d'éviter une décroissance totale (ou une croissance

exponentielle) de la population neutronique en quelques itérations si le k_{eff} s'éloigne de 1. De plus cette constante ne modifie pas la solution puisque cette dernière est solution d'une équation aux valeurs propres et donc définie à une constante près.

Le schéma de la figure (2.12) résume l'enchaînement d'un calcul de criticité.

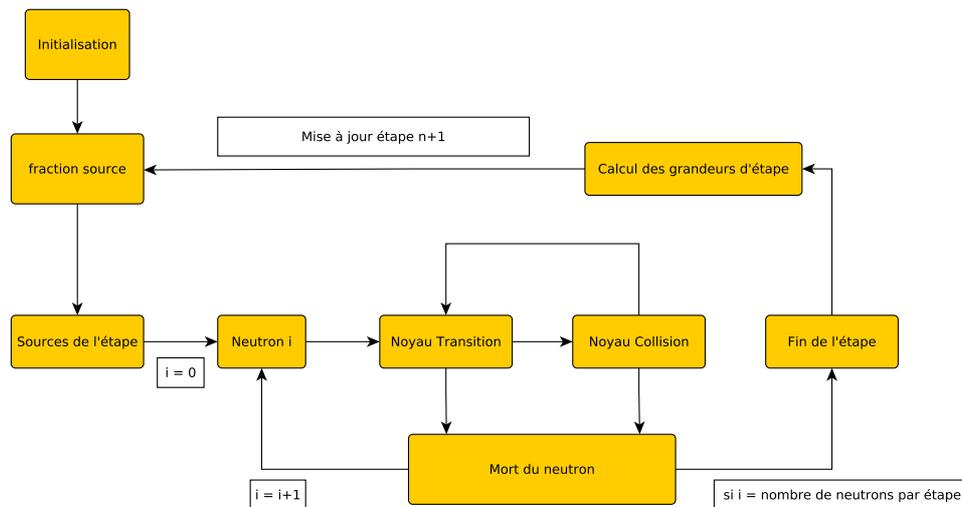


FIGURE 2.12 – Schéma résumant l'enchaînement des étapes de la simulation de criticité

Dans cette façon de procéder, les sites de fission sont pris comme source pour la génération suivante. Cependant, dans le code MORET, une stratégie légèrement différente est utilisée, puisque ce sont les sites de collision qui sont pris comme sites potentiels de fission. Pour cela il suffit d'associer à chaque site une probabilité Σ_f/Σ_t correspondant à la probabilité de fission lors d'une collision, puis de sélectionner les sites de naissance selon cette probabilité. Cette stratégie permet un tirage des sources dans un échantillon plus important.

Cette méthode est en fait similaire à la méthode des puissances décrite dans la partie 2.2.2.

2.3.5 Modification du noyau de transport et réduction de variance

Il existe de nombreuses approches pour améliorer la convergence des calculs Monte Carlo. L'objet de ce paragraphe est de lister les techniques de

réductions de variances disponibles dans les principaux codes utilisés en physique des réacteurs.

Dans la résolution des équations de Fredholm, le noyau a été normalisé et remplacé par une probabilité conditionnelle et un poids statistique pour l'échantillonnage des valeurs. C'est en s'inspirant de cette normalisation du noyau de transport que les techniques de modification des noyaux à des fins de réduction de variance ou d'amélioration de convergence apparaissent. En effet, le noyau de transport (qui représente les règles du jeu) peut être modifié. Un poids statistique sera alors affecté à chaque particule et sera modifié pour compenser ces modifications. Ce poids n'a pas d'interprétation physique, et n'est qu'un artifice mathématique. Il permet de « mesurer » l'écart de la simulation réalisée à la simulation analogue. La simulation analogue, aussi appelée simulation naturelle, est la méthode de simulation qui respecte le noyau de transport initial, elle est nommée ainsi par opposition aux méthodes qui modifient le noyau de transport.

Soit $\hat{K}(x', x) > 0$ un noyau de transport normalisé :

$$\int \hat{K}(x', x) dx = 1$$

La probabilité conditionnelle est alors remplacée par

$$\hat{k}(x|x') \equiv \hat{K}(x', x) \quad (2.105)$$

et le poids vaut :

$$w(x', x) = \frac{K(x', x)}{\hat{K}(x', x)} \quad (2.106)$$

Il peut être démontré que la modification précédente donne lieu à un estimateur sans biais de (2.65). Les règles du jeu (le noyau de transport) peuvent donc être modifiées et un estimateur sans biais peut être obtenu grâce à une modification appropriée du poids. C'est l'idée qui sous-tend les techniques de réduction de variance [32].

Quelques-unes de ces techniques sont détaillées ci-dessous. Ces techniques ont été développées, à la base, pour les calculs à source fixe. Récemment leur utilisation a été envisagée pour l'amélioration de la convergence des sources. Dans ce travail de thèse, l'adaptation d'une de ces techniques a été envisagée. D'autres équipes ont tenté des approches différentes. C'est pour cela que nous allons décrire ces techniques dans ce chapitre.

Importance Sampling

La méthode dite d'importance sampling est une autre représentation de la modification précédente. Reprenons l'équation (2.70) multipliée par une

fonction $V(x)$ strictement positive, on obtient :

$$\varphi(x)V(x) = \mathcal{Q}(x)V(x) + \int K(x', x) \frac{V(x)}{V(x')} \varphi(x')V(x') dx' \quad (2.107)$$

Cette équation est identique à l'équation (2.70) en posant les grandeurs suivantes :

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}(x) &= \varphi(x)V(x) \\ \hat{\mathcal{Q}}(x) &= \mathcal{Q}(x)V(x) \\ \hat{K}(x', x) &= K(x', x) \frac{V(x)}{V(x')} \end{aligned} \quad (2.108)$$

L'importance sampling amène donc à une modification du noyau. Ces relations donnent une certaine direction pour choisir cette modification. En effet si la fonction V mesure l'importance d'un événement en x , alors le ratio $\frac{\hat{K}}{K}$ augmente si et seulement si le point d'arrivée est dans une région d'importance plus grande que le point de départ, c'est à dire $V(x) > V(x')$. Ces modifications permettent alors de calculer la fonctionnelle (2.71) en modifiant la fonction de coûts de la manière suivante :

$$\mathcal{I} = \int dx f(x) \varphi(x) = \int dx \frac{f(x)}{V(x)} \hat{\varphi}(x) \quad (2.109)$$

Cette fonctionnelle correspond en fait à une modification du poids des neutrons en $1/V(x)$. La question qui reste est celle du choix de la fonction importance. Le choix retenu est celui de l'utilisation du flux adjoint qui peut être vu comme une fonction d'importance [12, 13, 14, 15, 16, 18].

$$\hat{\varphi}(x) = \int K(x', x) \hat{\varphi}(x') \frac{\phi^*(x)}{\phi^*(x')} dx' + \hat{\mathcal{Q}}(x) \quad (2.110)$$

La mise en œuvre de l'utilisation du flux adjoint peut être vu de deux façons, la première consiste à modifier l'échantillonnage en utilisant des stratégies de splitting et de roulette russe, la seconde à redéfinir les noyaux de transport et de collision.

Splitting et Roulette géométriques

Dans cette stratégie, le nombre de particules arrivant en x d'un événement survenu en x' , est modifié par le ratio des importances. Cette modification du noyau s'effectue grâce à des techniques de splitting et roulette russe de la manière suivante :

- si $\frac{\phi^*(x)}{\phi^*(x')} \geq 1$ alors il y a création de particules (splitting)
- si $\frac{\phi^*(x)}{\phi^*(x')} < 1$ alors les particules sont tuées (roulette russe)

Étant donné que le nombre de particules est modifié, le poids statistique (ω) de chaque particule doit être modifié en conséquence afin de conserver l'estimateur. La conservation s'écrit :

$$\omega(x') = \omega(x) \frac{\phi^*(x)}{\phi^*(x')}$$

La plupart des codes Monte Carlo ne simulent qu'un neutron à la fois, les neutrons qui descendent de cette division sont alors stockés puis simulés à tour de rôle. Cette façon de traiter la modification du noyau de transport est appelée Splitting/Roulette géométrique et énergétique. Elle est appliquée indépendamment du poids des particules. Le Splitting et la roulette peuvent être réalisés aux points de collision ou aux interfaces de changement de milieu.

Fenêtres de poids (Weight Windows)

L'idée des fenêtres de poids [33, 34] est de contraindre le poids statistique des particules dans un segment de bornes w_l et w_u . Ces bornes sont définies par rapport à un poids central (w_c) avec les relations $w_l = \frac{w_c}{m}$ et $w_u = mw_c$ où $m \sim 3$ ou par une relation liant celles-ci : $w_u = Cw_l$ avec C en général pris à 5 (valeurs prise par défaut par le code MCNP). La détermination des limites détermine le rôle de ces fenêtres ainsi que le nombre de splitting et de roulettes qui vont être réalisés.

Si la particule dépasse le poids w_u , elle est divisée en plusieurs particules dont le poids est dans la fenêtre. Notons w_i le poids initial de la particule, le poids avant de subir le splitting ou la roulette, et w_a le poids après ces stratégies. Pour $w_i > w_u$, on « divise » la particule selon :

$$n = \text{round}\left(\frac{w_i}{w_u}\right) \quad (2.111)$$

$$w_a = \frac{w_i}{n} \quad (2.112)$$

La roulette russe est appliquée si le poids de la particule est inférieur à w_l . Un nombre aléatoire ξ est tiré de manière uniforme entre 0 et 1, puis soit la particule est tuée soit son poids est remis à w_c suivant les conditions :

$$\text{si } \xi < \frac{w_i}{w_c} \text{ alors on impose } w_a = w_c$$

$$\text{si } \xi > \frac{w_i}{w_c} \text{ alors on impose } w_a = 0$$

La roulette russe conserve le poids moyen des particules pour un grand

nombre d'histoires simulées. En effet :

$$w_{moyen} = w_{survie} \cdot p_{survie} + w_{mort} \cdot p_{mort}$$

$$w_{moyen} = w_c \cdot p_{w=w_c} + 0 \cdot p_{w=0}$$

$$w_{moyen} = w_c \frac{w}{w_c}$$

$$w_{moyen} = w$$

Les paramètres choisis pour le système de fenêtres de poids peuvent dépendre des variables d'espaces, d'énergie et d'angles. En général, la variable angulaire n'est pas prise en compte. Dans certaines stratégies de fenêtres de poids, les bornes des fenêtres sont déterminées par un flux adjoint [23, 35, 36] :

$$w_l = \frac{R}{\phi^*(x)} \frac{2}{C+1} \quad (2.113)$$

$$w_u = C w_l \quad (2.114)$$

$$R = \int \phi^*(x) q(x) dx \quad (2.115)$$

Il est bon de remarquer que cette définition du poids moyen souligne la proximité avec la méthode précédente. C'est cette méthode qui est actuellement utilisée pour le biaisage dans le code MCNP sous le nom de CADIS (Consistent Adjoint Driven Importance Sampling) [23]. Cette méthode est une extension et n'est pas librement disponible. Cette méthode est utilisée pour améliorer les encaissements pour un détecteur lors d'un calcul à source fixe. Une extension à plusieurs détecteurs a été réalisée par l'équipe de SCALE sous le nom de FW-CADIS (Forward Weighted Consistent Adjoint Driven Importance Sampling) [37] où la source de l'équation adjointe est déterminée par un calcul direct. L'extension de cette procédure aux calculs à valeurs propres est en cours de développement et un premier cas a été étudié [38].

Transformation exponentielle

Une alternative au splitting et à la roulette russe est la transformation exponentielle (ou pathstretching). Cela consiste à modifier la section efficace utilisée pour calculer le parcours du neutron.

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{E}) = \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{E})(1 - p\mu) \quad (2.116)$$

p est le paramètre de biaisage et μ est le cosinus de l'angle entre la direction de vol du neutron et la direction à privilégier. Dans le calcul à source fixe, on souhaite calculer la réponse d'un détecteur dont on connaît la position donc

μ est facilement accessible. Les fluctuations de poids liées à cette technique la rende difficile d'utilisation, notamment le choix de p est crucial dans ce schéma [27].

Redéfinition des noyaux

Les implémentations précédentes ont été développées pour le calcul à source fixe. Un système de biaisage spécifique à la criticité a été récemment développé [31, 39]. Ce système consiste à redéfinir les noyaux de collision et de transport à chaque appel. Cela permet de réduire la variance sur le k_{eff} . Cependant, le biaisage du noyau de transport apparaît coûteux car il est nécessaire de tracer la trajectoire jusqu'à la sortie du système à chaque appel. Le biaisage du noyau de collision semble être alors plus rentable.

Forward Weighted Consistent Adjoint Driven Importance Sampling

Comme évoqué un peu plus haut, l'extension du biaisage aux calculs de criticité [37, 38] a été testée très récemment à ORNL . L'idée principale de cette extension est de biaiser le calcul avec comme objectif d'échantillonner la géométrie de façon uniforme, ceci afin d'homogénéiser les variances calculées. Pour définir les paramètres de biaisage, deux calculs déterministes sont réalisés. Un calcul de criticité direct qui permet d'obtenir le taux de production du système. L'inverse de ce taux de production est ensuite utilisé comme source d'un calcul adjoint à source fixe. Enfin le flux adjoint ainsi calculé va servir à définir les paramètres de biaisage. Cette voie semble donner des résultats prometteurs, sur le cas test présenté, à savoir un quart de cœur en 2D avec un traitement à 8 groupes d'énergies. Ces études bénéficient grandement de l'environnement de couplage déjà réalisé pour les calculs à source fixe.

L'approche retenue dans les travaux de cette thèse s'inscrit dans cette même philosophie d'utilisation d'un pré calcul déterministe pour améliorer le calcul Monte Carlo. Avant de développer l'approche de ce couplage, le chapitre suivant détaille, sur la base d'exemples, la problématique de la convergence des sources de fission dans les calculs Monte Carlo à valeurs propres et résume les principales techniques d'échantillonnage déjà disponibles dans le code MORET.

Chapitre 3

Convergence des sources et critères de détection associés

Pour des systèmes peu couplés neutroniquement, la première phase de mise à l'équilibre des sources peut se révéler difficile. Ces difficultés peuvent se manifester en un temps conséquent à converger, une oscillation entre les deux premières valeurs propres du système ou, dans les cas les plus défavorables, en une fausse convergence vers un sous-système (pouvant conduire à une mauvaise estimation du k_{eff}). Afin de décrire ce problème, commençons par expliciter la vitesse de convergence du schéma numérique ainsi qu'un indicateur de cette convergence. Nous utiliserons cet indicateur pour valider et comparer les résultats des développements entrepris durant cette thèse.

3.1 Le ratio de dominance

Afin de simplifier l'approche, nous allons effectuer une étude formelle de la convergence [40]. Reprenons l'équation de transport aux valeurs propres sous forme d'opérateurs (1.7) :

$$(\mathbb{L} + \mathbb{T} - \mathbb{S})\phi = \frac{1}{k_{eff}}\mathbb{M}\phi \quad (3.1)$$

avec :

- \mathbb{L} : opérateur de fuites
- \mathbb{T} : opérateur de collision
- \mathbb{S} : opérateur de diffusion
- \mathbb{M} : opérateur de multiplication par fission

Cette équation est résolue par la méthode des puissances :

$$\phi^0 : \text{initialisation} \quad (3.2)$$

$$(\mathbb{L} + \mathbb{T} - \mathbb{S})\phi^{n+1} = \frac{1}{k_{eff}^n}\mathbb{M}\phi^n \quad (3.3)$$

Dans ce schéma, le terme de droite représente les sources de neutrons pour le calcul de l'étape $n + 1$. Un calcul Monte Carlo est effectué afin de déterminer le flux à l'étape $n + 1$ ainsi que la valeur propre. Ces grandeurs sont alors mises à jour pour expliciter les sources de l'étape $n + 2$. L'équation peut s'écrire, de manière formelle, sous la forme d'un problème aux valeurs propres :

$$\phi = \frac{1}{k_{eff}} F \phi \quad (3.4)$$

$$\phi^{n+1} = \frac{1}{k_{eff}^n} F \phi^n \quad (3.5)$$

$$k_{eff}^{n+1} = k_{eff}^n \frac{\int_V \mathbb{M} \phi^{n+1}}{\int_V \mathbb{M} \phi^n} \quad (3.6)$$

En notant u_i les fonctions propres de l'opérateur F et k_i les valeurs propres, la décomposition du flux à chaque itération s'écrit en fonction de la décomposition du terme initial (ϕ^0) ainsi que des valeurs et fonctions propres associées :

$$\phi^{n+1} = \left(\frac{k_0^{n+1}}{\prod_{i=0}^n k_{eff}^i} \right) a_0 \left(u_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_i}{a_0} \left(\frac{k_i}{k_0} \right)^{n+1} u_i \right) \quad (3.7)$$

$$k_{eff}^{n+1} = k_0 \frac{1 + \sum_i \frac{a_i}{a_0} \left(\frac{k_i}{k_0} \right)^{n+1} b_i}{1 + \sum_i \frac{a_i}{a_0} \left(\frac{k_i}{k_0} \right)^n b_i} \quad (3.8)$$

$$a_i = \int_V \phi^0 u_i \quad (3.9)$$

$$b_i = \frac{\int_V \mathbb{M} u_i}{\int_V \mathbb{M} u_0} \quad (3.10)$$

Notons $\rho = \frac{k_1}{k_0}$ le rapport des deux premières valeurs propres, appelé rapport (ou ratio) de dominance du système. En ne conservant que les termes d'ordre 1 des séries et du développement limité, ces équations deviennent :

$$\phi^n = \frac{k_0^{n+1} a_0}{\prod_{i=0}^n k_{eff}^i} \left(u_0 + \frac{a_1}{a_0} \rho^n u_1 \right) \quad (3.11)$$

$$k_{eff}^n = k_0 \left(1 + \frac{a_1}{a_0} \rho^{n-1} (\rho - 1) b_1 \right) \quad (3.12)$$

La vitesse de convergence du schéma numérique est liée au rapport de dominance. En effet, plus celui-ci sera proche de 1 plus la convergence sera lente. Lorsque ce rapport approche 1, la convergence du k_{eff} est plus rapide que celle des sources ($\rho - 1$ tend vers 0). Le rapport de dominance n'est connu analytiquement que dans quelques cas (cœur nu, plaque infinie, ...). Il est cependant possible de l'estimer grâce au calcul de la matrice de fission.

Cette analyse est celle du schéma d'itérations, et n'est exacte que pour les méthodes déterministes. Pour les méthodes Monte Carlo, d'autres problèmes peuvent se rajouter à celui de la convergence de la méthode des puissances, par exemple un sous-échantillonnage ou une dépendance à la suite de nombres aléatoires. Ces difficultés résultent non seulement de la corrélation induite entre générations mais aussi du fait que la méthode repose sur l'utilisation de variables aléatoires. Elles apparaissent dans des systèmes dont le ratio de dominance est fort, notamment pour les systèmes neutroniquement peu couplés ou de grandes dimensions. La mise en pratique de la méthode de Monte Carlo fait apparaître l'importance cruciale de la distribution initiale (donnée par l'utilisateur) pour la convergence des solutions. Le nombre de cycles pour atteindre la convergence est déterminé par le ratio de dominance et la « distance » entre la distribution initiale et la distribution convergée.

3.2 L'entropie de Shannon

Comme détaillé dans la partie précédente, la convergence des sources ne peut pas être considérée comme atteinte par la seule observation du coefficient de multiplication effectif. En effet, la convergence du k_{eff} étant plus rapide que celle des sources, un k_{eff} peut être convergé alors que les sources ne le sont pas. Il est alors utile de disposer d'un indicateur de la convergence du flux.

L'entropie de Shannon, issue de la théorie de l'information, va permettre de caractériser cette convergence sous la forme d'une seule grandeur calculée à chaque génération de neutrons [41, 42]. La thèse présentée ici a permis l'implémentation du calcul de l'entropie de Shannon dans le code MORET.

La courbe de l'entropie de Shannon tracée en fonction des générations est plus facile à interpréter que le tracé de la distribution de neutrons en fonction des générations. Notons H_{src} cette grandeur. Pour calculer H_{src} , il nous faut superposer sur la géométrie une grille qui englobe l'ensemble des régions fissiles, puis compter le nombre de fissions par génération qui se produit dans chaque case de cette grille. En notant P_j le rapport entre nombre de fissions dans la case j et le nombre de fissions total et N le nombre total de cases de la grille superposée, l'entropie de Shannon s'obtient grâce à :

$$H_{src} = - \sum_{j=1}^N P_j \ln(P_j) \quad (3.13)$$

L'entropie varie de 0, pour une distribution ponctuelle, à $\ln(N)$ pour une distribution uniforme. Pour le cas où la case j ne contient pas de fission, on considérera que $P_j \ln(P_j)$ vaut 0.

Prenons l'exemple concret d'une piscine d'entreposage d'éléments combustibles avec un double chargement d'assemblages, cf figure (3.1). Un double chargement correspond à la présence d'un assemblage supplémentaire placé en contact d'un autre pour maximiser la réactivité à l'endroit choisi (configuration standard dans une étude de sûreté-criticité).

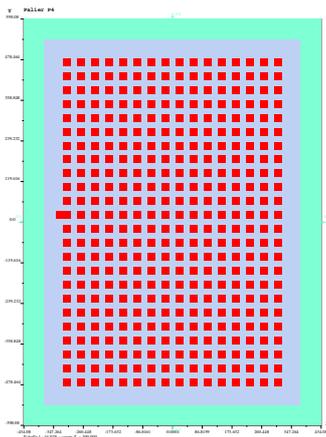


FIGURE 3.1 – Géométrie d'une piscine de stockage avec un double chargement d'assemblages

Les figures (3.2) et (3.3) représente respectivement l'estimation du k_{eff} en fonction du nombre d'étapes pris en compte et en fonction du nombre d'étapes initiales enlevées. Les courbes bleus représentent l'incertitude autour du k_{eff} et la valeur en rouge représente la moyenne de l'estimateur du k_{eff} . Afin d'obtenir la meilleure estimation possible il conviendrait de retirer les 59 premières étapes. La courbe représentant l'entropie de Shannon (fig 3.4) en fonction des étapes met en évidence un gros transitoire jusqu'à environ 70 étapes. Mais contrairement aux courbes du k_{eff} , la stabilité ne semble pas être atteinte à ce moment là. La distribution semble se stabiliser autour de 200 étapes. Le critère sur l'entropie de Shannon permet de mieux caractériser la convergence locale que celui sur le k_{eff} car il repose sur les sources de fission. Afin de pouvoir quantifier cette stabilité, il serait appréciable de pouvoir utiliser un critère mathématique. C'est ce que nous allons mettre en place dans le chapitre 5 avec l'utilisation d'un test statistique de stationarité basé sur la moyenne du pont de Student.

Pour rappel, les critères d'arrêt des calculs de criticité ne sont basés, à ce jour, que sur la convergence du k_{eff} . Cette approche peut s'avérer pénalisante en particulier pour les calculs couplant des calculs Monte Carlo et d'évolution.

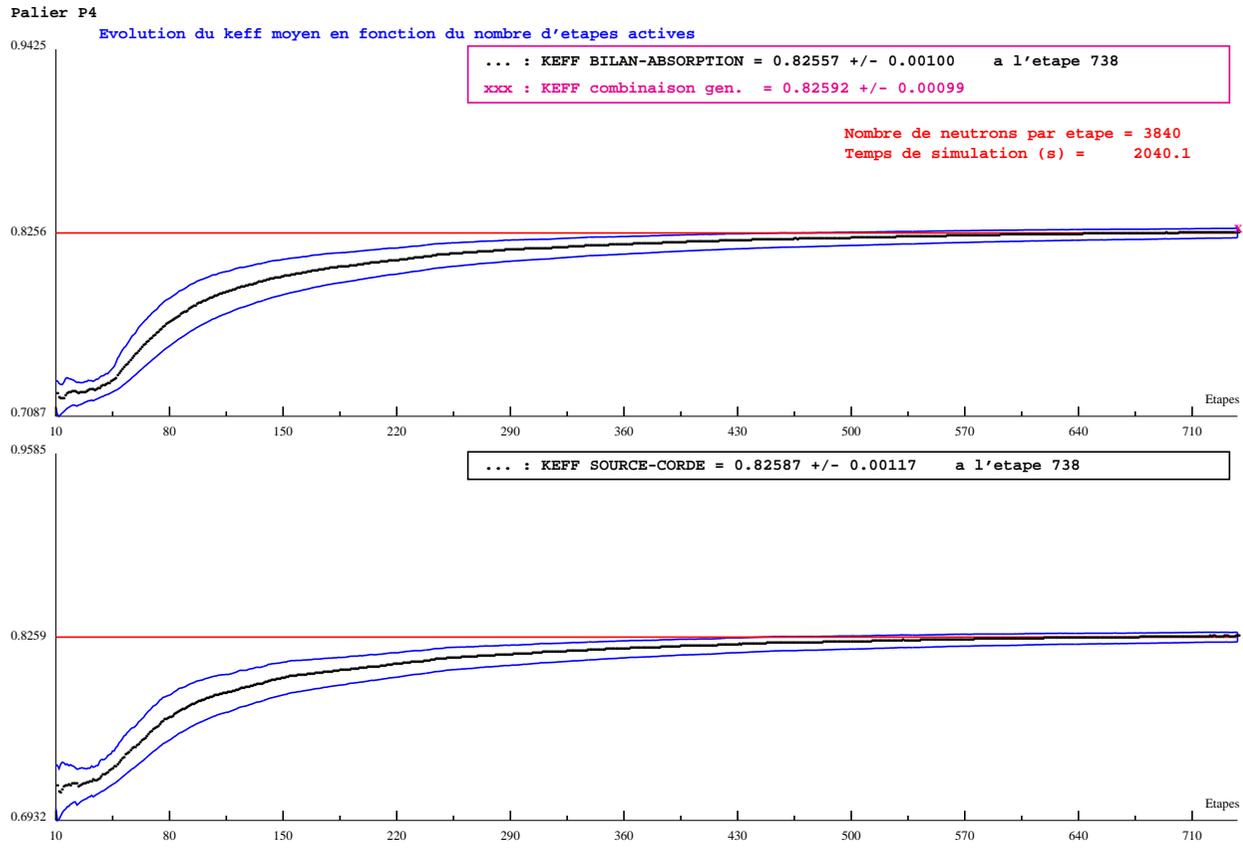


FIGURE 3.2 – Evolution du K_{eff} en fonction du nombre d'étapes pour différents estimateurs

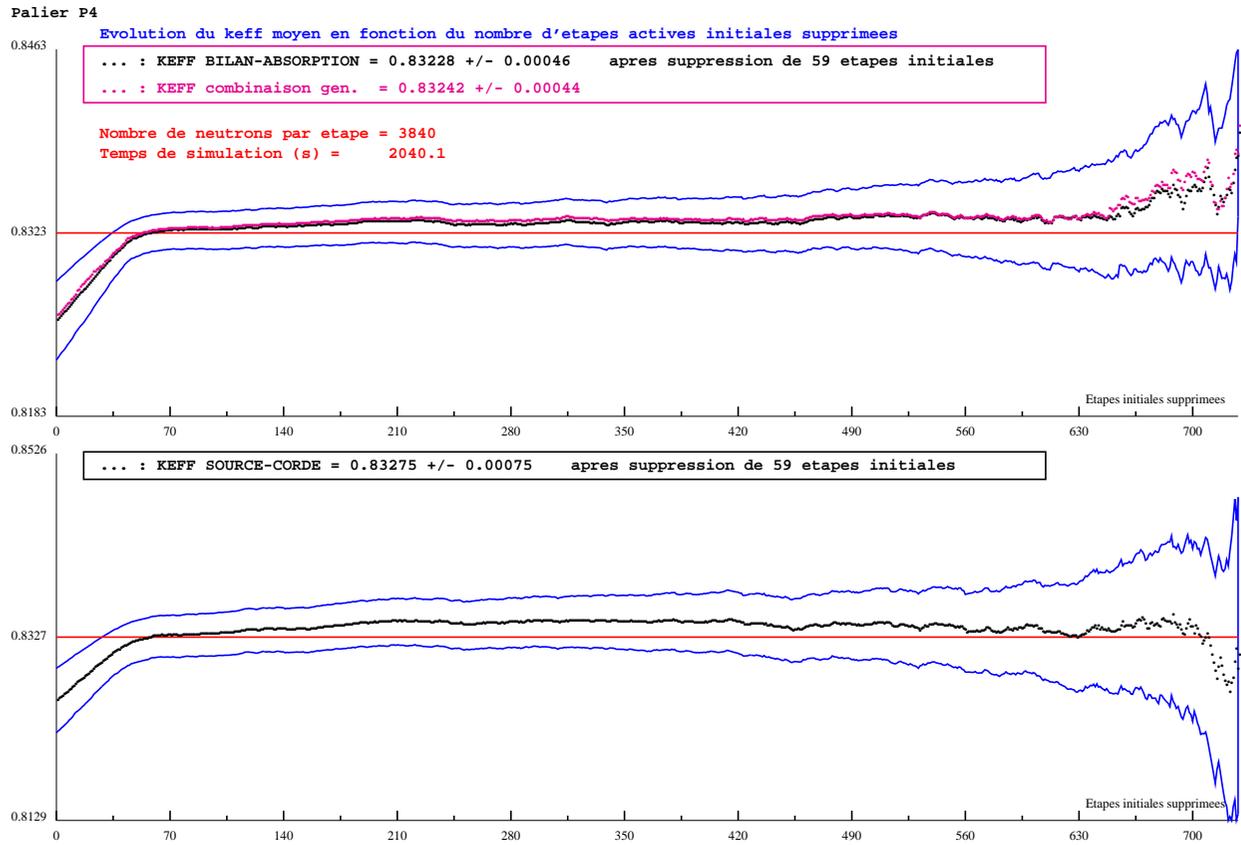


FIGURE 3.3 – Evolution du k_{eff} en fonction du nombre d'etapes initiales supprimées de l'estimation pour différents estimateurs

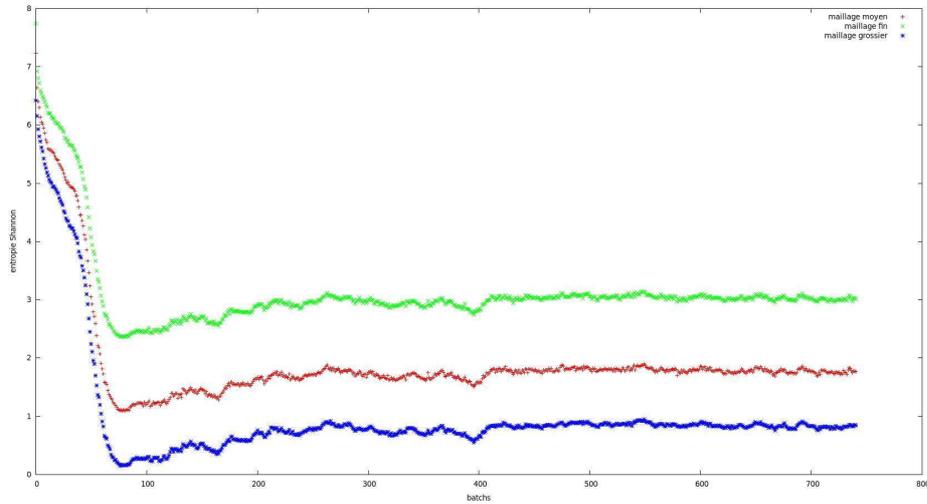


FIGURE 3.4 – Évolution de l’entropie de Shannon en fonction du nombre d’étapes pour une piscine de stockage avec différentes tailles de maillages

Enfin une dernière remarque, l’entropie de Shannon n’est qu’un indicateur de convergence, ce qui signifie qu’une entropie convergée n’assure pas une convergence du flux. Cette mise en défaut a été soulignée dans [43].

3.3 Problématiques de convergence

3.3.1 Le placement de la première génération

Pour les systèmes neutroniquement peu couplés, la distribution initiale joue un rôle important. Reprenons l’exemple décrit en introduction, celui d’un transport d’assemblages fortement irradiés, dont les extrémités du crayons sont les plus réactives. Les assemblages sont chemisés d’absorbant neutronique assurant leur découplage et donc la sous-criticité du système (fig 3.5). C’est un exemple très visuel permettant de mettre en évidence un potentiel problème de sûreté.

Nous avons vu que pour le premier cas, la convergence est bonne et rapide. Le second présente une convergence beaucoup plus lente vers le k_{eff} . Le troisième cas met en évidence une fausse « convergence » vers un sous-système entraînant une sous-estimation de la valeur du k_{eff} . Il est aussi important de rappeler que la convergence, dans ce cas, est suffisamment lente pour passer les tests de stationnarité. Cet exemple illustre les problématiques

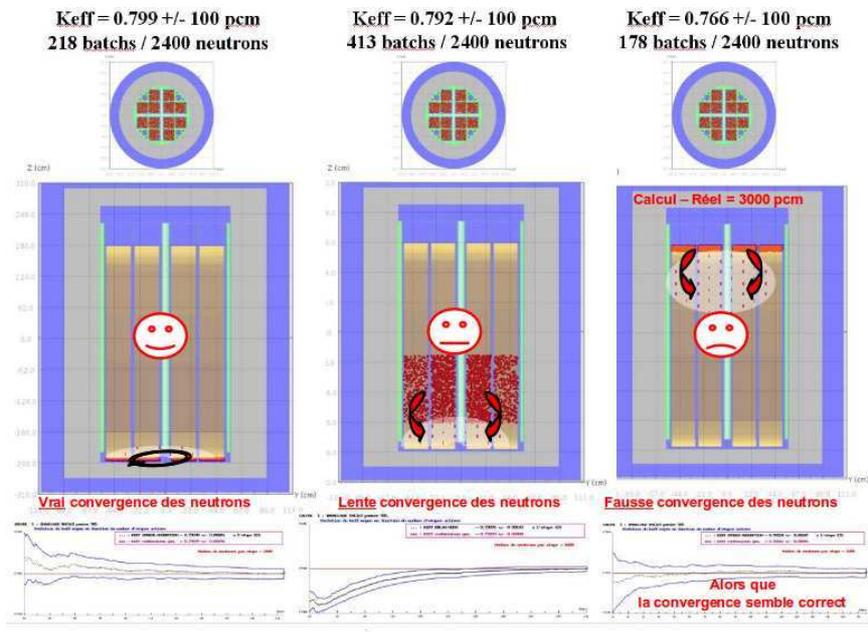


FIGURE 3.5 – Exemple de fausse convergence

liées au placement de la première génération des sources de fission. Nous allons maintenant voir que la convergence peut poser d'autres problèmes liés au maintien de la solution sur le mode fondamental.

3.3.2 Maintien de la solution numérique sur le mode fondamental

La convergence des grandeurs locales (flux ou taux de réaction) est plus lente que celle du k_{eff} . D'autre part, un fort ratio de dominance peut poser des soucis pour maintenir la solution numérique sur le mode fondamental et ainsi biaiser l'estimation des grandeurs locales. Une grandeur locale désigne ici un encaissement sur un volume de la géométrie. Prenons pour autre exemple un benchmark, issu d'un rapport de l'AEN [9]. Cette configuration est composée de deux unités fissiles découplées par de l'eau. Les largeurs du volume d'eau et du second volume fissile sont variables. Le tableau (3.1) résume la composition isotopique des différents milieux.

La figure (3.6) représente la géométrie du problème. Les volumes fissiles 1 et 2 ont la même composition mais pas nécessairement la même largeur.

Intéressons nous au cas symétrique, qui correspond au cas avec deux volumes fissiles de 20 cm de large séparés par 30 cm d'eau (dimension si-

Solution d'uranyle	
H	5.9347E-02
N	2.1220E-03
O	3.7258E-02
^{235}U	7.6864E-05
^{238}U	6.8303E-04
Eau	
H	6.6658E-02
O	3.3329E-02

TABLE 3.1 – Composition des milieux (at/b-cm)

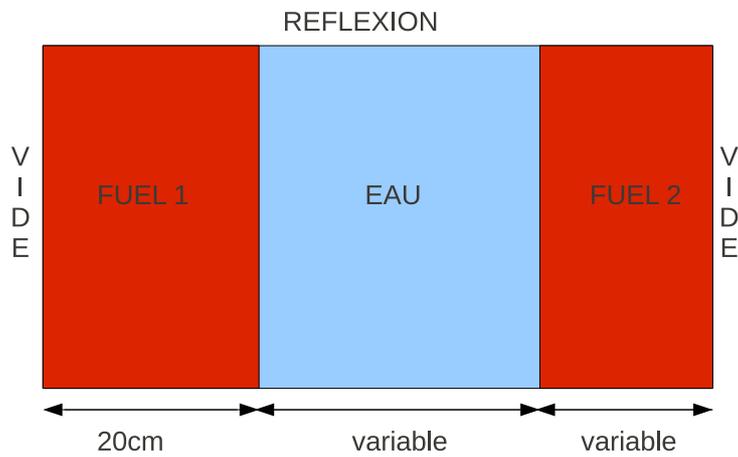


FIGURE 3.6 – Géométrie du cas test

gnificative en regard du libre parcours moyen des neutrons). Les calculs ont été réalisés avec 2000 neutrons par génération, aucune étape passive et 600 étapes actives. La distribution initiale, placement de la première génération, est réalisée de façon uniforme dans les volumes fissiles.

Pour ce cas, le ratio de dominance calculé est de 0.997, soit très proche de l'unité [9]. Ceci induit une convergence extrêmement lente pour le flux. Le cas étant symétrique, le flux et les taux de production par fission sont sensés être symétriques. Cependant, la dispersion des résultats est importante, comme le montre la figure (3.7). Pour cette figure, le calcul a été répété 70 fois avec des chaînes de nombres aléatoires différentes. Il est bon de remarquer que la distribution ne semble pas gaussienne ni symétrique.

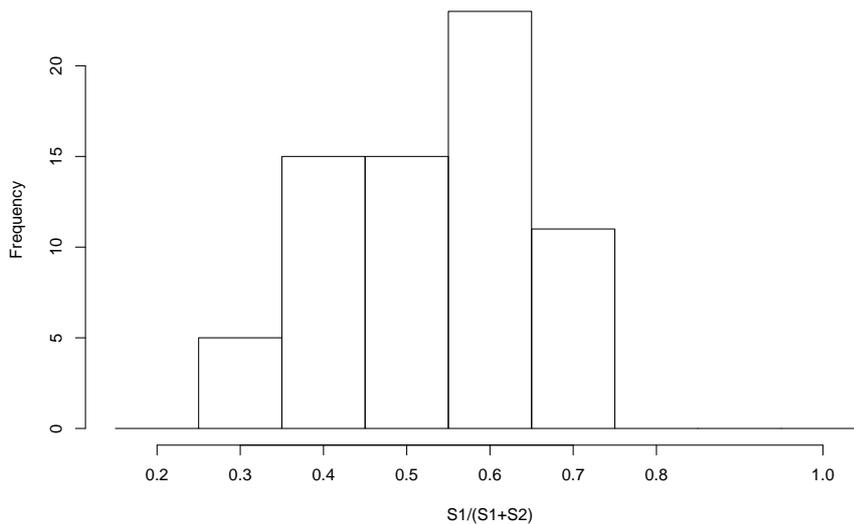


FIGURE 3.7 – Histogramme du rapport des taux de production pour 70 aléas pour la simulation naturelle et une initialisation uniforme

L'écart type estimé sur ces 70 simulations est de 0.1159, et la moyenne est de 0.51722 (la valeur attendue est 0.5 compte tenu de la symétrie). Les limites de construction de l'histogramme sont 0.25, 0.35, 0.45, 0.55, 0.65, 0.75, 0.85.

La figure (3.8) représente le taux de production par fission normalisé du volume 1 en fonction du numéro d'étape pour un calcul ainsi que la valeur théorique (en rouge).

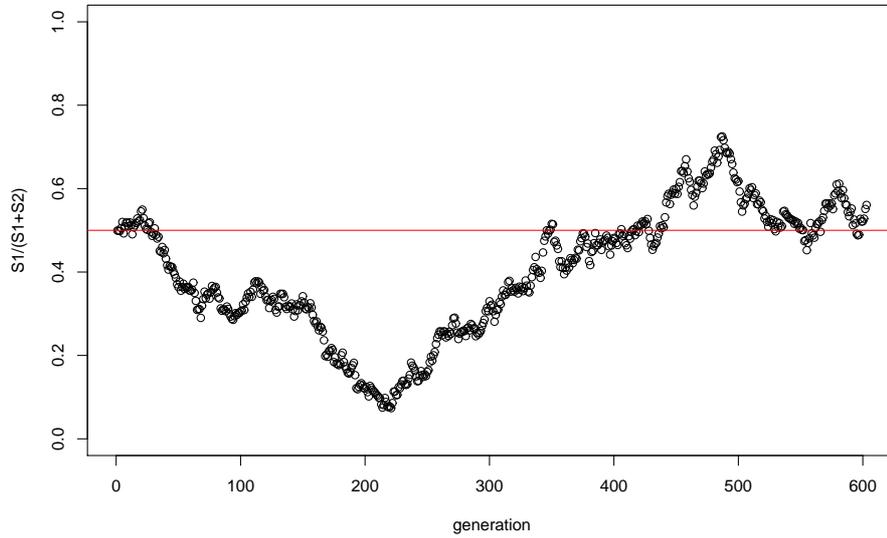


FIGURE 3.8 – Taux de production normalisé en fonction des étapes pour une simulation naturelle

Remarquons que ce ratio ($S1/(S1+S2)$), qui sert à échantillonner les sites de naissance des neutrons, est pour certaines étapes très loin de la valeur théorique (0.5) tracée en rouge. Les premières valeurs, très proches de 0.5, suggèrent que le flux se trouve sur le mode fondamental, ou en tous cas n'en est pas très éloigné. Au fur et à mesure que les générations s'accumulent le ratio s'éloigne de la valeur théorique, ce qui laisse à penser que le flux s'éloigne du mode fondamental. Cet éloignement apparaît du fait d'un sous-échantillonnage, c'est-à-dire que le nombre de neutrons par étape est insuffisant pour rester sur le mode fondamental et la variabilité due aux méthodes Monte Carlo fait réapparaître des harmoniques. C'est d'ailleurs une des grandes questions du Monte Carlo pour la simulation de particules que de déterminer le nombre de neutrons nécessaire par étape pour rester sur le mode fondamental ainsi que le nombre d'étapes à simuler.

Influence du nombre de neutrons par étape

À des fins de comparaison, regardons la dispersion obtenue avec 10 000 neutrons simulés par étape. Le découpage de l'entropie de Shannon est de 70 mailles selon les abscisses (axe X). La dispersion construite pour 70 chaînes

différentes de nombres aléatoires est décrite par l'histogramme (3.9).

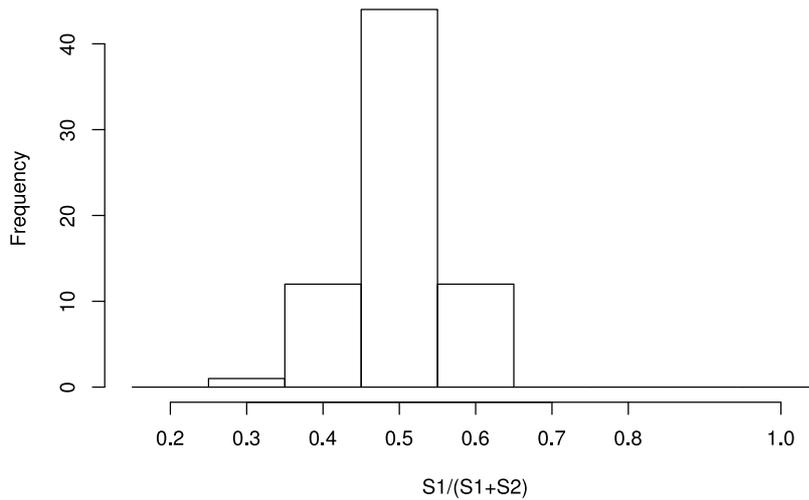


FIGURE 3.9 – Histogramme du rapport des taux de production avec 10 000 neutrons par étape

Avec ce nombre de neutrons par étape, la répartition est conforme à nos attentes. Pour cet échantillon, la moyenne est de 0.4930 et l'écart type de 0.0562. Le tracé des maximum et minimum par étape de l'entropie de Shannon pour les 70 calculs, figure (3.10), permet de quantifier la dispersion des différents échantillonnages des sites de fission à chaque étape [44]. Plus précisément, pour chaque étape, nous disposons de 70 valeurs d'entropie, le maximum et le minimum de cette étape apparaissent sur la figure. Les valeurs de deux étapes consécutives ne sont ainsi pas nécessairement extraites du même calcul. Cela fournit un bon encadrement de la répartition de l'entropie vis-à-vis de la chaîne de nombres aléatoires.

La dispersion est en effet bien moindre que lors du calcul avec 2000 neutrons. Cela indique que le nombre de neutrons permettant d'obtenir une statistique satisfaisante pour décrire les grandeurs locales est approché. Nous pouvons remarquer que les maxima des entropies de Shannon se superposent, et que la réduction de la dispersion se fait vers ce maximum. Ce qui laisse à penser que le maximum représente l'entropie de la solution théorique. Il est important de remarquer qu'augmenter le nombre de neutrons par étape n'augmente en aucun cas la vitesse de convergence, cela permet juste de

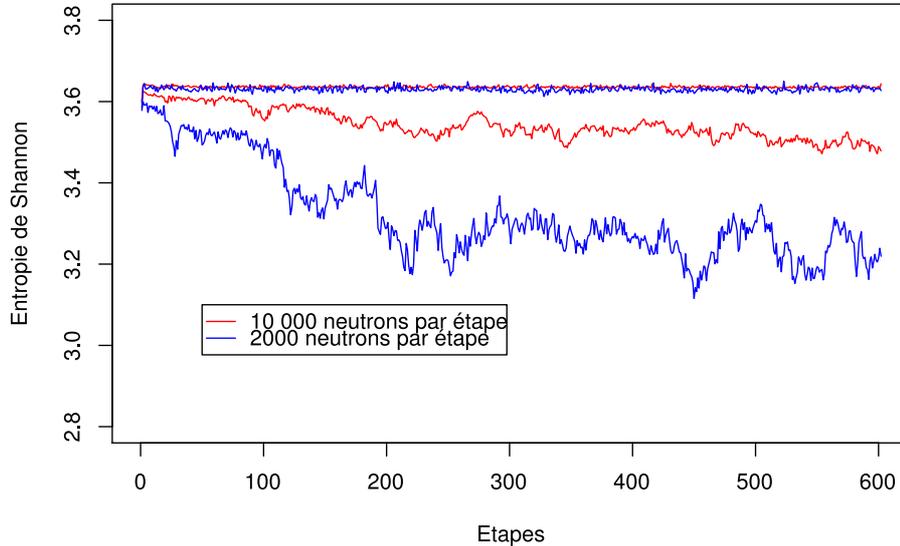


FIGURE 3.10 – Maximum et minimum des entropies de Shannon

mieux décrire le mode fondamental. Ce qui est logique puisque le nombre de neutrons par étape n'intervient pas dans la vitesse de convergence.

Cependant, augmenter le nombre de neutrons simulés requiert une augmentation des ressources de calcul, ce qui n'est pas toujours réalisable. Ainsi des méthodes alternatives ont été développées afin d'améliorer la convergence, et d'éviter les problèmes d'échantillonnage ou de biais dus aux corrélations cycle à cycle. Nous allons faire une revue rapide de ces méthodes dans la partie suivante.

3.4 Amélioration de la convergence des sources

Comme évoqué dans la partie 3.3.1, une mauvaise convergence peut conduire à un biais dans les estimations du k_{eff} . Plusieurs méthodes ont déjà été développées afin d'améliorer la convergence des sources. Nous procédons ici à une revue des méthodes dans le code MORET [45].

3.4.1 Échantillonnage Stratifié

Cette méthode s'attache à améliorer l'échantillonnage des sites de naissance des neutrons d'une génération. Classiquement, les sites de naissance

des neutrons d'une génération i sont sélectionnés dans une liste de sites de collision de l'étape $i - 1$ donnant lieu à une fission. La distribution des sites de fission est échantillonnée selon la distribution suivante :

$$f(V) = \frac{\int_V \nu \Sigma_f \phi}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi} \quad (3.14)$$

La procédure pour sélectionner le site de fission utilisé pour le neutron suivant est de tirer un nombre aléatoire selon une loi uniforme : le volume, \tilde{V} , dans lequel naît le neutron est alors le premier volume qui vérifie

$$\xi < \sum_{V < \tilde{V}} f(V) \quad (3.15)$$

$$\xi \in \mathcal{U}(0, 1) \quad (3.16)$$

La spécificité de la méthode de l'échantillonnage stratifié réside dans le fait de modifier cette façon de choisir les sites. La distribution utilisée reste la même, mais au lieu de tirer aléatoirement dans les sites de fission, la quantité de neutrons à faire naître dans chaque volume V , en notant $\mathcal{N}_{neutrons}$ le nombre de neutrons simulés par étape, est imposée par :

$$\mathcal{N}_{neutrons} \times \frac{\int_V \nu \Sigma_f \phi}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi} \quad (3.17)$$

Cette sélection permet d'éviter des problèmes de volumes « oubliés », notamment pour les volumes contenant peu de sites de fission. En effet un volume contenant peu de neutrons en regard du reste de la géométrie peut ne pas contenir de sites de naissance pour la génération suivante à cause de tirages au sort défavorables. Elle permet aussi d'éviter une sur ou une sous-représentation d'un volume.

Le nombre calculé n'a aucune raison d'être entier. Le nombre de neutrons à naître est alors donné par

$$N_V = \lfloor \mathcal{N}_{gene} \times f(V) + r \rfloor \quad (3.18)$$

$$r \equiv \mathcal{U}(0, 1)$$

$\lfloor \cdot \rfloor$ = partie entière

Le poids modifié des neutrons, dans un volume V , est alors

$$w_V = \frac{1}{N_V} \times \frac{\int_V \nu \Sigma_f \phi}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi} \quad (3.19)$$

Cette technique peut permettre d'imposer un minimum de neutrons par volume fissile. Cette démarche peut être utile si la géométrie présente des volumes fissiles de petites dimensions. Cependant, cette contrainte requiert

au moins un site de fission par volume, ce qui n'est pas forcément le cas. Une des stratégies (celle adoptée par le code MORET) est de considérer tous les sites de collision comme de potentiels sites de fission. Cette approche des sites de collision est aussi liée à des problèmes de réduction de variance : en effet, la fission est un évènement rare en comparaison des collisions.

3.4.2 Super-histoire

La méthode dite de Super-histoire est apparue en 1986 à travers la publication de R. J. Brissenden et A. R. Garlick [46]. Les auteurs ont identifié que la normalisation de la population neutronique à chaque génération, requise par l'algorithme Monte Carlo, introduit un biais dans l'estimation du k_{eff} et du flux. Cette méthode a été développée afin d'atténuer ces biais en réduisant les corrélations cycle à cycle, ce qui permet également d'améliorer l'estimation de la variance.

L'idée de cette méthode est de laisser « évoluer librement » le système pendant ℓ générations ($\ell \sim 10$). Cela revient à simuler des neutrons « pères » de leur naissance à leur mort puis de simuler leur descendance durant ℓ générations. Les sites de fission choisis pour commencer la génération suivante sont les sites réels de fission des neutrons de la génération courante. En revanche les sites potentiels de fission pour l'étape suivante sont stockés lors de la dernière génération d'une étape et reposent sur les sites de collision.

L'absence de renormalisation implique que la population peut croître ou diminuer pendant ces générations. Autrement dit, cela revient à utiliser une normalisation toutes les ℓ étapes. La simulation classique peut alors être vue comme une simulation Super-histoire avec $\ell = 1$. Une référence utile sur cette méthode et ce qu'elle peut apporter est [47].

Cette méthode, comme celle présentée dans le paragraphe suivant, présente l'avantage de permettre artificiellement aux neutrons une exploration plus étendue dans la géométrie, permettant ainsi (théoriquement) de minimiser les problèmes liés aux faibles couplages.

3.4.3 Méthode de Wielandt

La méthode de Wielandt est une technique d'accélération des méthodes déterministes bien connue qui a fait l'objet d'une adaptation au calcul Monte Carlo [48]. En retranchant le même terme de chaque coté de l'équation (3.1), l'équation de transport se met sous la forme

$$(\mathbb{L} + \mathbb{T} - \mathbb{S} - \frac{1}{k_e}\mathbb{M})\phi = (\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_e})\mathbb{M}\phi \quad (3.20)$$

Le choix de k_e est laissé libre avec la condition $k_e > k_{eff}$. L'équation précédente a les mêmes vecteurs propres que l'équation (3.1) mais les valeurs propres sont décalées permettant ainsi de réduire le ratio de dominance. Le ratio de dominance devient alors :

$$\rho' = \rho \frac{k_e - k_0}{k_e - k_1} \quad (3.21)$$

Rappelons que k_0 est la plus grande valeur propre, k_1 la seconde valeur propre et $\rho = \frac{k_1}{k_0}$ le ratio de dominance. La mise en pratique de cette réécriture est similaire à la méthode Super-histoire. Au sein d'une même étape, plusieurs générations vont être simulées. Lorsqu'un neutron produit une fission, un neutron « fils » sera simulé avec la probabilité

$$w \frac{\Sigma_f \nu}{\Sigma_t k_e} \quad (3.22)$$

La condition $k_e > k_{eff}$ assure que la chaîne suivie va se terminer. Un estimateur classique du k_{eff} donne :

$$k_w = \left(\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_e} \right)^{-1}$$

Le k_{eff} est alors retrouvé par

$$k_{eff} = \frac{k_e k_w}{k_e + k_w} \quad (3.23)$$

Quelques points divergent cependant de la méthode Super-histoire : les sites potentiels de fission pour l'étape suivante sont échantillonnés dans toutes les générations simulées durant l'étape courante (et non uniquement la dernière) et la population neutronique décroît totalement à chaque étape.

3.4.4 Matrice K_{ij}

Cette méthode modifie l'échantillonnage entre deux générations. Le vecteur propre de la matrice de fission (matrice K_{ij}) est utilisé comme distribution des neutrons source pour la prochaine étape. En effet, la plus grande valeur propre est k_{eff} et le vecteur propre associé est le mode fondamental. L'élément (i,j) de la matrice de fission est défini comme le nombre de neutrons produits par fission dans le volume i par un neutron émis dans le volume j.

La méthode naturelle est la plus simple de toutes les méthodes d'itération des sources implémentées dans le code MORET 5, et est la méthode par défaut. Elle montre certaines insuffisances, qui peuvent se révéler problématiques dans certains cas particuliers, et que les autres méthodes, plus

élaborées, tentent de palier. Des investigations, sur leur domaine d'efficacité, sont encore en cours au niveau international. Nous allons maintenant présenter les méthodes envisagées lors du couplage entre le code MORET et le code DRAGON et la nouvelle stratégie de couplage développée dans le cadre de cette thèse.

Chapitre 4

Couplage Déterministe - Monte Carlo

Dans ce chapitre, nous allons expliciter l'utilisation du flux adjoint déterministe dans le calcul Monte Carlo et la façon dont le couplage a été réalisé. Une part également importante de ce chapitre concerne la validation des nouveaux développements proposés et implémentés dans le code MORET.

Ce chapitre dédié au couplage déterministe Monte Carlo mis en œuvre durant cette thèse s'articule ainsi :

- la partie 4.1 est une présentation générale du couplage étudié
- la partie 4.2 présente les modifications apportées dans la simulation Monte Carlo
- la partie 4.3 détaille la syntaxe de couplage
- les parties 4.4 et 4.5 sont dédiées à la validation à travers deux cas, dont les adjoints ont été produits selon différentes méthodes (S_n et diffusion)

4.1 Mise en place du couplage

Le code Dragon a été retenu pour les calculs déterministes. Il permet de réaliser des calculs de transport direct et adjoint. Dans le schéma de calcul défini, les sections efficaces macroscopiques sont produites pour un milieu homogène infini. La figure (4.1) représente de manière schématique le couplage réalisé.

Le couplage a été réalisé en utilisant les mêmes sections macroscopiques multigroupes pour les calculs Monte Carlo et déterministe. Cependant, l'utilisation d'un calcul à énergie continue en Monte Carlo pourra être envisagé comme perspective à ce travail.

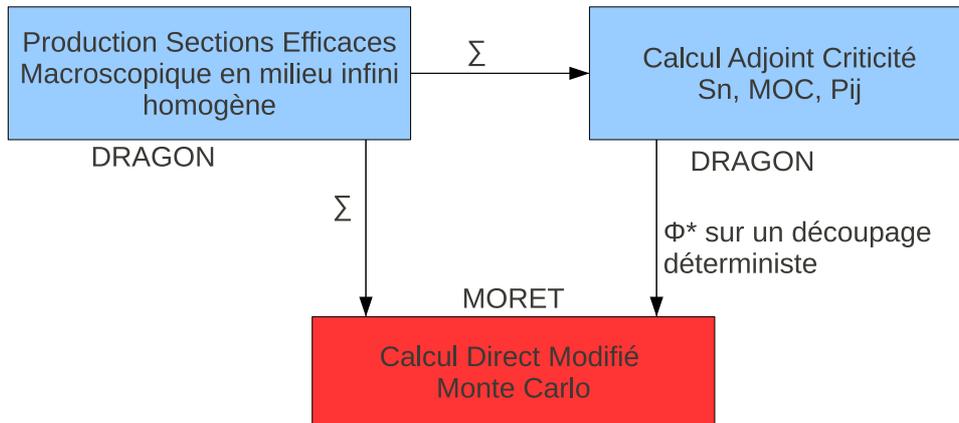


FIGURE 4.1 – Schéma résumant le couplage DRAGON-MORET

Le couplage ci-dessus requiert plusieurs contraintes. Premièrement, la modélisation nécessite d’être faite deux fois, une pour le calcul Monte Carlo, et la seconde pour le calcul déterministe, ce qui en cas d’utilisation intensive peut être lourd et source d’erreur. L’idéal serait de pouvoir utiliser une géométrie commune pour les calculs Monte Carlo et déterministe, comme exploré dans [24] ou de réaliser un environnement de couplage dédié comme fait pour le couplage MCNP/TORT [23].

Le modèle déterministe nécessite d’être redécrit de façon simplifiée dans le jeu de données Monte Carlo. Une démarche plus industrielle serait de développer des routines permettant d’aller lire et analyser directement le jeu de données DRAGON à partir du code MORET. Un tel développement simplifierait grandement l’utilisation. L’investissement nécessaire à une telle automatisation n’était pas compatible avec la durée de cette thèse.

À ce jour, le couplage se déroule de la façon suivante : lancer le jeu de données DRAGON, extraire le flux adjoint du fichier de sortie grâce à un script *recup_adjoint_dragon.pl* et le mettre dans un fichier *jdd.af*. Le script *moret.py* (qui lance le code MORET) a été modifié pour prendre en argument le fichier contenant le flux adjoint. Ce déroulement pourrait assez facilement être automatisé par le script *moret.py* sur la base de ce qui existe pour la production de sections efficaces par DRAGON.

4.1.1 Calcul du flux adjoint avec le code DRAGON

Le code DRAGON nous permet de résoudre l’équation de transport adjointe. Pour cela, il faut utiliser le module T : après la production des sections

macroscopiques [49]. Ce module nous permet ensuite d'utiliser le même solveur que pour les calculs directs. Afin de comprendre ce qui permet cette double utilisation, mettons en regard les équations directe et adjointe. Elles s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned}
-\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi^*(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = & \quad (4.1) \\
\int_{4\pi} d^2\mathbf{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mathbf{\Omega}' \leftarrow \mathbf{\Omega}) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') \\
+ \frac{1}{k_{eff}} \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{J_{fiss}} \nu_{\Sigma_{f,j}}(\mathbf{r}, E) \int \chi_j(E') \phi^*(\mathbf{r}, E') dE'
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = & \quad (4.2) \\
\int_{4\pi} d^2\mathbf{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}') \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') \\
+ \frac{1}{k_{eff}} \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{J_{fiss}} \chi_j(\mathbf{r}, E) \int_0^\infty \nu_{\Sigma_{f,j}}(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E') dE'
\end{aligned}$$

En comparant ces deux équations, les indices de transferts sont inversés, ce qui veut dire (pour un système de spectre thermique) que dans le cas adjoint, les « diffusions » se font des groupes thermiques vers les groupes rapides. Le spectre de fission et la section de production par fission (ν_{Σ_f}) sont échangés. Afin de pouvoir utiliser le même solveur, il faut se ramener à un système à diagonale descendante. Pour cela, la numérotation des groupes est inversée, du thermique vers le rapide, la matrice de diffusion est transposée. Enfin le spectre de fission et la section de production sont échangés. C'est ce que le module **T** : nous permet de faire. Ensuite, le module **FLU** : reconnaît selon la macrolib transmise s'il s'agit d'un calcul direct ou adjoint et ajuste en fonction le terme de transport. Le module **EDI** : réordonne le flux adjoint de manière classique (le groupe 1 étant le groupe rapide) avant de l'imprimer. L'enchaînement des modules de DRAGON est résumé par le graphique (4.2).

4.1.2 Repérage dans la géométrie déterministe

Afin de ne pas imposer au calcul Monte Carlo une géométrie déterministe et perdre ainsi un de ses avantages, le choix a été fait d'utiliser une routine de repérage à chaque fois que l'on a besoin des coordonnées déterministes. Dans DRAGON, les volumes sont numérotés par un seul numéro. La correspondance se fait par un système de repérage de la maille puis de la sous-géométrie. Le schéma (4.3) illustre la numérotation des volumes de la géométrie suivante :

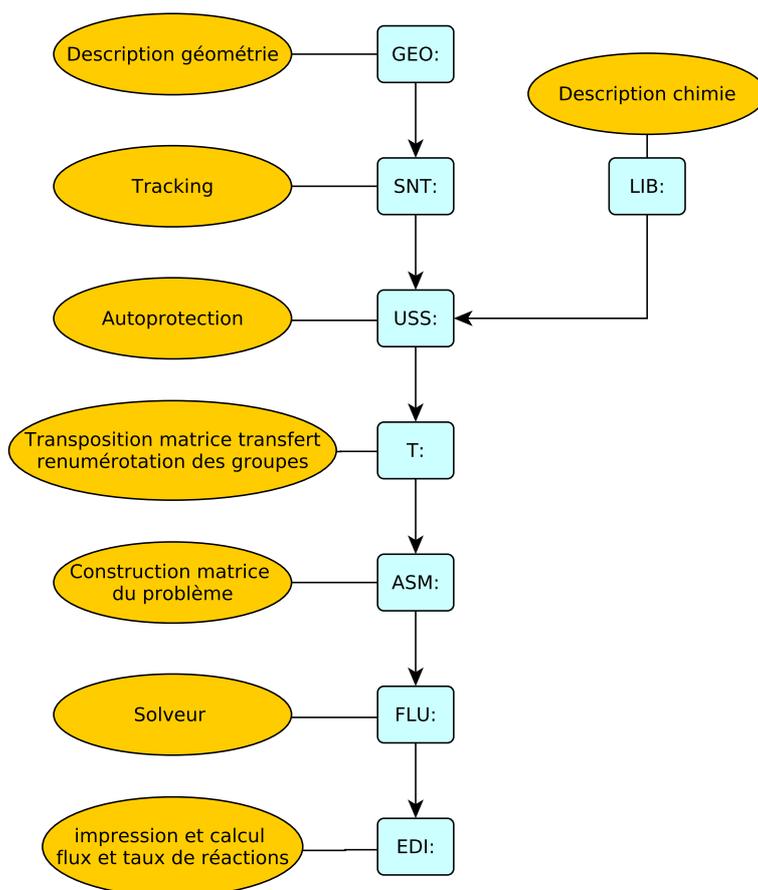


FIGURE 4.2 – Enchaînement des modules DRAGON pour un calcul de flux adjoint

```

GEOM := GEO: CAR2D 2 2
CELL
C1 C2
C2 C1
::: C1 := GEO: CAR2D 2 2
::: C2 := GEO: CARCEL 2
;

```

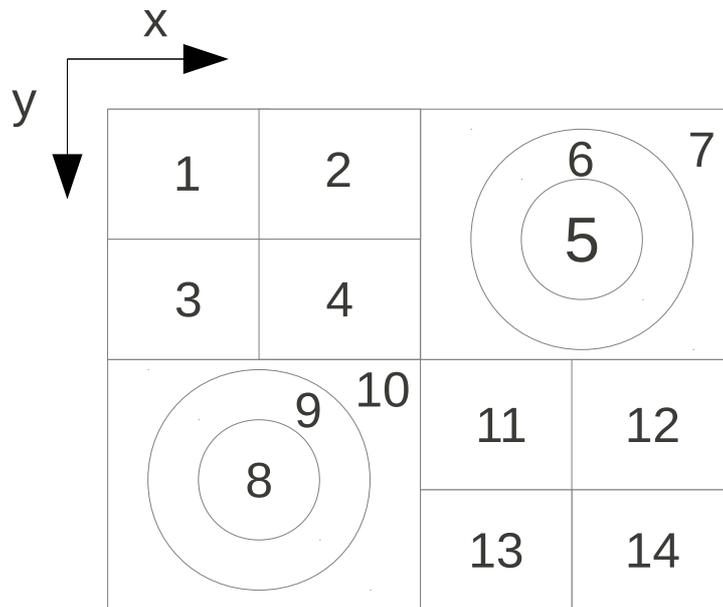


FIGURE 4.3 – Numérotation des volumes dans DRAGON

Ainsi à partir des coordonnées Monte Carlo, la cellule à laquelle appartient le neutron est déterminée, puis le numéro global dans la géométrie cellule est déterminé.

Pour des raisons de clarté, dans la suite de ce chapitre, les flux (ou flux adjoints) obtenus par un code déterministe seront indicés par *det* et les flux obtenus lors du calcul Monte Carlo seront indicés par *mc*.

Nous allons maintenant décrire les modifications de la simulation Monte Carlo étudiées dans ce travail de thèse.

4.2 Modifications apportées à la simulation Monte Carlo

4.2.1 Initialisation du terme source

Comme souligné à la partie 3.3.1, la distribution initiale joue un rôle important dans la convergence des calculs Monte Carlo. En effet, un choix judicieux de cette distribution peut réduire considérablement le nombre d'étapes nécessaires afin d'atteindre le mode fondamental. Ce choix permet aussi d'éviter une situation de fausse convergence vers un sous-système. À ce jour, elle est définie par l'utilisateur et laissée à son appréciation. Un placement usuel est de répartir les neutrons de manière uniforme dans la géométrie. Cela permet souvent de couvrir la géométrie mais n'est pas toujours adapté car cette répartition peut être loin de la répartition réelle et peut mener à un nombre important d'étapes avant d'atteindre la convergence. De plus, en particulier pour les configurations de type « piscine de stockage », le nombre de volumes fissiles est si grand qu'une telle répartition uniforme réalisée seule n'est pas pertinente. Un placement des neutrons de première génération selon la loi suivante permet une initialisation automatique du calcul.

$$Init(\mathbf{r}) = \frac{\iint \phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E}) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{E}) d\mathbf{E}}{\iiint \phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E}) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{E}) d\mathbf{E} d\mathbf{r}} \quad (4.3)$$

Le spectre de fission étant isotrope et le flux adjoint scalaire, la fonction précédente peut se ré-écrire

$$Init(\mathbf{r}) = \frac{\int \phi_{det}^*(\mathbf{r}, E) \chi(\mathbf{r}, E) dE}{\iint \phi_{det}^*(\mathbf{r}, E) \chi(\mathbf{r}, E) dE d\mathbf{r}} \quad (4.4)$$

Le flux adjoint pouvant être assimilé à une certaine « importance », il est utilisé afin de placer les neutrons selon la réactivité des différents volumes. Afin d'éviter tout positionnement initial des neutrons dans une zone non fissile, le spectre de fission est utilisé pour pondérer le flux adjoint. En effet ce dernier est une fonction strictement positive sur tout le domaine et une initialisation uniquement grâce à cet adjoint peut conduire à faire naître des neutrons dans des zones non fissiles. L'objectif de cette initialisation est de permettre un placement « proche » de la distribution réelle ainsi que d'éviter un placement des sources inadéquat de la part de l'utilisateur.

Le placement de la première génération se fait uniquement de façon géométrique. Pour l'échantillonnage énergétique, dans le cas multigroupe, l'énergie est choisie selon le spectre de fission χ .

4.2.2 Échantillonnage inter-génération

Une des modifications de la simulation envisagée concerne l'échantillonnage des sites de naissance des neutrons. Dans le calcul analogue, pour une étape n , la sélection du nombre de neutrons à faire naître dans la région i se fait suivant la production par fission de la région i ramenée à la production totale :

$$f_n(i) = \frac{\int_{V_i} \nu \Sigma_f \phi_{mc}^{n-1}}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi_{mc}^{n-1}} \quad (4.5)$$

Le nombre de neutrons source est donc placé suivant le taux de production estimé à chaque étape. La modification implémentée consiste à changer cette loi d'échantillonnage par la production que multiplie le flux adjoint. Cette loi s'écrit donc :

$$\tilde{f}_n(i) = \frac{f_n(i) \phi_{det}^*(i)}{\sum_k f_n(k) \phi_{det}^*(k)} \quad (4.6)$$

Ici le flux adjoint est considéré comme une fonction de la géométrie, c'est à dire intégré en énergie. Cette modification implique aussi de revoir la façon de traiter le stockage des sites de fission. En effet pour multiplier ces deux grandeurs, il faut les obtenir sur le même découpage géométrique. Considérons un volume dans la géométrie Monte Carlo (V_{mc}), il peut contenir plusieurs volumes de la géométrie déterministe (V_{det}) si celle-ci est décrite plus finement. Sur les volumes V_{det} inclus dans V_{mc} , il n'est pas possible de considérer la production de V_{mc} , estimée lors du calcul Monte Carlo, comme constante. En effet, bien que les encaissements se fassent dans tout le volume V_{mc} , les sites de fission sont répartis selon la distribution « réelle ». Il est donc nécessaire d'encaisser la production selon les volumes V_{det} . Pour cela il a fallu revoir l'organisation de la gestion des sites potentiels de fission.

Étant donné que l'échantillonnage est modifié, il faut ajuster le poids statistique de la particule afin de ne pas biaiser le calcul. Pour toute fonction g , l'égalité suivante doit donc être respectée :

$$\int w f_n g = \int \tilde{w} \tilde{f}_n g \quad (4.7)$$

Pour des raisons de simplicité, la condition suivante est retenue :

$$w f_n = \tilde{w} \tilde{f}_n \quad (4.8)$$

De façon évidente, la condition (4.8) est suffisante pour respecter la condition (4.7). De façon plus générale, quelque soit la loi d'échantillonnage modifiée, l'ajustement précédent doit être respecté afin de conserver l'espérance

des estimateurs.

Dans notre cas, cela se traduit par le poids suivant pour un neutron naissant dans une région i :

$$\tilde{w}(i) = \frac{\sum_k f_n(k) \phi_{det}^*(k)}{\phi_{det}^*(i)} \quad (4.9)$$

Une autre version de cette modification est envisageable, en suivant les modifications suivantes :

$$\tilde{f}_n(i) = \frac{\phi_{det}^*(i)}{\int_{V_{tot}} \phi_{det}^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} \quad (4.10)$$

$$\tilde{w}(i) = \frac{w(i) f(i)}{\tilde{f}_n(i)} \quad (4.11)$$

L'idée de ces modifications est de privilégier la naissance de neutrons dans les régions de plus forte importance et rendre moins variable l'échantillonnage des sites de naissance.

Il est important de noter qu'un échantillonnage uniquement par le flux adjoint (4.10) fait disparaître toute la variabilité de la loi d'échantillonnage. Cela ne permet plus au système d'explorer les possibilités de répartition des neutrons dans la géométrie, ce qui peut introduire un biais lors des calculs.

Le tableau (4.1) résume, pour un volume i , les différentes lois d'échantillonnage et les poids associés aux modifications proposées.

Méthode de Simulation	Loi d'échantillonnage	Poids
Naturelle	$f(i) = \frac{\int_{V_i} \nu \Sigma_f \phi_{mc}}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi_{mc}}$	w
Approche selon 4.6	$f'(i) = \frac{\phi_{det}^*(i) f(i)}{\sum_k \phi_{det}^*(k) f(k)}$	$w \frac{\sum_k \phi_{det}^*(k) f(k)}{\phi_{det}^*(i)}$
Approche selon 4.10	$f'(i) = \frac{\phi_{det}^*(i)}{\sum_k \phi_{det}^*(k)}$	$w \frac{\sum_k \phi_{det}^*(k)}{\phi_{det}^*(i)} f(i)$

TABLE 4.1 – Résumé des modifications de l'échantillonnage des sites de naissance

Notons tout d'abord que le poids de naissance d'un neutron associé à la simulation naturelle n'est pas nécessairement égal à 1 pour des raisons de

normalisation. Ensuite les modifications proposées reviennent à ne plus faire porter la variabilité uniquement par la loi d'échantillonnage mais par la loi d'échantillonnage et le poids ou uniquement le poids de la particule.

4.2.3 Stratégies de Splitting et Roulette Russe

Dans cette modification de l'échantillonnage déjà présentée de façon générale à la partie 2.3.5, le nombre de particules arrivant en (\mathbf{r}, \mathbf{E}) d'un événement en $(\mathbf{r}', \mathbf{E}')$ est modifié par le ratio des importances. L'application de la modification implémentée dans le cadre de ce travail de thèse est présentée dans cette partie. Elle est basée sur l'utilisation des techniques de splitting et roulette russe aux points de collision de la manière suivante :

$$\begin{aligned} &\text{si } \frac{\phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E})}{\phi_{det}^*(\mathbf{r}', \mathbf{E}')} > 1 \text{ alors il y a création de particules (splitting)} \\ &\text{si } \frac{\phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E})}{\phi_{det}^*(\mathbf{r}', \mathbf{E}')} < 1 \text{ alors les particules subissent une roulette russe} \end{aligned}$$

Un neutron allant vers une zone plus importante sera divisé en N particules. Le critère suivant basé sur le rapport des importances conditionne cet événement.

$$\begin{aligned} N &= \lfloor \frac{\phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E})}{\phi_{det}^*(\mathbf{r}', \mathbf{E}')} + r \rfloor & (4.12) \\ \lfloor \cdot \rfloor &= \text{partie entière} \\ r &\equiv \mathcal{U}(0, 1) \end{aligned}$$

Le nombre de particules étant modifié, le poids de chaque descendant est ajusté en conservant le poids total. Le poids de chaque descendant est alors :

$$w_{fils} = \frac{w}{N} \quad (4.13)$$

Cet ajustement conserve de manière déterministe le poids total de la particule. Ce processus n'introduit donc pas de variabilité ou de biais. Lorsqu'un neutron se dirige vers une zone moins importante, il subit une roulette russe. La mort ou non de ce neutron est décidée selon

$$\begin{aligned} r &\equiv \mathcal{U}(0, 1) \\ \text{si } r &\leq \frac{\phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E})}{\phi_{det}^*(\mathbf{r}', \mathbf{E}')} \text{ le neutron survit} & (4.14) \end{aligned}$$

$$\text{sinon le neutron est tué} \quad (4.15)$$

Le nombre de particules étant modifié, le poids statistique de chaque particule doit être modifié en conséquence afin de conserver l'estimateur. Si

la particule survit son poids est modifié par :

$$w_{survie} = w \frac{\phi_{det}^*(\mathbf{r}, \mathbf{E})}{\phi_{det}^*(\mathbf{r}', \mathbf{E}')} \quad (4.16)$$

Cette définition permet la conservation en moyenne du poids de la particule. Le poids moyen s'écrit :

$$w_{survie} \times p_{survie} + w_{mort} \times p_{mort} = w \quad (4.17)$$

La conservation du poids de la particule se faisant de manière statistique, il est nécessaire qu'un nombre suffisant de particules passe dans cette « roulette » de modification afin de ne pas biaiser le calcul. Il ne s'agit pas réellement d'un biais mais pour un trop faible nombre de particules passant dans la roulette, la variance induite par ce processus est suffisamment grande pour faire apparaître un « biais ».

L'énergie de naissance des particules doit aussi être modifiée. La densité alors utilisée est :

$$\frac{\chi \phi_{det}^*}{\int_E \chi(\mathbf{r}, E) \phi_{det}^*(\mathbf{r}, E) dE} \quad (4.18)$$

Le poids du neutron est alors modifié afin de conserver l'espérance selon :

$$w_{new}(\mathbf{r}, E) = w(\mathbf{r}, E) \frac{\int_E \chi(\mathbf{r}, E) \phi_{det}^*(\mathbf{r}, E) dE}{\phi_{det}^*(\mathbf{r}, E)} \quad (4.19)$$

Le code MORET ne simulant qu'un neutron à la fois, les neutrons qui sont produits par splitting sont stockés, puis simulés à tour de rôle. Ce processus a pour but de forcer les neutrons à se diriger vers les zones les plus réactives.

4.2.4 Roulette russe sur le poids

La stratégie telle que décrite ci-dessus a tendance à diriger les neutrons vers les zones importantes et à désertir les zones les moins importantes. Cependant, lors d'un calcul de criticité, des grandeurs locales sur tout le domaine sont collectées. Il peut être intéressant de ne pas tuer les particules se dirigeant vers des zones moins réactives. Il faut cependant conserver une façon de tuer les particules afin de ne pas se retrouver dans un équivalent de milieu multiplicatif. En effet, à chaque fois qu'une stratégie de splitting est mise en place, il faut lui adjoindre une stratégie de roulette russe sous peine de voir apparaître une grande quantité de neutrons de poids négligeables et surtout de se retrouver avec un milieu multiplicatif sans critère d'arrêt.

Une roulette russe avec un critère de choix sur le poids de la particule peut être appliquée. Pour des neutrons ayant un poids inférieur à P_{inf} ,

$$r \equiv \mathcal{U}(0, 1)$$

$$\text{si } r \leq w \text{ le neutron survit} \quad (4.20)$$

$$\text{sinon le neutron est tué} \quad (4.21)$$

Afin de conserver le poids des particules, le poids d'un neutron qui survit est remonté à 1.

Le schéma (4.4) localise, en vert, les différents modules de la simulation impactés par les modifications dans le processus Monte Carlo présenté précédemment.

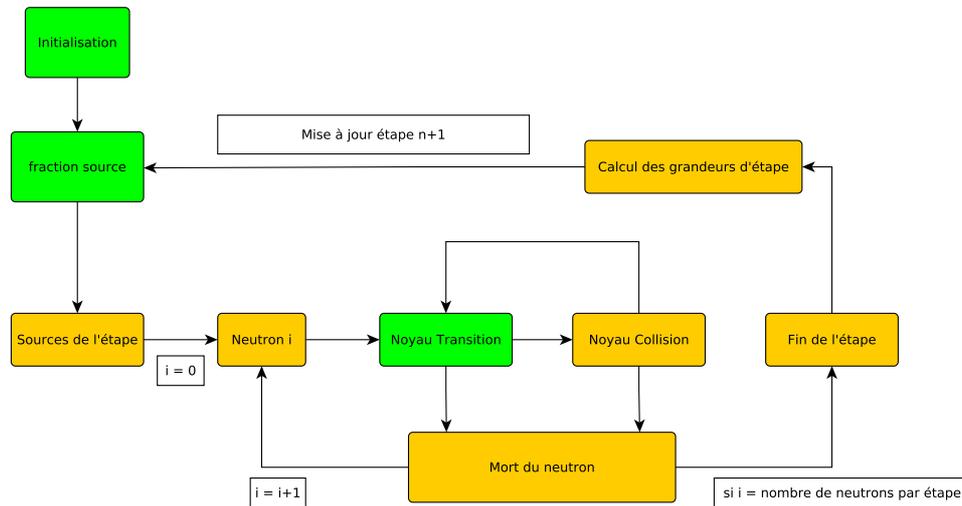


FIGURE 4.4 – Schéma résumant, en vert, les étapes de la simulation modifiées

4.3 Organisation du jeu de données

Dans le code MORET, l'appel au couplage ci-dessus se fait dans le module optionnel SIMU qui regroupe toutes les options de simulation ou d'échantillonnage différentes de la simulation analogue. Dans ce module, la déclaration de l'utilisation d'un couplage se fait entre les balises ADJD et FADJ.

Les balises suivantes sont optionnelles et renvoient aux couplages faits ci-dessus : le mot clef INIT correspond à l'initialisation par le flux adjoint. Cette utilisation de l'adjoint requiert de modifier la déclaration des sources : dans le module SOUR, il est alors possible de déclarer AUTO suivi du nombre

de neutrons à simuler par étape.

Le mot clef **ITER** correspond à la modification de l'échantillonnage entre générations, il est suivi d'un entier 1 ou 2 correspondant respectivement aux modifications (4.10) et (4.6).

Pour utiliser les stratégies de roulette et splitting, il faut appeler le mot clef **NOYA**. Enfin pour utiliser la roulette russe sur le poids il faut utiliser conjointement les mots clefs **NOYA** et **POID**.

Pour finir, il faut décrire la géométrie déterministe. Pour le moment sont disponibles des cellules cartésiennes 1D (selon x), 2D (selon x,y), 3D ou une géométrie de type crayon. Chaque cellule distincte se décrit alors avec **CAR1**, **CAR2**, **CAR3**, **PINC** suivi du découpage de chaque cellule. L'appel à une des techniques de biaisage se fera par :

Syntaxe	Description
ADJD	Utilisation du couplage avec DRAGON
INIT	Initialisation selon le flux adjoint
ITER j	Modif. de la sélection des sites de fission
NOYA	Modif. de la marche aléatoire des neutrons
POID	Utilisation de la roulette sur le poids
GEOM	Description de la géométrie
CELL N_{cell}	Nombre de cellules distinctes
i_{cell} CAR1D n_x	description de la cellule i
LATT $l_x l_y l_z$	Organisation spatiale des cellules
MESHX	Coordonnées des frontières des cellules
MESHY	Coordonnées des frontières des cellules
MESHZ	Coordonnées des frontières des cellules
FADJ	Fin de définition des options de couplage

TABLE 4.2 – Description du jeux de données

Avant de poursuivre, il est intéressant d'expliciter l'adjoint utilisé pour les modifications ci-dessus. C'est un flux adjoint asymptotique, dans le sens où il est proportionnel au nombre de fissions produites par un neutron inséré à un point du réacteur après un nombre important (théoriquement infini) de générations. Il est important de noter que le flux adjoint utilisé ici est basé sur une réponse unique (le k_{eff}). Dans le cas de FW-CADIS [38], le flux adjoint utilisé provient d'un adjoint basé sur une combinaison linéaire de plusieurs objectifs (ou réponses), et est limité à la première génération, c'est à dire que les fissions sont considérées comme des absorptions stériles. Ces différences d'interprétations, de modèles et leurs impacts sont très bien

explicitées par H. Hurwitz dans [18].

Afin de quantifier les apports (ou non) des modifications envisagées, nous allons observer plusieurs grandeurs. L'entropie de Shannon nous permettra d'observer le comportement de la source de fission. Nous nous intéresserons aussi à différentes grandeurs locales, notamment des taux de production par fission. Dans la suite, un calcul désignera la simulation de i neutrons pendant j générations. Par exemple, pour le cas qui suit, un calcul est constitué de la simulation de 2000 neutrons pendant 600 étapes. Pour une grandeur G , ces (600) étapes nous permettent, en les supposant indépendantes, d'estimer un écart type et une moyenne de cette grandeur. Cependant, les étapes ne sont pas indépendantes, ce qui va entraîner une sous-estimation, parfois importante, de l'écart type. Pour estimer la valeur réelle de l'écart type, 70 calculs (dans le cas qui suit) sont menés avec des suites de nombres aléatoires différentes, nous donnant ainsi 70 réalisations indépendantes de la moyenne de G permettant d'estimer l'écart type réel. Cet écart type sera, dans la suite du document, désigné par comme l'écart type réel. Il peut être aussi intéressant de comparer le gain moyen de variance sur un calcul unique. Pour cela, nous effectuerons la moyenne des écarts types obtenus par chacun des calculs, que nous noterons écart type calculé dans la suite de ce document.

4.4 Validation du couplage dans le cas d'un adjoint S_n

Cette démarche n'étant envisageable que sur des géométries relativement simples nous reprenons le cas présenté au chapitre 3 et issu du benchmark de l'AEN [9]. Pour rappel, ce cas est composé de deux unités fissiles de nitrate d'uranyle séparées par de l'eau. La largeur du volume d'eau et du second volume fissile sont variables. La figure (4.5) reprend la géométrie du problème. Les volumes fissiles 1 et 2 ont la même composition mais pas nécessairement la même largeur.

Modélisations

Ce problème peut se ramener à une modélisation en une dimension pour un modèle déterministe. En effet, la géométrie et la chimie sont invariantes dans les directions Y et Z . La bibliothèque utilisée est JEFF3.1 avec un développement à l'ordre P_5 , sur un maillage SHEM295.

Modèle Dragon

Le modèle utilisé est un modèle à une dimension. Les volumes fissiles sont divisés en 30 mailles et le volume d'eau est divisé en 15 mailles. Le solveur

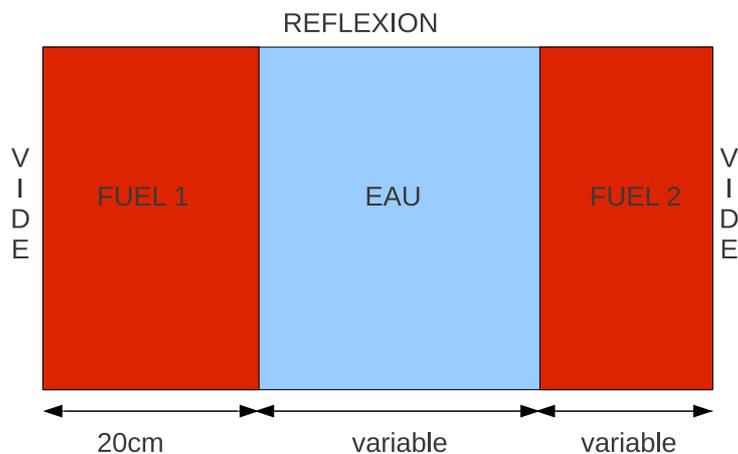


FIGURE 4.5 – Géométrie du cas test

utilisé est un solveur S_n . La discrétisation angulaire est à l'ordre 8. Les sections efficaces macroscopiques sont produites en milieu infini homogène. Le critère d'arrêt est laissé par défaut, c'est à dire un critère de 5×10^{-5} sur le flux thermique et rapide.

Modèle MORET

MORET étant un code Monte Carlo à trois dimensions, le modèle est un pavé de dimensions $\ell_x \times \ell_y \times \ell_z$ avec des conditions de réflexions suivant les axes Y et Z. Les données nucléaires utilisées sont les mêmes que celles utilisées dans le cas déterministes. En effet, les sections macroscopiques, générées par le code DRAGON, sont exportées vers MORET, qui est un code utilisant aussi bien des sections ponctuelles que multigroupes.

Dans les parties qui suivent, le taux de production désigne le taux de production par fission.

4.4.1 Cas d'une configuration asymétrique

Les largeurs considérées pour réaliser ces cas tests sont : 30 cm pour l'eau et 20 et 18 cm pour les unités fissiles (FUEL1 et FUEL2). Ce cas est représentatif des difficultés que peuvent rencontrer les configurations Monte Carlo à traiter les géométries pour lesquelles les régions neutroniques sont très fortement découplées, ce qui conduit à un haut ratio de dominance (ici estimé à 0.95). Les calculs ont été menés avec 2000 neutrons par génération, aucune étape passive et 600 étapes actives.

Études de différents choix d'initialisation

Pour cette partie, seule l'initialisation est modifiée. L'apport d'une initialisation automatique sera plus importante et plus facile à identifier dans ce cas légèrement asymétrique. En effet pour le cas symétrique la distribution uniforme est suffisamment proche de la distribution réelle pour que l'effet de l'initialisation automatique ne soit pas visible bien que ce dernier fournisse une distribution plus proche. Les résultats présentés ci-dessous concernent l'influence des choix d'initialisation. La figure (4.6) représente la distribution initiale au début de la simulation Monte Carlo donnée par l'utilisation du flux adjoint déterministe via l'équation (4.3) en regard d'une initialisation uniforme.

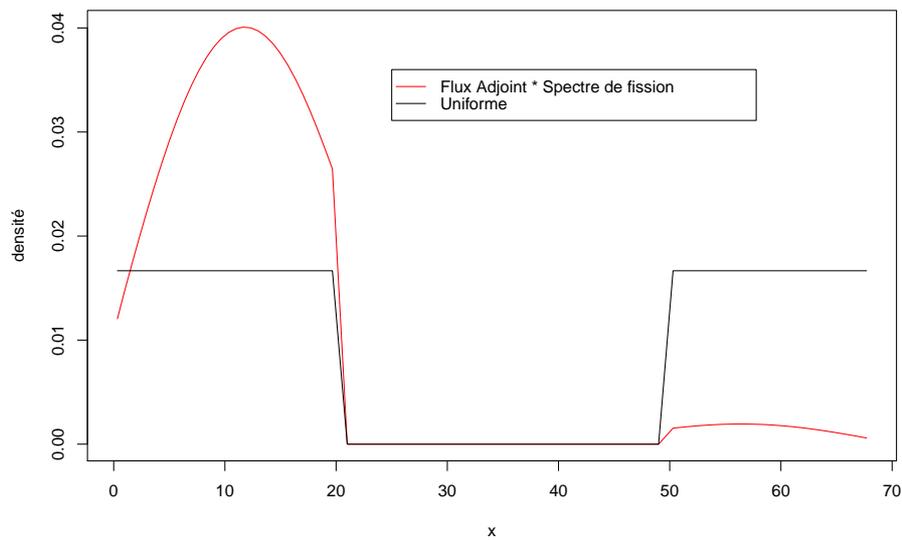


FIGURE 4.6 – Comparaison des distributions initiales uniforme et automatique

Intuitivement, l'initialisation à l'aide du flux adjoint semble plus proche de la distribution réelle que celle utilisant la distribution uniforme. Afin de quantifier la distance au flux et à la production par fission de ces deux initialisations, les différentes grandeurs ont été tracées sur la figure (4.7). Le flux et la production ont été obtenus à partir d'un calcul direct déterministe et ont été normalisés afin de pouvoir comparer les grandeurs entre elles. Lors d'un calcul Monte Carlo, c'est le taux de production par fission normalisé, aussi appelé fraction source, qui détermine les sites de fission. La distribution

initiale a donc intérêt à être plus proche de ce taux que du flux.

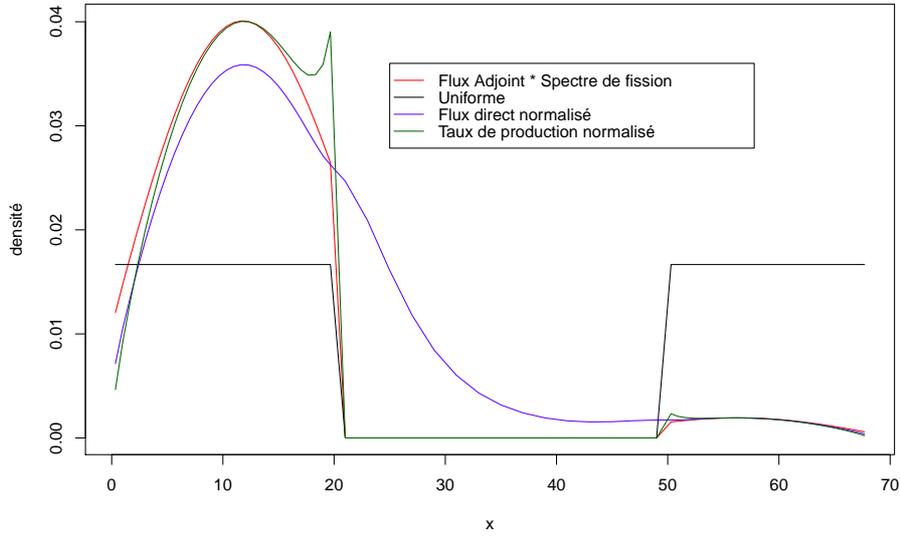


FIGURE 4.7 – Comparaison du flux et taux de production direct avec les distributions initiales uniforme et automatique

En dehors du voisinage du modérateur, le flux adjoint pondéré par le spectre de fission est très proche du taux de production. Cette comparaison confirme la remarque précédente selon laquelle le flux adjoint pondéré par le spectre de fission fournit une initialisation intéressante. Le taux de production par fission présente un pic au voisinage de l'interface avec l'eau. Ce pic est dû à la présence d'un modérateur qui ralentit les neutrons vers la plage thermique plus fortement que dans d'autres zones.

Le taux de production dans le volume 1 (S_1) rapporté au taux de production global ($S_1 + S_2$) est tracé en fonction des étapes sur la figure (4.8). Le cas d'une distribution uniforme est tracé en noir et le cas d'une distribution modifiée par l'adjoint est tracée en rouge.

Cette figure montre clairement une réduction importante du transitoire avec une initialisation grâce à l'adjoint. Avec cette initialisation, seules quelques étapes sont nécessaires à la convergence, alors qu'une initialisation uniforme nécessite une centaine d'étapes de mélange avant d'atteindre l'équilibre. Ainsi, bien que la production par fission ne soit pas utilisée pour l'initialisation, ce choix semble suffisant.

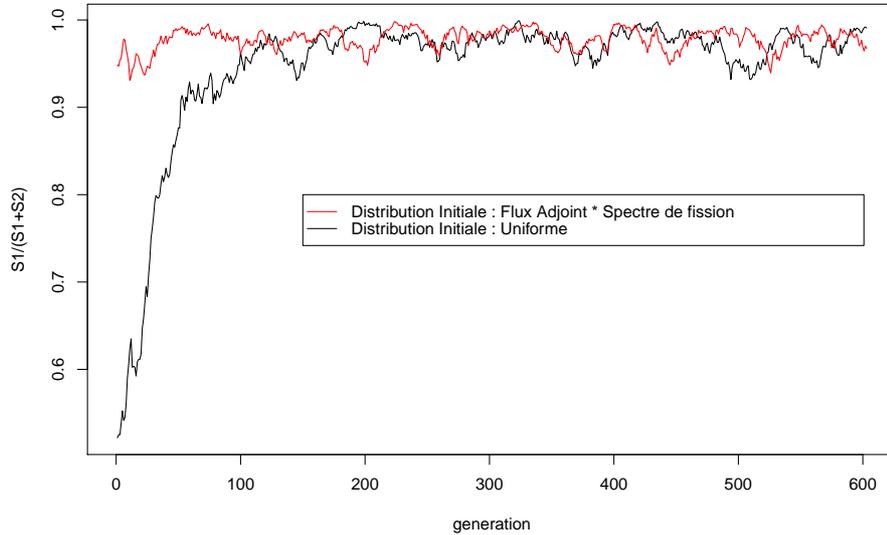


FIGURE 4.8 – Rapport des taux de production en fonction des étapes

Cependant, un unique calcul n'est pas suffisant pour assurer que cette méthode réduise le transitoire, et il est nécessaire d'étudier la dispersion des résultats afin d'être sûr qu'il ne s'agisse pas d'une chaîne de nombre aléatoires particulière. Pour cela nous allons regarder la dispersion de l'entropie de Shannon. Pour ce cas, un découpage de l'axe X en 70 mailles a été utilisé.

La figure (4.9) illustre le maximum et le minimum par étape des entropies de Shannon pour 70 cas avec des suites de nombres aléatoires différentes. Plus précisément, pour chaque étape, nous disposons de 70 valeurs d'entropie, le maximum et le minimum de cette étape apparaissent sur la figure. Comme déjà décrit dans le paragraphe 3.3.2 page 70, les valeurs de deux étapes consécutives ne sont ainsi pas nécessairement extraites du même calcul. En rouge sont tracées les entropies liées au placement modifié et en noir les entropies liées au placement uniforme. Cette démarche permet d'estimer un encadrement de l'entropie de Shannon et ainsi que d'en quantifier la variabilité vis-à-vis de la suite de nombres aléatoires utilisée [44].

Cette courbe montre que l'initialisation selon le flux adjoint réduit de manière intéressante le transitoire, et confirme ce qui a été constaté pour le ratio des taux de réaction (fig. 4.8). Cela permet aussi de constater que l'entropie de Shannon est en accord avec les taux de production au niveau

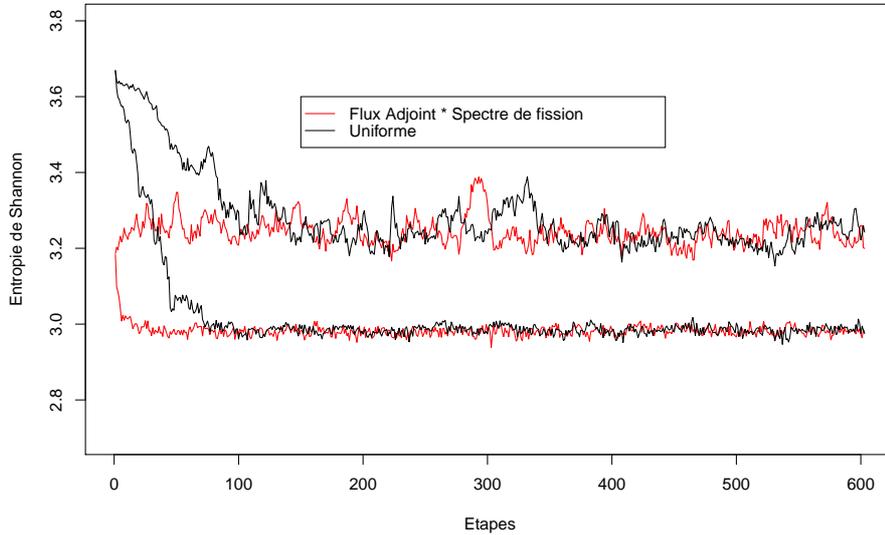


FIGURE 4.9 – Maximum et minimum par étape des entropies de Shannon

de la longueur du transitoire de l'ordre de quelques étapes.

Dans ce système le coefficient de multiplication effectif est peu affecté par le transitoire. Il est cependant intéressant de comparer, à nombre de neutrons fixé, les estimations du k_{eff} basées sur la combinaison générale des estimateurs (tableau (4.3)).

Méthode d'initialisation	k_{eff}	
	Moyenne	écart type (pcm)
Uniforme sur la géométrie	0.92909	61
$\phi^* \chi$	0.93128	61
Uniforme sur le volume 1	0.93246	59
Uniforme sur le volume 2	0.92599	75

TABLE 4.3 – Comparaison des k_{eff} entre les différentes façons d'initialiser

Le choix de la méthode de positionnement initial des sources influe très peu sur l'estimation du k_{eff} . Le tracé du k_{eff} estimé en fonction des étapes, sur les figures (4.10) et (4.11), permet de d'affiner un peu cette analyse. On voit clairement que l'initialisation par l'adjoint permet de supprimer totalement le transitoire alors que le positionnement uniforme laisse apparaître un

transitoire.

Pour être exhaustif dans cette analyse, une dernière courbe (fig. 4.12) montre l'effet de l'initialisation sur les taux de production. Comme attendu, la convergence est nettement pénalisée lorsque les neutrons sont placés dans le volume le moins réactif (volume 2).

Le tableau (4.4) résume la moyenne et les écarts types calculé et réel de la fraction source en fonction de l'initialisation. L'écart type réel est obtenue à partir des 70 calculs effectués avec des chaînes de nombres aléatoire différentes. Comme déjà évoqué page 88, l'écart type calculé est la moyenne des écarts types obtenus lors des différents calculs.

Méthode d'initialisation	Moyenne	$\frac{S1}{S1+S2}$	
		σ calculé	σ réel
uniforme (150 étapes inactives)	0.9726	7.4e-4	6.2e-3
$\phi_{det}^* * \chi$	0.9738	6.5e-4	4.2e-3

TABLE 4.4 – Fraction source dans le volume 1 en regard de l'initialisation

La réduction de variance est due au nombre d'étapes inactives nécessaires à la convergence dans le cas d'une initialisation uniforme alors que dans le cas initialisé par l'adjoint ces étapes sont utilisées pour l'estimation. Comme attendu, l'écart type calculé sous-estime l'écart type réel, dans ce cas le coefficient d'auto corrélation étant de 0.866 pour l'entropie comme identifié à la partie 5.4.3.

L'utilisation de l'initialisation automatique positionne de façon pertinente la première génération de neutrons. Ce placement conduit à une forte réduction du transitoire car ainsi initialisé, le flux est très proche du mode fondamental. Cette amélioration est profitable aussi bien au k_{eff} qu'aux grandeurs locales dans le cas étudié. Elle permet aussi d'éviter un placement inadéquat de la part de l'utilisateur.

Bien qu'apparemment très séduisante, il est important de rappeler que l'utilisation de telles méthodes automatiques ne doit en aucun cas se substituer entièrement à l'expertise des utilisateurs. Ils doivent être sensibilisés aux limites de ce type d'approche. Aussi, des validations les plus exhaustives possibles, ainsi que la mise en place d'indicateurs de qualité doivent être associés à la mise en production de tels algorithmes.

Concernant le cas symétrique, étant donné les problèmes de convergence

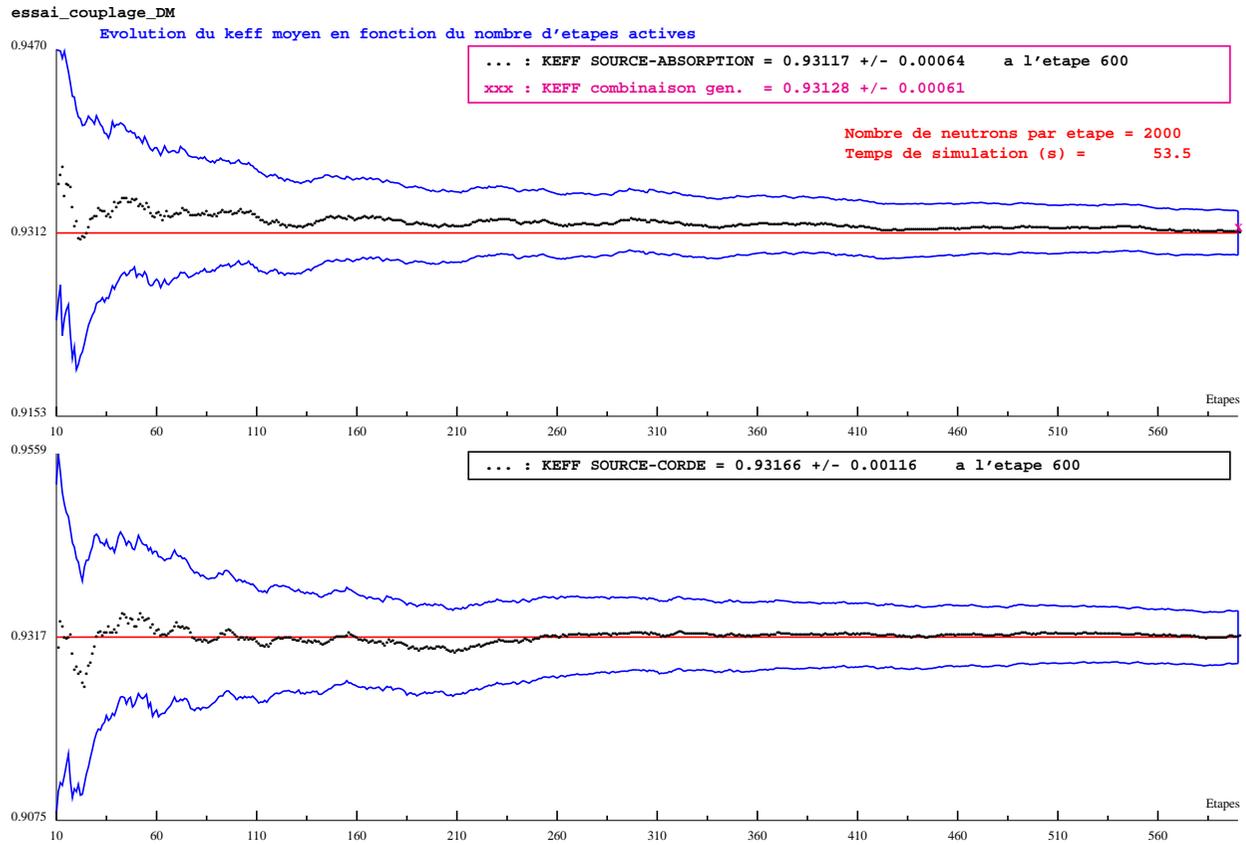


FIGURE 4.10 – Évolution de l'estimation du k_{eff} avec l'initialisation par l'adjoint pour différents estimateurs

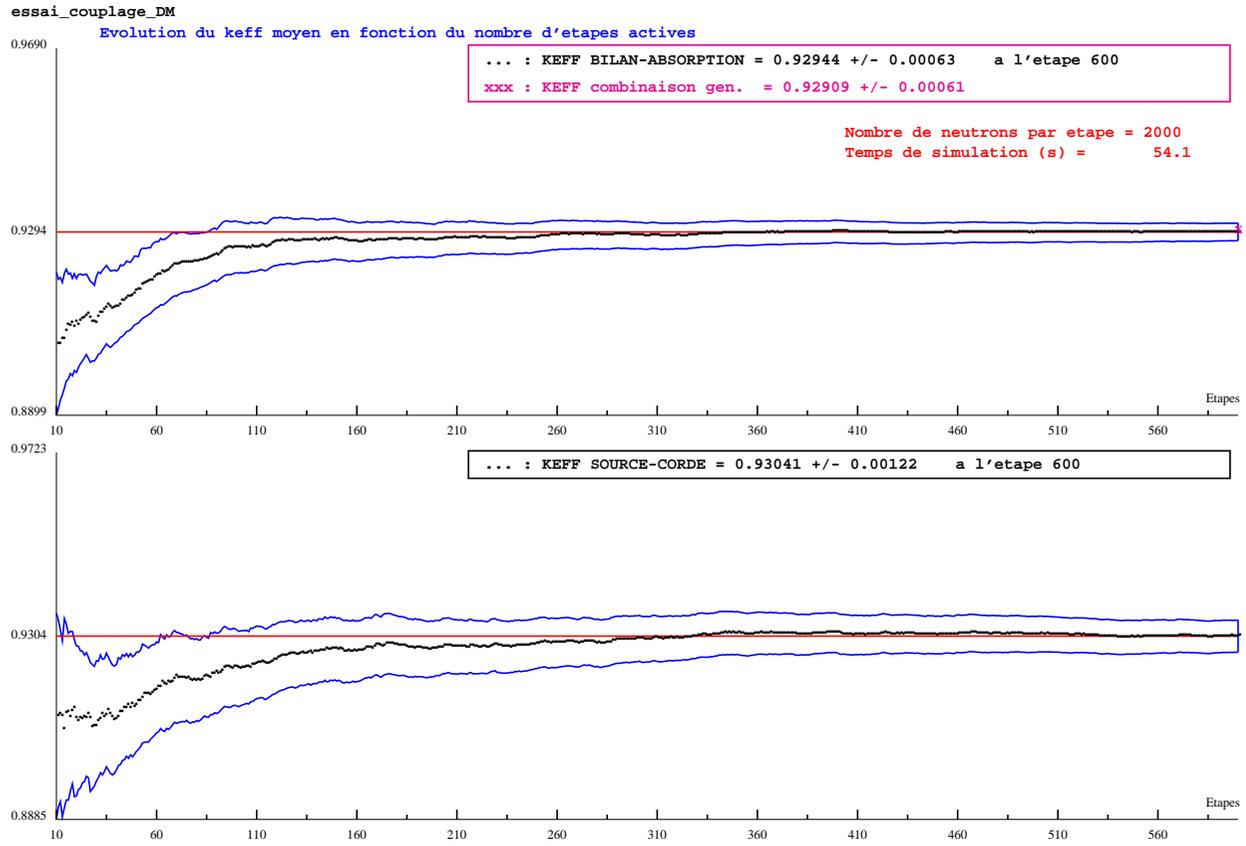


FIGURE 4.11 – Évolution de l'estimation de k_{eff} avec une initialisation unimodale pour différents estimateurs

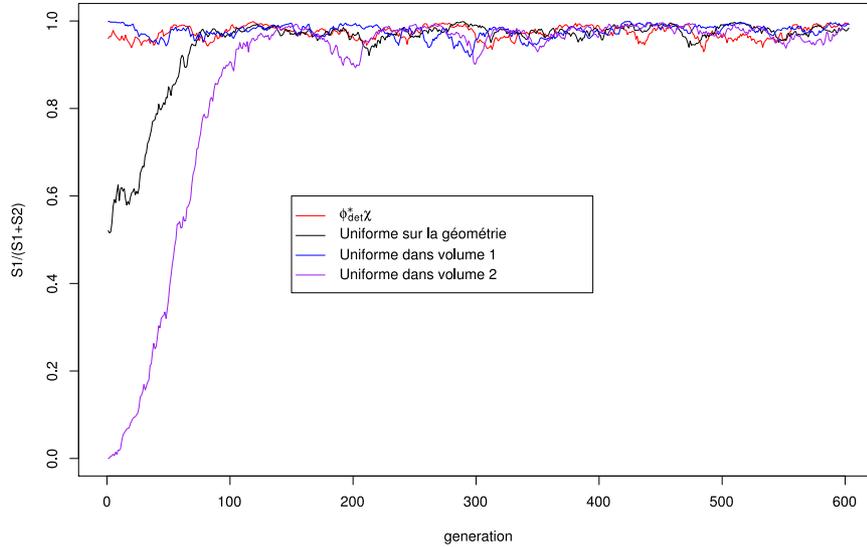


FIGURE 4.12 – Rapport des taux de production en fonction des étapes pour différentes initialisations

rencontrés par ailleurs, la densité initiale n'influe que très peu sur la convergence finale.

Échantillonnage des sources à chaque génération en multipliant le taux de production par l'adjoint

Dans cette partie, les calculs sont menés avec une source initiale uniforme, un échantillonnage modifié des sites de fission afin de tester la vitesse de convergence. Le transport n'est pas modifié. La modification de la sélection des sites de fission se fait selon l'équation (4.6).

Sur la figure (4.13), sont tracées en noir et rouge respectivement les fractions source pour une simulation modifiée et une simulation naturelle.

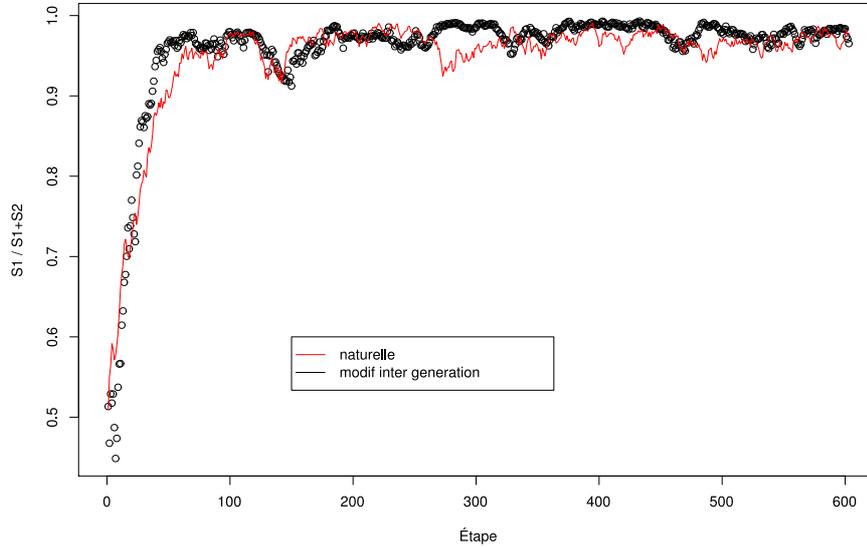


FIGURE 4.13 – Fraction source du volume 1 en fonction des étapes pour une modification de l'échantillonnage entre génération dans le cas asymétrique

La modification de l'échantillonnage des sources à chaque génération n'a pas d'impact sur la vitesse de convergence comme nous le montre la figure (4.13).

4.4.2 Cas d'une configuration symétrique

À travers ce cas, nous aborderons dans ce paragraphe :

- Un rappel sur les résultats obtenus avec la simulation naturelle (cas de référence et point de comparaison)
- L'effet de l'échantillonnage des sources à chaque génération en multipliant le taux de production par l'adjoint
- Celui de l'échantillonnage des sources à chaque génération en utilisant uniquement l'adjoint
- L'étude de l'utilisation de stratégies de Splitting et Roulette
- L'étude du remplacement de la roulette russe sur la direction par une roulette russe sur le poids

Nous rappellerons succinctement les caractéristiques de la simulation naturelle sur ce benchmark déjà citées à la partie (3.3).

Le cas symétrique correspond au cas avec deux volumes fissiles de 20 cm de large séparés par 30 cm d'eau. Pour cette étude, les caractéristiques des simulations seront : 2000 neutrons par étape, 600 étapes et une initialisation uniforme.

Rappel de la simulation naturelle

Pour ce cas, le ratio de dominance calculé est de 0.997, soit très proche de l'unité [9]. Ceci induit une convergence extrêmement lente pour le flux. Le cas étant symétrique, le flux et les taux de production sont sensés être symétriques. Cependant, la dispersion des résultats est importante, comme le montre la figure (4.14) reprise de la figure (3.7).

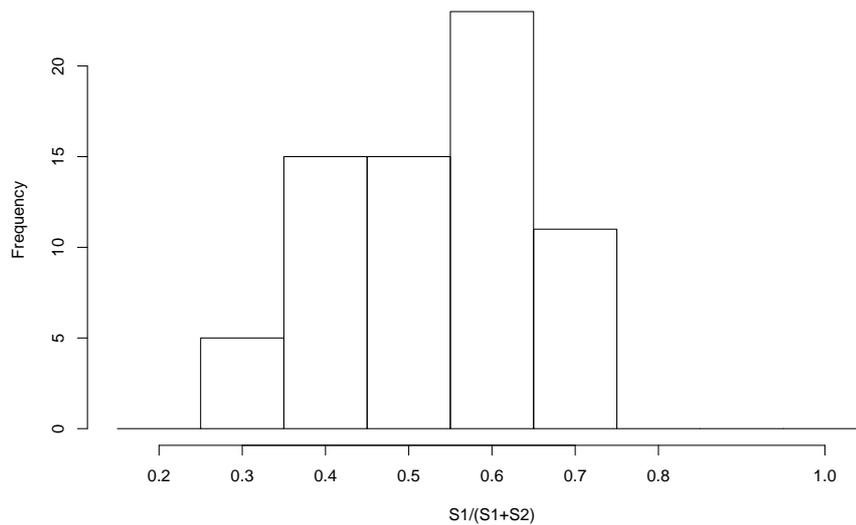


FIGURE 4.14 – Histogramme du rapport des taux de production pour 70 aléas pour la simulation naturelle avec une initialisation uniforme

La moyenne est de 0.5172 et l'écart type est de 0.1159. La figure (4.15), reprise de (3.8), représente le taux de production par fission normalisé du volume 1 ainsi que la valeur théorique (en rouge). Les oscillations autour de la valeur théorique sont fortes, significatives du fort ratio de dominance et de la configuration symétrique inadaptée aux techniques d'échantillonnage Monte Carlo.

Afin de pouvoir réaliser des comparaisons, les bornes des histogrammes

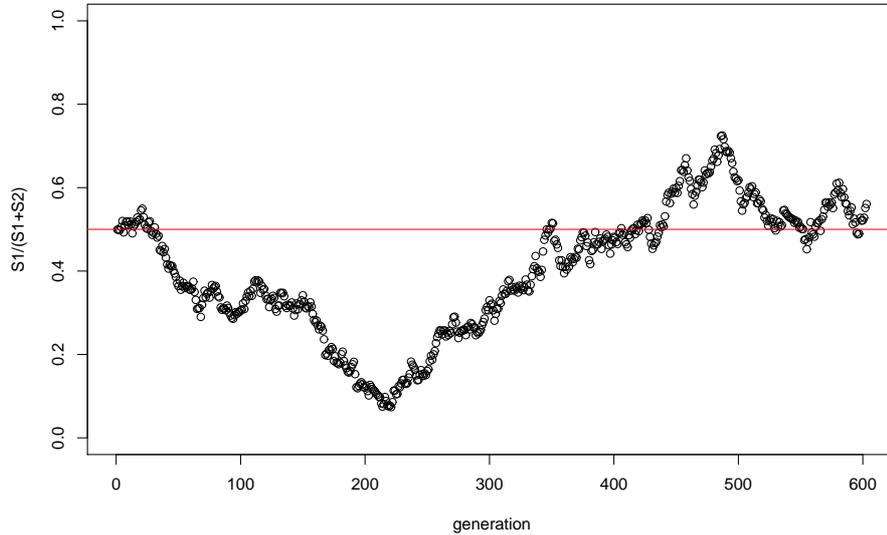


FIGURE 4.15 – Taux de production normalisé en fonction des étapes pour une simulation naturelle

présentés par la suite sont toujours les mêmes que pour la simulation analogue, à savoir : 0.25, 0.35, 0.45, 0.55, 0.65, 0.75, 0.85.

Nous allons maintenant étudier l'apport d'une modification de la sélection des sites de fission à chaque génération. Le tableau (4.5) rappelle les différentes modifications de la loi d'échantillonnage.

Échantillonnage des sources à chaque génération en multipliant le taux de production par l'adjoint

La modification de l'échantillonnage étudiée ici est faite en multipliant la production par le flux adjoint selon (4.6). Dans cette partie, l'initialisation est uniforme, il n'y a pas de modification de la marche aléatoire des neutrons. L'histogramme (4.16) représente la répartition du ratio du taux de production, pour 70 aléas différents.

En comparaison de la figure (4.14), l'histogramme (4.16) suggère une moindre dispersion. Basé sur ces 70 réalisations, l'écart type réel peut être estimé et est de 0.1050 et la moyenne de 0.5249. Le gain sur l'écart type de cet échantillon, par rapport à la simulation naturelle, est de l'ordre de 10%. Il confirme une moindre dispersion des résultats. L'écart type calculé, est

Méthode de Simulation	Loi d'échantillonnage	Poids
Naturelle	$f(i) = \frac{\int_{V_i} \nu \Sigma_f \phi_{mc}}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi_{mc}}$	w
Approche selon 4.6	$f'(i) = \frac{\phi_{det}^*(i) f(i)}{\sum_k \phi_{det}^*(k) f(k)}$	$w \frac{\sum_k \phi_{det}^*(k) f(k)}{\phi_{det}^*(i)}$
Approche selon 4.10	$f'(i) = \frac{\phi_{det}^*(i)}{\sum_k \phi_{det}^*(k)}$	$w \frac{\sum_k \phi_{det}^*(k)}{\phi_{det}^*(i)} f(i)$

TABLE 4.5 – Résumé des modifications de l'échantillonnage des sites de naissance

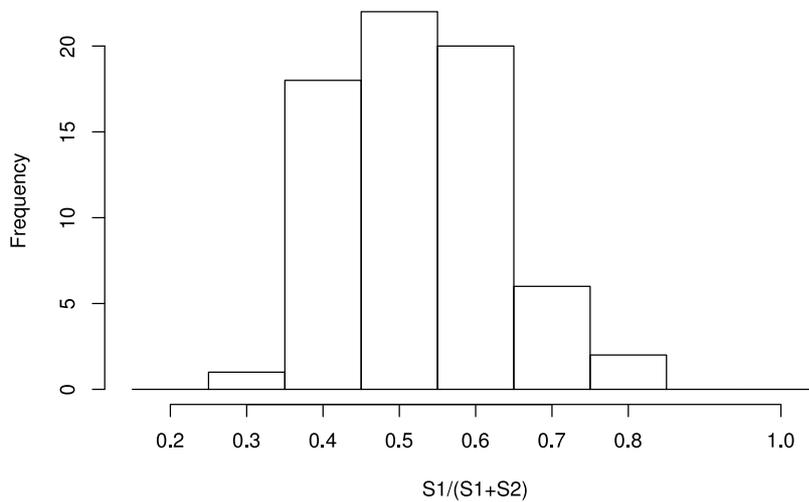


FIGURE 4.16 – Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations en multipliant le taux de production par l'adjoint

dans ce cas 0.0046.

Cette modification permet d'apporter une partie fixe d'une étape à l'autre dans la loi d'échantillonnage des sites de naissance réduisant apparemment un peu la dépendance à la chaîne de nombres aléatoires et ainsi la dispersion des résultats.

Échantillonnage des sources à chaque génération en utilisant uniquement l'adjoint

Dans ce paragraphe, l'échantillonnage se fait selon (4.10), la loi d'échantillonnage est uniquement selon le flux adjoint. Dans cette partie, l'initialisation est uniforme, il n'y a pas de modification de la marche aléatoire des neutrons.

La figure (4.17) représente l'histogramme de répartition des résultats toujours pour 70 aléas différents.

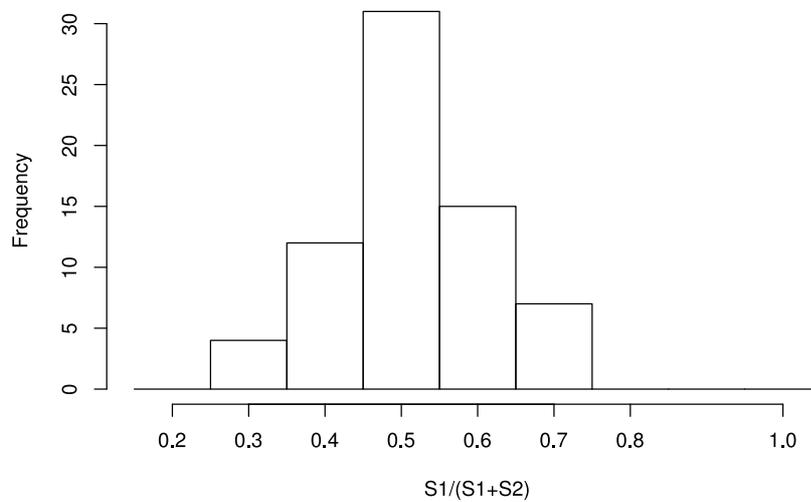


FIGURE 4.17 – Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations en utilisant uniquement l'adjoint

Nous constatons une bien meilleure répartition des résultats, la distribution est nettement centrée sur 0.5 et semble symétrique. Les estimations de la moyenne et de l'écart type, sur les 70 réalisations, donnent : 0.5110 pour la moyenne et 0.0980 pour l'écart type. Ce qui en comparaison du cas

de simulation naturelle donne une réduction de l'ordre de 15%. L'écart type calculé est ici de 0.0040, ce qui représente quant à elle un gain de 17%. Pour rappel de la page 88, l'écart type calculé est la moyenne des écarts types obtenus lors des différents calculs, ce qui nous permet d'estimer le gain moyen en variance d'un calcul.

Afin d'illustrer le comportement de la fraction source lors d'un calcul unique, les figures (4.18) et (4.19) la représentent en fonction des générations pour deux chaînes de nombres aléatoires différentes. L'objectif ici est de regarder si le phénomène de fluctuation observé sur la figure (4.15) est atténué en utilisant à chaque génération l'adjoint pour échantillonner les sources.

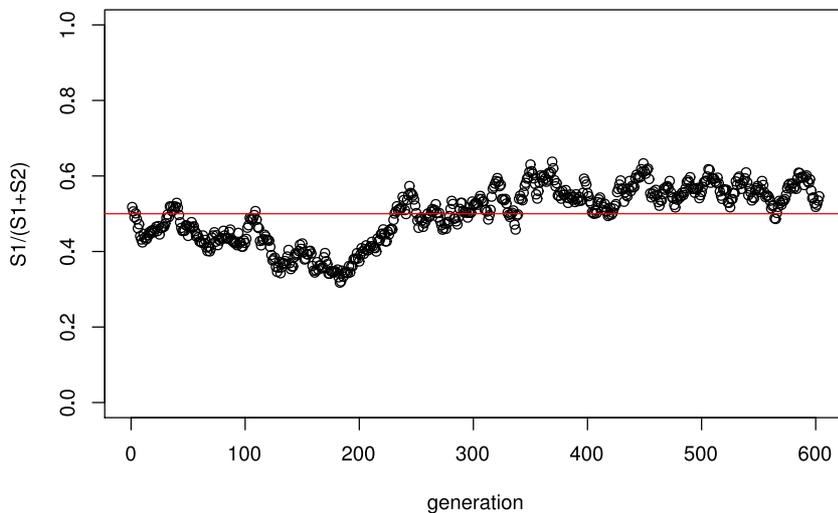


FIGURE 4.18 – Fraction source du volume 1 en fonction des étapes - aléa 1

La figure (4.18) suggère que l'échantillonnage par l'adjoint réduit la variabilité lors d'un calcul unique. Cependant, la figure (4.19) nous montre qu'une variabilité importante subsiste. La dépendance à la chaîne de nombre aléatoire (aléa=1 et aléa=2) présentée ici souligne l'importance, lors de l'utilisation de méthodes Monte Carlo, de réaliser plusieurs simulations avec des aléas différents.

Dans cette modification, l'échantillonnage des sites de fission se fait selon une même loi pour toutes les générations. Cela a pour conséquence de faire naître le même nombre de neutrons dans chaque volume, quelque soit la gé-

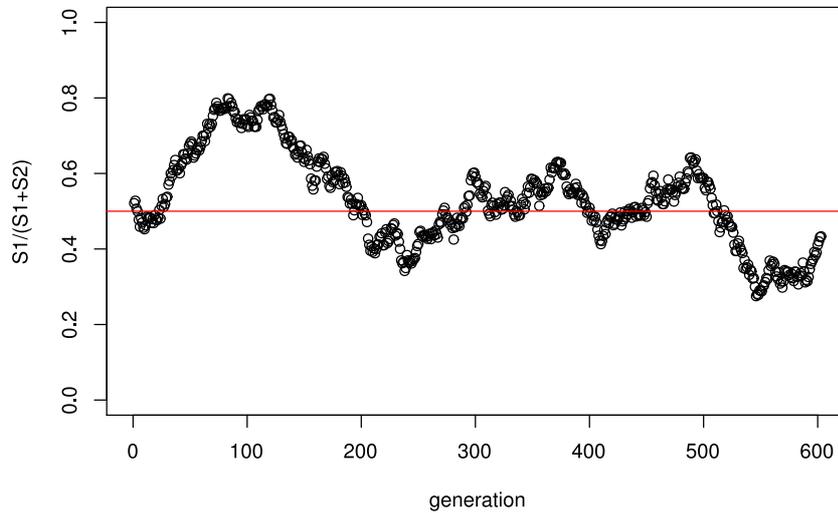


FIGURE 4.19 – Fraction source du volume 1 en fonction des étapes - aléa 2

nération. Ainsi, la loi utilisée ne dépend pas de l'estimation de la production par fission. Cette dernière intervenant dans le calcul des poids statistiques affectés aux neutrons, le nombre de neutrons par volume sera toujours symétrique dans un système symétrique. Cette spécificité apportera obligatoirement des collisions et donc de l'information améliorant ainsi la statistique. Cela semble diminuer l'effet de la variabilité de l'estimation de la production. Il apparaît cependant une limitation à cette façon de procéder. Si la fonction utilisée pour échantillonner les sites de naissance est trop éloignée du taux de production théorique, des différences de poids suffisamment grandes apparaîtront, introduisant une plus grande variance. À noter également que le découpage déterministe, réalisé pour ce cas, est plus détaillé que le découpage Monte Carlo.

L'échantillonnage uniquement par l'adjoint semble rendre moins sensible le résultat à la chaîne de nombre aléatoire. Cependant, cet apport peut n'apparaître que dans les cas où la distribution est sous-échantillonnée. Intuitivement, la modification de la sélection des sites de naissance par le flux adjoint peut pénaliser celle-ci lorsque le nombre de neutrons est suffisant pour décrire correctement le flux. En effet, le flux adjoint et la production par fission normalisée, bien que globalement proche, peuvent être localement assez différentes, notamment au voisinage du réflecteur. Par conséquent, il n'est pas évident que la modification soit bénéfique lorsque le nombre de neutrons est

augmenté de façon significative : un optimum est à déterminer.

Cette objection pourrait être levée avec l'utilisation du taux de production déterministe, intégré en énergie, pour échantillonner à la place du flux adjoint. L'initialisation du calcul pourrait également utiliser ces taux de production. Un couplage basé sur un précalcul direct serait intéressant à étudier. Cette piste est explorée rapidement dans le paragraphe 4.4.4.

Résumé des résultats pour la modification de l'échantillonnage des sites de naissance

Les moyennes, écarts types réels et calculés des deux versions envisagées pour le biaisage de la sélection des sites de fission, sont résumés par le tableau (4.6). Ces grandeurs sont estimées à partir de 70 réalisations du même calcul avec des chaînes de nombres aléatoires différents.

Méthode de Simulation	$S_1/(S_1 + S_2)$		
	Moyenne	σ calculé	σ réel
Naturelle	0.5172	0.0049	0.1159
Échant. : Prod * Adjoint	0.5249	0.0046	0.1050
Échant. : Adjoint	0.5110	0.0040	0.0980

TABLE 4.6 – Comparaison des écarts types avec la simulation naturelle

Le tableau (4.7) donne les résultats concernant le k_{eff} obtenu par la combinaison générale des estimateurs de k_{eff} pour les trois échantillonnages étudiés ci-dessus.

Méthode de Simulation	k_{eff}	
	Moyenne	écart type (pcm)
Naturelle	0.93304	57
Échant. : Prod * Adjoint	0.93267	60
Échant. : Adjoint	0.93202	61

TABLE 4.7 – Comparaison des k_{eff} avec la simulation naturelle

Les valeurs de k_{eff} obtenues sont cohérentes, les différences sont inférieures à 100 pcm, soit dans l'intervalle des 3σ .

Pour résumer, la modification de l'échantillonnage des sites de naissance d'une nouvelle génération de neutrons permet d'obtenir une réduction de variance sur une configuration difficile. Dans le cas présenté, l'échantillonnage

uniquement par le flux adjoint semble être la meilleure approche. L'écart type réel est réduit de 15% et l'écart type pour un seul aléa est réduit en moyenne de 18%. En comparaison, pour une simulation naturelle, une réduction du même ordre de grandeur de l'écart type, impliquerait la simulation de 1,42 fois plus de neutrons. Cependant, il serait sans doute plus prudent de conserver une part de variabilité dans l'échantillonnage si le couplage est envisagé dans une version de production.

Les calculs ont été étendus à 1000 suites de nombres aléatoires. Les résultats sont concordants avec ceux déjà obtenus pour 70 aléas différents.

Utilisation de Stratégies de Splitting et Roulette

Étudions à travers ce cas, le comportement d'une simulation utilisant une modification du transport, une initialisation uniforme et un échantillonnage naturel des sites de fission. Pour rappel, cela consiste à appliquer des stratégies de splitting (division d'un neutron en plusieurs de poids moindre) et de roulette russe (survie ou mort d'un neutron) selon le déplacement des neutrons. Le splitting est appliqué lorsque le neutron se dirige vers une zone importante au sens du flux adjoint déterministe. La roulette est appliquée dans le cas contraire. Comme pour les parties précédentes, traçons un histogramme (4.20) afin de déterminer la dispersion des valeurs.

L'écart type des réalisations est de 0.1668 alors qu'il était de 0.1159 pour la simulation naturelle. Les calculs montrent donc une dégradation de la répartition des résultats. Cet effet peut s'expliquer par le fait qu'une roulette russe est appliquée lorsque les neutrons se dirigent vers des zones moins importantes. Des neutrons de fort poids vont apparaître dans ces zones. Ces neutrons vont participer à l'estimation du k_{eff} et du flux et induire de la variance.

Les nombres de passages dans les routines de splitting et de roulette russe sont résumés dans le tableau (4.8).

Splitting & Roulette	Splitting		Roulette russe	
	passage	neut. nés	passage	neut. tués
Nombre moyen par étape	522.45	623.31	1293.97	718.93
Par neutron par étapes	0.26	0.31	0.65	0.36

TABLE 4.8 – Nombre moyen par étape de splitting et roulettes russes

Le nombre moyen de passages dans la routine de roulette russe, et par conséquence le nombre de neutrons tués par ce procédé, est de façon signifi-

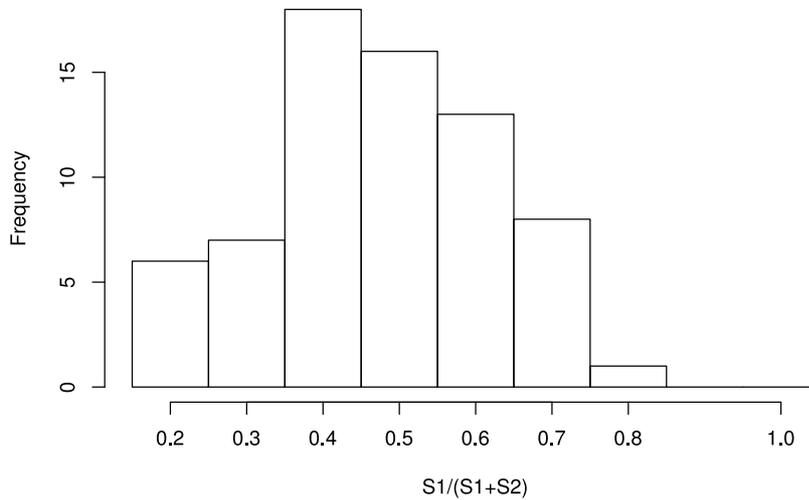


FIGURE 4.20 – Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations avec une modification de l'échantillonnage

cative supérieure au nombre de passages dans la routine de splitting. Cette différence laisse à penser que cette stratégie d'échantillonnage a un comportement qui tend à réduire le nombre moyen de neutrons simulés par étape, tout en conservant, en moyenne, le poids total. En effet, les neutrons naissent selon la fraction source, qui est assez proche du flux adjoint comme le montre la figure (4.21). Donc dans ce cas, le plus grand nombre de neutrons sera produit dans une région importante au sens du flux adjoint. Ces neutrons vont se propager dans des zones moins importantes et donc subir une roulette russe, expliquant ainsi le nombre plus important de roulette que de splitting. De plus, le nombre important de passages dans les routines de roulette et splitting est dû au fait qu'ici les zones déterministes sont du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen des neutrons. Cette stratégie ne semble donc pas pertinente dans ce cas. Dans l'exemple de la modélisation d'un quart de cœur présenté à la partie 4.5, les mailles déterministes seront plus grandes que le libre parcours moyen, ce qui permettra de déterminer si un passage moins fréquent dans les routines est bénéfique.

Le tableau (4.9) donne les résultats de la combinaison générale du k_{eff} calculé par le code MORET.

L'écart type du k_{eff} est augmenté en utilisant ce biaisage. Comme déjà

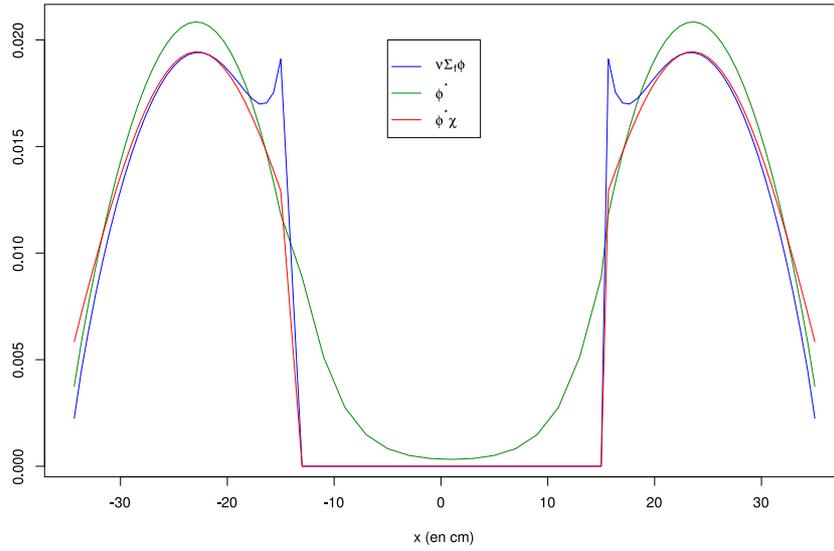


FIGURE 4.21 – Comparaison du taux de production direct, du flux adjoint et du flux adjoint pondéré par le spectre de fission dans le cas symétrique

Méthode de Simulation	k_{eff}	
	Moyenne	écart type (pcm)
Naturelle	0.93304	57
Splitting & Roulette	0.93171	83

TABLE 4.9 – Comparaison des k_{eff} avec la simulation naturelle

souligné, cet effet peut s'expliquer par le fait que la roulette, qui induit de la variance, est plus souvent utilisée que le splitting. Cette voie de modification ne semble donc pas particulièrement efficace pour la résolution d'un problème aux valeurs propres. Cela nous amène à nous poser la question du choix du critère sur lequel repose le splitting et la roulette russe. Le choix d'une importance liée à l'entretien de la réaction en chaîne ne semble pas convenir. Il serait intéressant d'utiliser ce prototype pour tester d'autres critères et en particulier un critère qui conduirait à obtenir un échantillonnage uniforme de la géométrie.

Étude du remplacement de la roulette russe sur la direction par une roulette russe sur le poids

Cette partie a pour objet l'étude de l'impact sur la simulation de l'application d'un roulette russe sur le poids à la place d'une roulette sur la direction. La figure (4.22) présente le même type d'histogramme que pour les méthodes présentées auparavant.

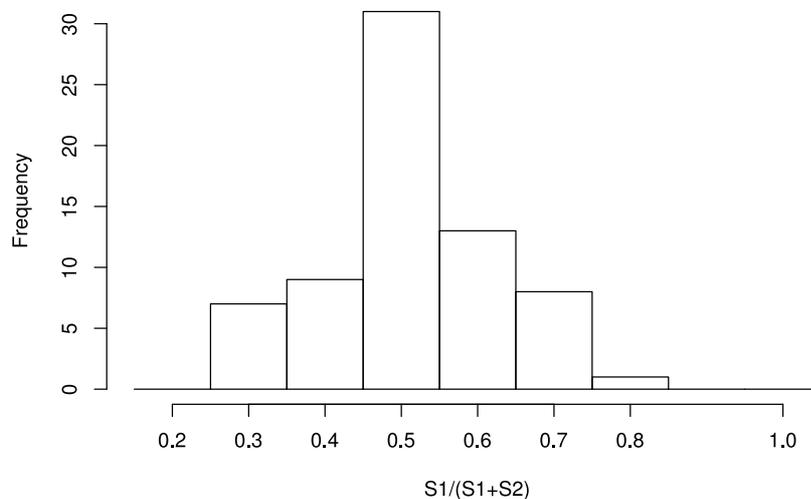


FIGURE 4.22 – Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations avec une stratégie de roulette sur le poids

Cette façon d'appliquer le Splitting et la Roulette russe semble améliorer les résultats. Contrairement à ce que l'histogramme peut laisser penser, la dispersion n'est pas moins importante que pour un calcul avec une simula-

tion naturelle (la moyenne est de 0.5054 et l'écart type de l'échantillon est 0.1174). Ceci conduit à penser qu'une stratégie de roulette et de splitting (en tous cas avec un critère sur l'importance pour la réaction en chaîne) n'est peut être pas la stratégie à adopter pour améliorer la convergence des sources.

La fraction source pour un calcul unique est représentée à la figure (4.23). Elle présente de nombreuses oscillations, ce qui suggèrent que les neutrons basculent d'un coté puis de l'autre de la géométrie. Aucun apport n'a donc été observé avec cette stratégie.

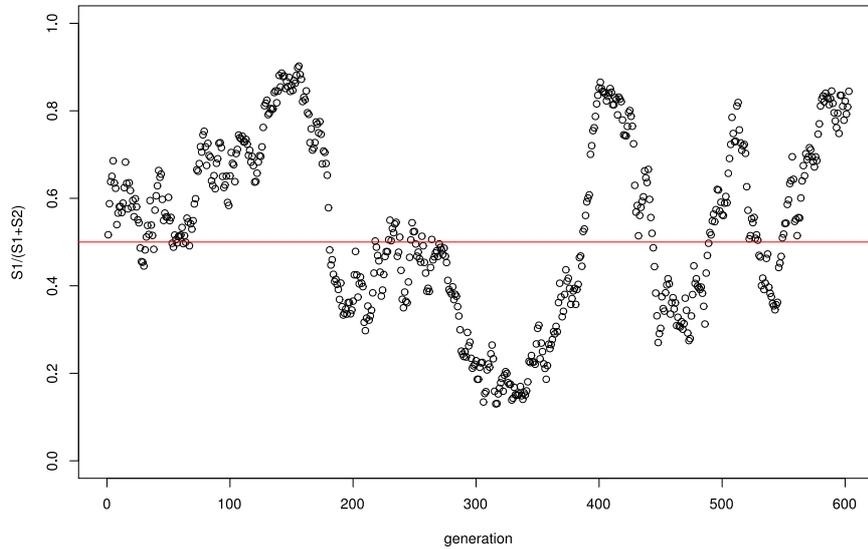


FIGURE 4.23 – Fraction source en utilisant une stratégie de roulette sur le poids

Le tableau (4.10) donne les résultats par la combinaison générale du k_{eff} d'un calcul.

Méthode de Simulation	k_{eff}	
	Moyenne	écart type (pcm)
Naturelle	0.93304	57
Roulette russe sur le poids	0.93305	75

TABLE 4.10 – Comparaison des k_{eff} avec la simulation naturelle

L'utilisation d'une roulette russe sur le poids permet de mieux stabiliser la stratégie de splitting. Cependant, une fois de plus, cette stratégie n'améliore pas la variance sur les scores locaux et semble même détériorer l'estimation de la fraction source en introduisant des oscillations importantes des neutrons entre les deux volumes fissiles.

4.4.3 Temps de calcul

Dans cette partie, nous allons regarder les temps de calcul et figures de mérite des différentes approches de couplage afin de compléter cette étude.

Temps de calcul pour l'initialisation

Les temps de calcul indiqués dans cette partie concernent le cas asymétrique. Le tableau (4.11) détaille la comparaison des temps de calcul et des figures de mérite. Ici nous utiliserons la figure de mérite définie par $FOM = \frac{1}{\sigma^2 T}$ où σ est l'écart type réel.

Méthode d'initialisation	Temps de calcul (s)		Figure de Mérite normalisée
	DRAGON	MORET	
Uniforme sur la géométrie	0	57.5	1
$\phi^* \chi$	25.58	59.3	1.48
Autre version de $\phi^* \chi$	25.58	54.2	1.57

TABLE 4.11 – Comparaison des temps de calculs

Bien que les figures de mérite soient meilleures avec l'initialisation automatique, le temps de calcul déterministe est ici une difficulté. Il pourrait être réduit en relâchant les critères de convergence sur le flux et le k_{eff} ou en réduisant le nombre de mailles, c'est-à-dire en augmentant la taille de la maille élémentaire. Une autre possibilité est de réduire le nombre de groupes sur lequel s'effectue le calcul déterministe. Il serait d'ailleurs intéressant de quantifier l'impact d'un relâchement des contraintes du calcul déterministe sur les différentes modifications envisagées dans cette thèse. Étant donné les gradients de flux dans ce problème, un calcul de diffusion ne convient pas. Cependant, il serait intéressant de voir si cela ne suffirait pas à obtenir une information suffisante pour l'initialisation. Cela rejoint la question de savoir quelle précision est nécessaire sur le flux adjoint déterministe pour l'initialisation.

Dans le code MORET, la lecture des données du flux adjoint ainsi que le placement selon celui-ci ajoute un coût qui représente, dans ce cas, 3% du

calcul. À des fins de test de temps de calcul, une version, notée « Autre version de $\phi^*\chi$ » dans le tableau, a été étudiée. Pour cette version, les neutrons naissent de façon ponctuelle au milieu des volumes déterministes. Dans ce cas, le temps passé dans le code MORET est inférieur à l'initialisation uniforme de par le fait que la routine de tirage de nombre aléatoire n'est pas utilisée.

Temps de calculs pour l'échantillonnage inter-génération

Les temps de calcul indiqués dans cette partie concernent le cas symétrique. Les trois étapes « calcul déterministe », « lecture du flux adjoint » et « repérage des sites de fission dans la géométrie déterministe » sont responsables du temps de calcul supplémentaire apporté par l'utilisation d'un pré-calcul déterministe. Le tableau (4.12) compare les temps de calcul en fonction des différentes méthodes d'échantillonnage.

Méthode d'échantillonnage	Temps de calcul (s)		figure de mérite $1 / \sigma^2 T$
	DRAGON	MORET	
Naturelle $f(i) = \frac{\int_{V_i} \nu \Sigma_f \phi_{mc}}{\int_{V_{tot}} \nu \Sigma_f \phi_{mc}}$	0	53.8	1.3837
Adjoint * production $\tilde{f}_n(i) = \frac{f_n(i) \phi_{det}^*(i)}{\sum_i f_n(i) \phi_{det}^*(i)}$	25.58	86.6	0.8085
Adjoint uniquement $\tilde{f}_n(i) = \frac{\phi_{det}^*(i)}{\int_{V_{tot}} \phi_{det}^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}$	25.58	82.8	0.9625

TABLE 4.12 – Comparaison des temps de calcul

Comme pour la partie sur l'initialisation, le calcul déterministe pénalise le temps de calcul du schéma de couplage. De plus, la localisation des sites potentiels de fission induit un coût de calcul important. Le système de repérage devra être revu. En particulier, la localisation du site de fission, uniquement à partir des coordonnées, ne convient peut être pas et le suivi de changement volume déterministe pourrait être plus rentable.

4.4.4 Test de l'utilisation d'un pré-calcul déterministe direct

Dans cette partie, nous avons remplacé le flux adjoint par un taux de production par fission direct, afin d'avoir un aperçu rapide d'un tel couplage. Les résultats présentés ici ne représentent qu'une première approche de l'utilisation d'une grandeur déterministe directe.

Utilisation du taux de production obtenu par un calcul direct pour l'initialisation

Ici, seule l'initialisation est modifiée. Les calculs sont menés pour le cas légèrement asymétrique. Une initialisation par le taux de production direct déterministe nous fournit les résultats résumés dans les tableaux (4.13) et (4.14) pour la fraction source et le k_{eff} dans le cas asymétrique.

Méthode d'initialisation	$\frac{S1}{S1+S2}$	
	Moyenne	écart type réel
uniforme (150 étapes inactives)	0.9726	0.0062
$\phi_{det}^* * \chi$	0.9738	0.0042
$\nu \Sigma_f \phi_{det}$	0.9733	0.0044

TABLE 4.13 – Fraction source du volume 1 pour une initialisation par le taux de production d'un calcul déterministe direct pour le cas asymétrique

L'initialisation selon le taux de production direct normalisé ou le flux adjoint pondéré par le spectre de fission donnent des résultats très similaires. L'initialisation par un pré-calcul déterministe peut donc se faire avec une grandeur directe ou adjointe. La réduction de variance correspond à la différence entre le nombre d'étapes actives.

Méthode d'initialisation	k_{eff}	
	Moyenne	écart type (pcm)
uniforme (aucune étape inactive)	0.92909	61
$\phi_{det}^* \chi$	0.93128	61
$\nu \Sigma_f \phi_{det}$	0.93228	61

TABLE 4.14 – k_{eff} pour une initialisation par le taux de production d'un calcul déterministe direct pour le cas asymétrique

Dans ce cas, l'influence de l'initialisation sur le k_{eff} est nulle, ce qui était prévisible.

Utilisation du taux de production obtenu par un calcul direct pour l'échantillonnage des sites de fission

Dans cette partie, seul l'échantillonnage des sites de fission est modifié selon 4.6. Les calculs sont menés pour le cas symétrique. L'échantillonnage en utilisant le taux de production déterministe donne les résultats résumés dans le tableau (4.15).

Méthode d'échantillonnage	Moyenne	$\frac{S1}{S1+S2}$ écart type réel
Naturelle	0.5172	0.1159
$f'(j) = \frac{\nu \sum_f \phi_{det}(j) f_{mc}(j)}{\sum_k \nu \sum_f \phi_{det}(k) f_{mc}(k)}$	0.5028	0.1332
$f'(j) = \frac{\nu \sum_f \phi_{det}(j)}{\sum_k \nu \sum_f \phi_{det}(k)}$	0.4983	0.1105

TABLE 4.15 – Fraction source du volume 1 perturbé par un taux de production déterministe sur la géométrie symétrique

De façon assez surprenante, l'utilisation du taux de production direct ne réduit pas la dispersion de la fraction source mais l'augmente au contraire. Il semble donc que l'utilisation de cette grandeur directe n'a pas d'intérêt pour modifier l'échantillonnage des sites de fission.

4.4.5 Résumé et conclusions sur ce cas

Toutes les conclusions qui suivent se basent sur l'étude du cas précédent et demandent à être confirmées par d'autres cas tests. L'initialisation du terme source permet de réduire de façon considérable le transitoire en se positionnant de façon très proche du mode fondamental. De plus, mis à part le calcul déterministe, le coût supplémentaire de simulation est très faible. Comme évoqué précédemment, relâcher les critères de convergence et réduire le nombre de groupes d'énergie permettraient d'améliorer la figure de mérite de ce schéma. La modification du choix des sites de naissance semble apporter une réduction de variance notable, mais le coût des calculs supplémentaires est important. Cette démarche pourrait cependant être améliorée avec une optimisation de l'implémentation actuelle ou une implémentation différente. La stratégie de splitting et de roulette russe, sous cette forme, ne semble pas pertinente dans ce cas d'étude. Il serait intéressant d'essayer des adjoints représentant une importance différente, comme par exemple celle exploitée dans la méthode FW-CADIS [37, 38] qui semble donner des résultats intéressants par l'utilisation d'un adjoint différent. De façon générale, les gains réalisés par les couplages étudiés, ou ceux réalisés par d'autres équipes, ne semblent pas justifier de réaliser un environnement de couplage déterministe Monte Carlo uniquement pour les calculs de criticité. En revanche si un tel environnement venait à être développé pour d'autres raisons, il serait intéressant de reprendre les études dans cette voie.

Passons maintenant à l'exemple suivant qui s'attèle à tester le couplage à partir d'un flux adjoint obtenu par un calcul de diffusion.

4.5 Validation du couplage dans le cas d'un adjoint de diffusion

Dans ce cas test, nous nous intéressons à un adjoint issu d'un calcul de diffusion, et la possibilité d'étendre l'utilisation d'un flux adjoint déterministe dans un calcul Monte Carlo avec une géométrie de la dimension d'un cœur.

L'exemple suivant est inspiré du calcul d'un quart de cœur. La géométrie est illustrée par la figure (4.24) qui représente une coupe radiale du modèle fictif et la figure (4.25) qui représente une coupe dans le sens de la hauteur du réacteur.

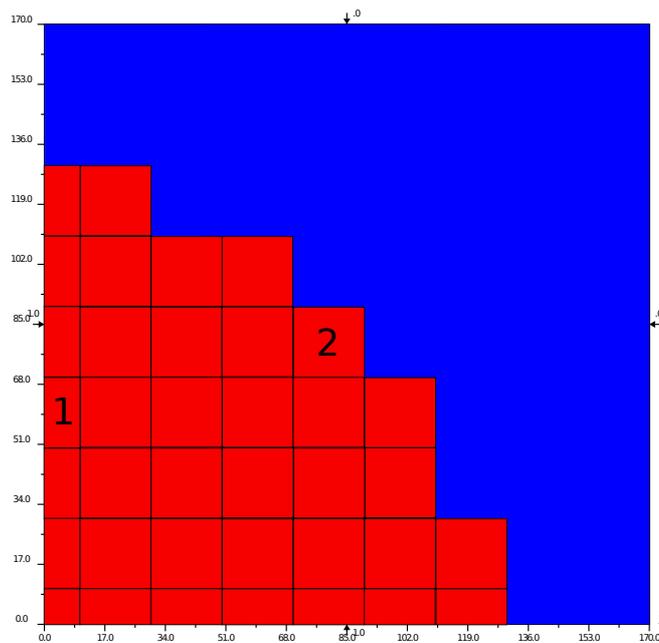


FIGURE 4.24 – Coupe en $Z = 150$ de la géométrie d'un quart de cœur

Par soucis de simplification, tous les assemblages sont identiques. Ils sont homogénéisés sur un modèle d'assemblage de REP standard avec 169 crayons (17x17). L'enrichissement en uranium 235 est de 3.5% .

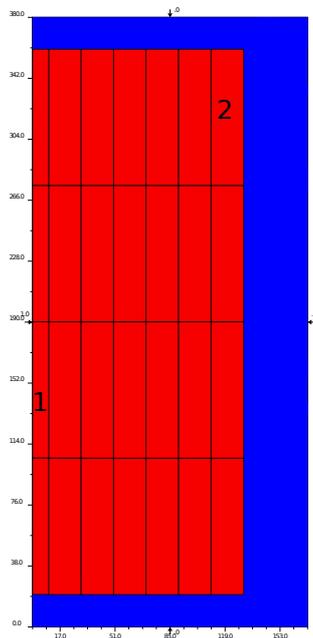


FIGURE 4.25 – Coupe en $X = 20$ de la géométrie d'un quart de cœur

Modélisations

Dans les deux calculs, la géométrie a été modélisée en 3 dimensions. Pour simuler un cœur entier à partir de ce quart, des conditions de réflexion sont appliquées en $X=0$ et $Y=0$. Les conditions aux autres limites sont des conditions de vide. Dans cette partie, nous nous intéresserons uniquement aux grandeurs dans les volumes 1 et 2 annotés aux figures (4.24) et (4.25). Ce choix permettra de comparer l'impact des stratégies de couplage, pour un volume au centre et un en périphérie du cœur. Les dimensions du cœur sont de 260 cm de diamètre et 360 cm de hauteur. Il est réfléchi par 40 cm d'eau radialement et 20 cm axialement. Les assemblages sont découpés en quatre volumes afin de pouvoir estimer des taux de réaction à différentes hauteurs.

Modèle Dragon DRAGON a été utilisé afin d'effectuer un calcul de production de sections efficaces macroscopiques homogénéisées. La bibliothèque JEF2.2 à 172 groupes est utilisée. Les sections efficaces macroscopiques, transférées aux codes Monte Carlo et de diffusion, sont isotropes, c'est-à-dire avec un développement à l'ordre P0. Le calcul multi-cellules a été mené sur un assemblage 17 x 17 en 2 dimensions. Ce calcul d'assemblage est celui défini dans le cas test TCDR02.c2m livré avec le code DRAGON. Ce calcul cellule a été modifié afin d'obtenir des sections macroscopiques pour l'assemblage homogénéisé ainsi que les sections efficaces de l'eau à 172 groupes et à

2 groupes. La résolution du problème se fait par la méthode des probabilités de collision.

Modèle Donjon Pour le calcul de flux sur un quart de cœur, une résolution par un calcul de diffusion est choisie. Les sections de l'eau du calcul cellule ont été utilisées pour les sections réflecteur. Des sections réflecteurs ajustées auraient été plus réaliste. Cependant, nous ne cherchons pas ici à réaliser un calcul de cœur réel mais simplement un cas représentatif des dimensions d'un cœur. La méthode de résolution utilisée ici est une méthode d'éléments finis.

Modèle MORET Le modèle Monte Carlo est un modèle en 3 dimensions. Pour les sections efficaces, les sections à 172 groupes issues du calcul assemblage sont utilisées. Selon l'axe Z, les assemblages sont divisés en quatre afin de pouvoir comparer les taux de réaction à différents endroits du cœur. Les calculs Monte Carlo ont été menés avec 968 neutrons par étape, ainsi qu'avec 9680 neutrons par étape pour un total de 1000 étapes. Le nombre total d'étapes sera pris constant. Le nombre d'étapes inactives sera estimé dans la partie suivante.

Comme pour le cas test précédent, commençons par étudier l'apport de l'initialisation.

4.5.1 Apport de la méthode d'initialisation

Dans cette partie, l'initialisation est modifiée, la sélection des sites de fission et le transport sont analogues. Comparons l'effet, sur le k_{eff} et l'entropie de Shannon, d'une initialisation automatique en comparaison d'une initialisation uniforme sur les volumes fissiles. Nous observerons ensuite l'effet de l'initialisation sur l'estimation des taux de production par fission dans deux volumes différents du cœur. Le découpage utilisé pour l'entropie de Shannon est un maillage 15x15x15.

Les figures (4.26) et (4.27) représentent respectivement l'évolution du k_{eff} moyen avec une initialisation uniforme et une initialisation par un flux adjoint de diffusion pour différents estimateurs.

La figure (4.26) montre un transitoire important et souligne le poids des premières estimations du k_{eff} dans le cas d'une simulation analogue avec une initialisation uniforme.

La figure (4.27) nous montre l'évolution du k_{eff} moyen en fonction des générations avec une initialisation par le flux adjoint pondéré par le spectre de fission. La solution étant une solution de diffusion, elle est différente de

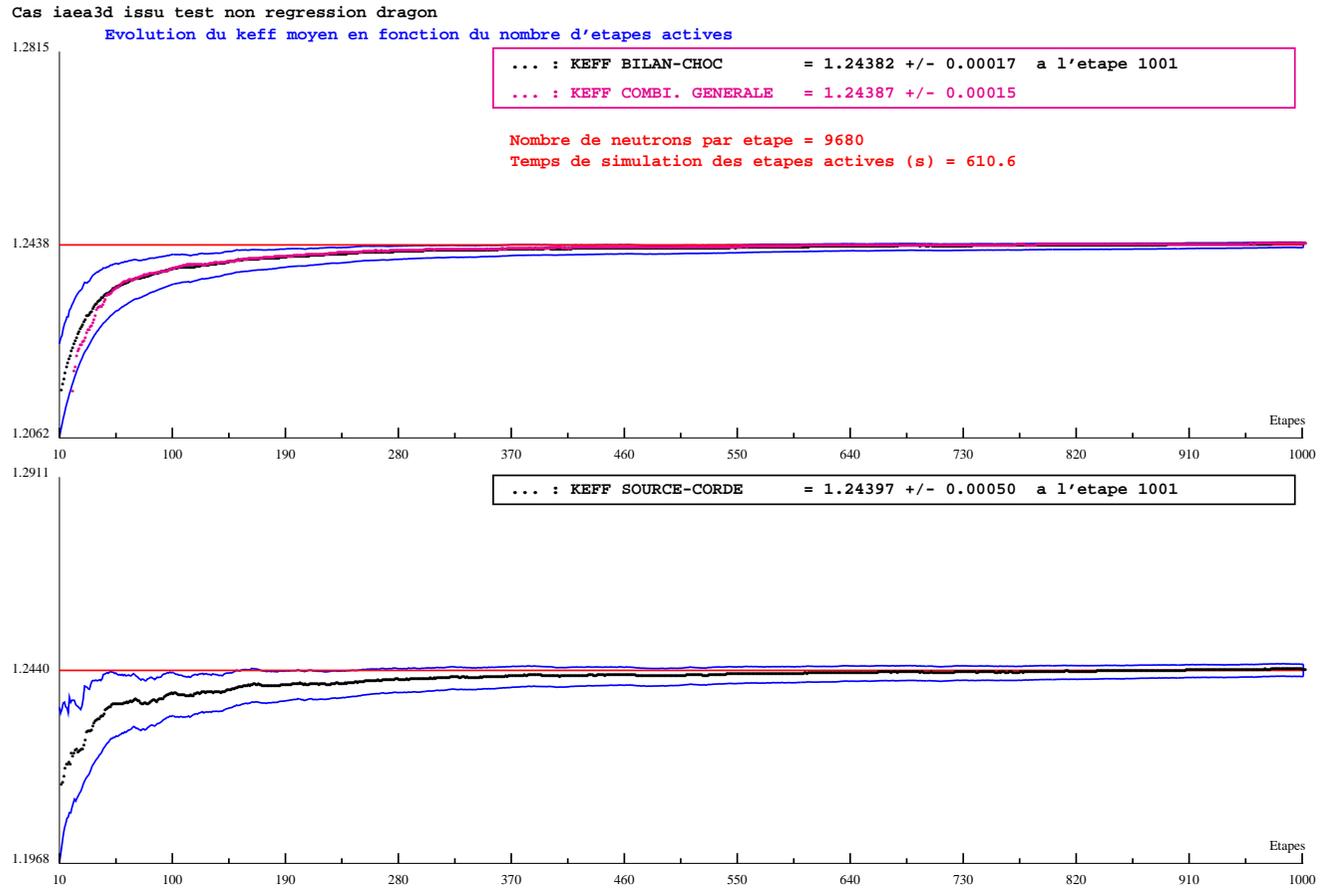


FIGURE 4.26 – Evolution du k_{eff} moyen en fonction des étapes pour une initialisation uniforme sur un quart de cœur

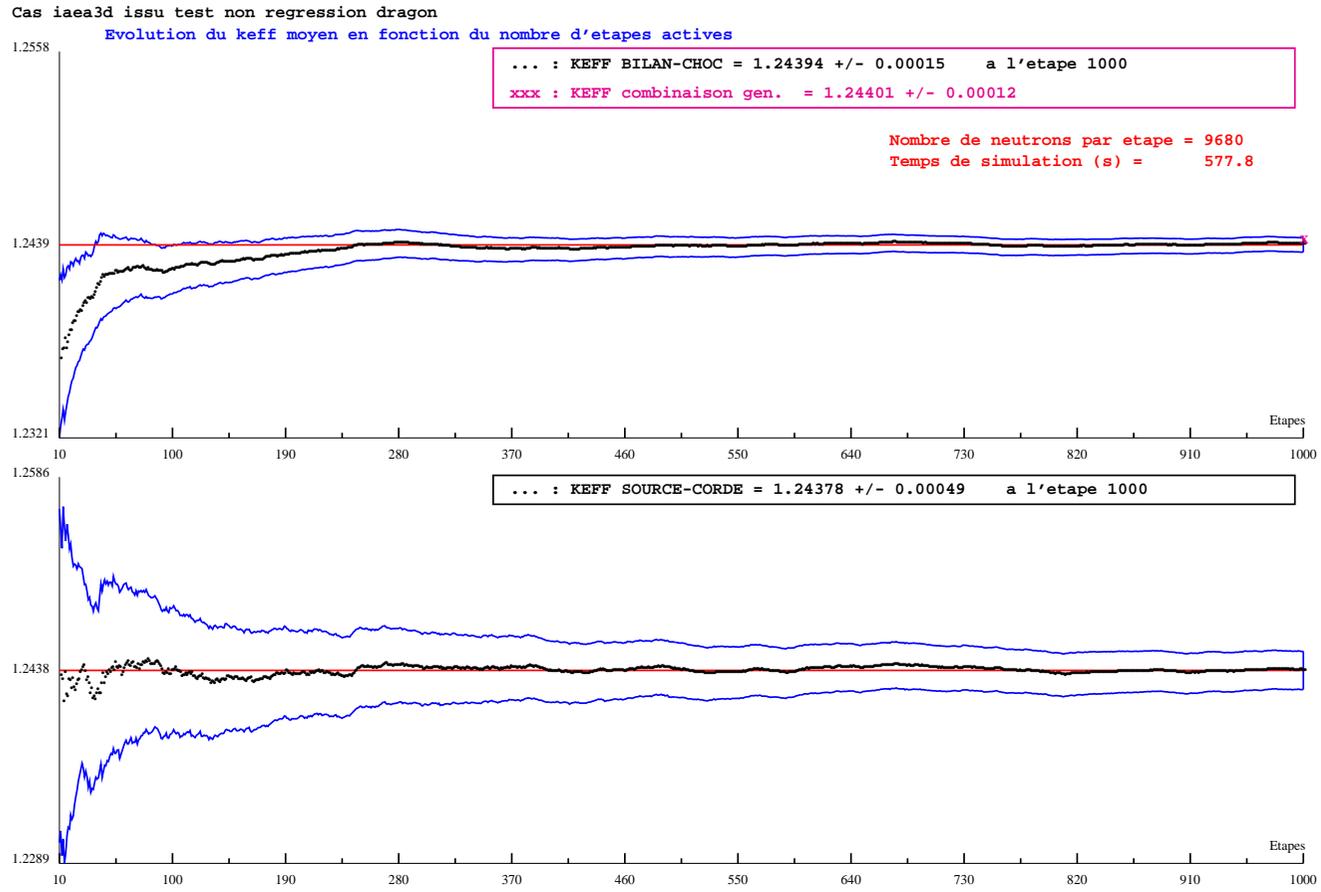


FIGURE 4.27 – Évolution du k_{eff} moyen en fonction des étapes pour une initialisation par un adjoint de diffusion sur un quart de cœur

la solution de transport, notamment au voisinage du réflecteur à cause des forts gradients de flux dans ces zones.

Bien qu'un transitoire subsiste avec l'estimateur BILAN-CHOC, l'initialisation par un adjoint de diffusion, permet dès les premières étapes une bonne estimation du k_{eff} . Le gain en variance est faible étant donné que le nombre d'étapes de convergence pour le k_{eff} est faible devant le nombre d'étapes actives. En revanche, l'estimateur SOURCE-CORDE ne présente pas de transitoire. Cette absence de transitoire pour un estimateur n'a pas été expliquée pour le moment.

Regardons à présent la dispersion de l'entropie de Shannon, tracée à la figure (4.28), obtenue en réalisant 100 calculs avec des aléas différents.

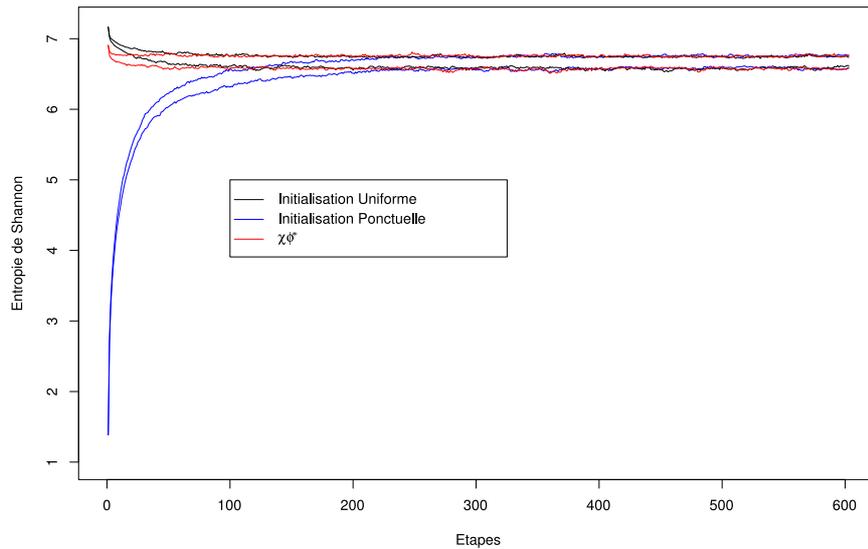


FIGURE 4.28 – Encadrement de l'entropie de Shannon pour différentes initialisations

En se basant sur l'encadrement de l'entropie de Shannon de la figure (4.28), le transitoire peut être estimé à 10 étapes pour l'initialisation par le flux adjoint, 100 étapes pour l'initialisation uniforme et 230 étapes pour une initialisation ponctuelle au centre du cœur. La figure (4.29) présente un agrandissement pour les 200 premières étapes de l'encadrement de l'entropie de Shannon permettant ainsi de mieux voir les différences entre les initialisations uniforme et par le flux adjoint.

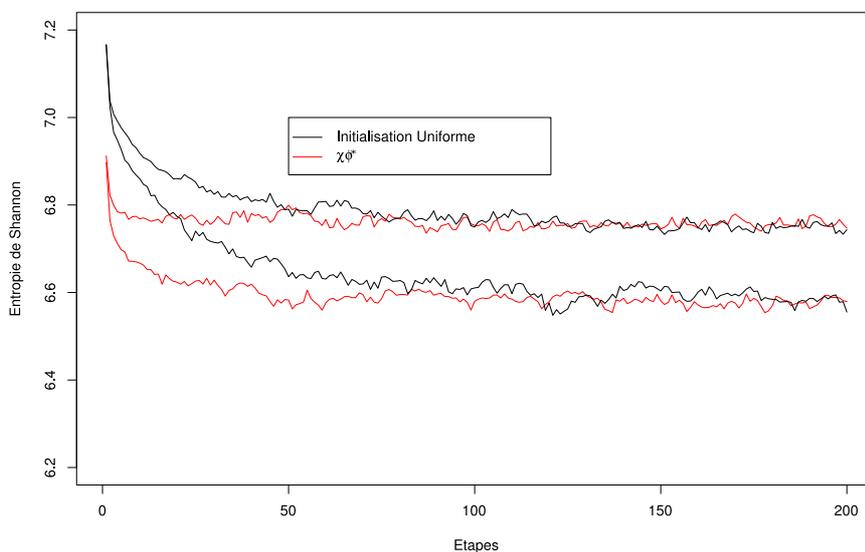


FIGURE 4.29 – Encadrement de l’entropie de Shannon pour une initialisation uniforme et une initialisation par un adjoint : zoom sur les premières étapes

Comparons les estimations des taux de production dans les volumes tests au centre et en périphérie comme indiqué sur les figures (4.24) et (4.25). Le tableau (4.16) résume les moyennes, les écarts types réels et calculés des volumes 1 et 2, avec 9680 neutrons par étape pour des initialisations uniforme et modifiée par l’adjoint. Les écarts types réels sont obtenus en réalisant 100 calculs avec des suites de nombres aléatoires différentes et en calculant l’écart type de ces simulations. Comme déjà défini page 88, l’écart type calculé correspond à la moyenne des écarts types obtenus pour chaque calcul. Le nombre d’étapes inactives considéré est celui déterminé précédemment grâce à l’encadrement de l’entropie de Shannon.

Le tableau (4.17) résume les calculs menés avec 968 neutrons.

La différence entre les variances calculées est due, comme pour l’exemple précédent, à la différence entre le nombre d’étapes actives des différentes initialisations. Ici l’initialisation par un flux adjoint de diffusion permet de supprimer une grande partie du transitoire, ne laissant que quelques étapes de convergence. Il est à remarquer que lors d’une simulation avec 9680 neutrons par étape, contrairement à celle avec 968 neutrons, la variance réelle n’est pas améliorée avec la nouvelle technique d’initialisation.

Méthode d'initialisation	Volume 1 (centre)			Volume 2 (périphérie)		
	Moy.	σ calc.	σ réel	Moy.	σ calc.	σ réel
Uniforme	1.04e-2	7.63e-5	4.20e-4	2.37e-3	3.54e-5	1.74e-4
Ponctuelle	1.08e-2	8.19e-5	6.04e-4	2.19e-3	3.81e-5	2.11e-4
$\phi^*\chi$	1.05e-2	7.25e-5	4.40e-4	2.35e-3	3.39e-5	1.80e-4

TABLE 4.16 – Comparaison des taux de production pour des initialisations différentes pour 9680 neutrons par étape

Méthode d'initialisation	Volume 1 (centre)			Volume 2 (périphérie)		
	Moy.	σ calc.	σ réel	Moy.	σ calc.	σ réel
Uniforme	1.11e-2	2.49e-4	1.73e-3	1.90e-3	9.86e-5	6.84e-4
Ponctuelle	1.09e-2	2.61e-4	1.19e-3	1.93e-3	1.10e-4	4.18e-4
$\phi^*\chi$	1.05e-2	2.26e-4	1.28e-3	2.16e-3	1.02e-4	5.47e-4

TABLE 4.17 – Comparaison des taux de production pour des initialisations différentes pour 968 neutrons par étape

Le tableau (4.18) résume l'influence sur le k_{eff} des différentes initialisations.

Méthode d'initialisation	k_{eff}	
	Moyenne	Écart type calculé (pcm)
Uniforme (968)	1.24541	38
Ponctuelle (968)	1.24556	40
$\phi^*\chi$ (968)	1.24474	36
Uniforme (9680)	1.24456	12
Ponctuelle (9680)	1.24387	13
$\phi^*\chi$ (9680)	1.24447	11

TABLE 4.18 – Comparaison des k_{eff} entre les différentes initialisations

Comme déjà observé dans les cas de validation plus simple présentés précédemment, l'effet bénéfique sur l'amélioration de l'estimation du k_{eff} est relativement faible.

Temps de calcul

Le tableau (4.19) présente les temps de calcul des simulations déterministe et Monte Carlo. Concernant l'initialisation, les tests précédents ont été

menés avec un adjoint de diffusion à 172 groupes, car il servira aussi pour tester l'utilisation des techniques de biaisage présentées dans les parties suivantes (notamment pour le biaisage sur le spectre de fission). Cependant, un adjoint à 2 groupes pourrait plus facilement être utilisé car c'est un flux adjoint intégré en énergie qui est utilisé pour initialiser le calcul. La figure de mérite est faite à partir des écarts types réels des calculs à 968 neutrons par étape. La figure de mérite est définie comme $FOM = \frac{1}{\sigma^2 T}$, avec σ l'écart type réel.

Méthode d'initialisation	Temps de calcul (s)			Figure de mérite
	DRAGON	DONJON	MORET	
Uniforme	1.64	0	548.3	1
$\phi^* \chi$ (2g)	1.64	1.39	549.5	1.87
$\phi^* \chi$ (172g)	1.64	3899.5	549.5	1.5e-3

TABLE 4.19 – Comparaison des temps de calculs sur le quart de cœur avec 968 neutrons par étapes

L'utilisation d'un adjoint à 172 groupes n'a de sens que dans le cas où une stratégie de roulette et de splitting est utilisée. Étant donné le temps nécessaire au calcul de diffusion à 172 groupes, il semble impossible que les stratégies de splitting et de roulette apportent suffisamment pour compenser ce temps de calcul déterministe. En effet pour que ce soit rentable, il faudrait que ce biaisage nous fasse gagner au moins deux ordres de grandeurs sur la variance.

Pour conclure, l'initialisation automatique permet de commencer le calcul sur un mode qui est très proche du mode fondamental réduisant ainsi la phase de convergence. Si ce couplage est envisagé en production, cela permettrait de commencer les encaissements après quelques étapes de calcul et ainsi d'augmenter la statistique et d'éviter une mauvaise initialisation des calculs.

Comme souligné par le tableau (4.19), le recours à l'utilisation d'un adjoint de diffusion calculé sur un nombre réduit de groupes peut être une piste intéressante à poursuivre.

4.5.2 Impact de l'échantillonnage inter-génération

Dans cette partie, seul l'échantillonnage des sites de fission a été modifié, l'initialisation et le transport sont analogues. Comme illustré aux tableaux (4.20) et (4.21), la modification de la sélection des sites de fission ne semble pas avoir d'impact bénéfique sur l'écart type des taux de production par

fission. Pour rappel de la page 88, l'écart type calculé est la moyenne des écarts types obtenus lors des différents calculs.

Méthode d'échantillonnage	Volume 1 (centre)			Volume 2 (périphérie)		
	Moy.	σ calc.	σ réel	Moy.	σ calc.	σ réel
Analogue	1.11e-2	2.49e-4	1.73e-3	1.90e-3	9.86e-5	6.84e-4
Adjoint	1.08e-2	3.15e-4	1.50e-3	1.85e-3	2.30e-4	7.60e-4
Adj. * prod.	1.08e-2	2.50e-4	1.47e-3	2.06e-3	1.88e-4	7.55e-4

TABLE 4.20 – Comparaison des différents taux de production avec une modification de la sélection des sites de fission avec 968 neutrons par étapes

Méthode d'échantillonnage	Volume 1 (centre)			Volume 2 (périphérie)		
	Moy.	σ calc.	σ réel	Moy.	σ calc.	σ réel
Analogue	1.04e-2	7.63e-5	4.20e-4	2.37e-3	3.54e-5	1.74e-4
Adjoint	1.06e-2	7.50e-5	4.39e-4	2.30e-3	3.58e-5	1.90e-4
Adj. * prod.	1.06e-2	7.49e-5	4.43e-4	2.31e-3	6.37e-5	2.75e-4

TABLE 4.21 – Comparaison des différents taux de production avec une modification de la sélection des sites de fission avec 9680 neutrons par étapes

L'utilisation d'un flux adjoint de diffusion ne semble pas être une piste d'amélioration intéressante lorsque l'on souhaite modifier l'échantillonnage entre deux générations. Deux explications sont envisageables. D'une part, dans notre cas, les volumes déterministes sont les mêmes que les volumes Monte Carlo et n'apportent donc que peu d'informations au calcul Monte Carlo. D'autre part, le calcul d'un adjoint asymptotique par diffusion peut ne pas être assez précis, l'utilisation d'autres types d'adjoint pourra être envisagé.

Le tableau (4.22) résume l'influence sur le k_{eff} de la modification de l'échantillonnage des sites de naissance.

Cette modification de l'échantillonnage ne réduit pas la variance calculée du k_{eff} lors d'un calcul de cœur. Il semblerait, en se basant sur cet exemple, que contrairement à un adjoint de transport, un adjoint de diffusion ne convienne pas à la modification de la sélection des sites de naissance. Afin de confirmer ce diagnostic, un calcul avec un maillage raffiné par rapport au découpage Monte Carlo devra être mené afin de déterminer si l'absence d'amélioration provient du calcul de diffusion ou du découpage géométrique déterministe du même ordre que le découpage Monte Carlo.

Méthode d'échantillonnage	k_{eff}	
	Moyenne	Écart type calculé (pcm)
Uniforme (968)	1.24541	38
Adjoint (968)	1.24623	61
Adj. * prod. (968)	1.24532	52
Uniforme (9680)	1.24456	12
Adjoint (9680)	1.24407	12
Adj. * prod. (9680)	1.24407	18

TABLE 4.22 – Comparaison des k_{eff} en modifiant la sélection des sites de naissance pour le quart de cœur

4.5.3 Utilisation de Stratégies de Splitting et de Roulette

Ici, seul le transport est modifié. Intéressons nous à l'application d'une stratégie de splitting et de roulette sur ce cas. Les techniques de biaisage sont appliquées à partir d'un flux adjoint de diffusion à 172 groupes. Le tableau (4.23) compare les variances associées à des estimations de taux de production par fission. La variance réelle est estimée à partir de 100 calculs avec des chaînes de nombres aléatoires différentes.

Méthode de simulation	Volume 1 (centre)			Volume 2 (périphérie)		
	Moy.	σ calc.	σ réel	Moy.	σ calc.	σ réel
Analogue	1.11e-2	2.49e-4	1.73e-3	1.90e-3	9.86e-5	6.84e-4
Imp. Samp.	1.05e-2	2.31e-4	1.40e-3	2.21e-3	1.46e-4	5.82e-4

TABLE 4.23 – Comparaison des différents taux de production avec une modification de la marche aléatoire avec 968 neutrons par étapes

Dans ce cas, les stratégies de splitting/roulette réduisent d'environ 15% la variance réelle des estimateurs. Cette réduction vient sans doute du fait que les volumes déterministes sont d'un ordre de grandeur plus grand que le libre parcours moyen. Cela réduit le nombre moyen de splittings ou de roulettes subi par un neutron par rapport au cas où un adjoint de transport est utilisé. De plus, la mise en pratique nous indique un plus grand nombre de neutrons nés par splitting que de neutrons morts par roulette comme l'indique le tableau (4.24) qui résume les statistiques de splitting et roulette pour deux aléas différents.

Cependant, cette stratégie est utilisée avec un adjoint à 172 groupes qui demande un temps de calcul significatif (cf. 4.19). De plus, le temps mis uniquement par la simulation Monte Carlo modifiée est deux fois plus important

Splitting & Roulette	Splitting		Roulette russe	
	passage	neut. nés	passage	neut. tués
Par étape - aléa 1	22.9	109.2	122.2	101.6
Par neut. par étape - aléa 1	0.023	0.110	0.130	0.100
Par étape - aléa 2	21.5	94.0	107.2	88.6
Par neut. par étape - aléa 2	0.022	0.100	0.110	0.090

TABLE 4.24 – Nombre moyen par étape de splitting et roulette russe pour 968 neutrons simulés par étape

que le temps pris par la simulation analogue. Afin de réduire ces temps de calcul, il serait intéressant de tester cette stratégie avec un flux adjoint de diffusion calculé sur 2 groupes.

Le tableau (4.25) résume l'effet sur le k_{eff} en appliquant une stratégie de splitting et de roulette russe.

Méthode d'échantillonnage	k_{eff}	
	Moyenne	Écart type calculé (pcm)
Uniforme (968)	1.24541	38
Splitting & Roulette(968)	1.24767	60

TABLE 4.25 – Comparaison des k_{eff} en modifiant la marche aléatoire des neutrons pour le quart de cœur

De la même façon que pour le cas test précédent, la variance calculée pour le k_{eff} augmente lors de l'utilisation d'un biaisage du noyau de transport par rapport à une simulation analogue. Ainsi, cette modification ne semble pas convenir lorsqu'un adjoint de diffusion est utilisé, compte tenu du temps de calcul d'un adjoint de diffusion à 172 groupes.

Roulette russe sur le poids

Cette façon de modifier la marche aléatoire ne pourra pas être utile. En effet, lors des calculs, il a été constaté que certains neutrons passent du modérateur au cœur (effet sur les parties les plus éloignées du réflecteur) entraînant la création de nombreux neutrons car le ratio entre le flux adjoint de ces deux zones peut atteindre plusieurs ordres de grandeur. La roulette russe sur la direction prévient ce genre d'évènement en tuant le neutron lorsqu'il se dirige vers cette zone de moindre importance.

Conclusions sur ce cas

L'étude de ce cas nous indique que l'utilisation d'un flux adjoint calculé grâce à un module de diffusion n'apporte un gain que pour l'initialisation du calcul et avec un adjoint calculé sur un faible nombre de groupes. Si un couplage dans cette optique est envisagé, il est sans doute suffisant de déterminer le taux de production par un calcul direct pour estimer le terme initial.

4.6 Conclusion

Le couplage d'un code Monte Carlo avec un code déterministe, via un pré-calcul de flux déterministe, permet de supprimer le transitoire, mais ne répond pas de façon efficace aux problèmes de sous-échantillonnage, ni ne réduit significativement la variance des estimateurs locaux. Nous venons de décrire deux cas tests menés avec des voies de calculs du flux adjoint différentes (S_n et diffusion) et pour des dimensions de systèmes différents. Cette validation, loin d'être exhaustive, permet néanmoins de discriminer certaines approches.

Le placement automatisé de la première source de neutrons, via un flux déterministe, rend optimal l'initialisation du calcul, dans le sens où la distribution alors utilisée est très proche du mode fondamental. Cette proximité réduit le nombre d'étapes de convergence du flux calculé vers le mode fondamental. Le nombre d'étapes inactives est alors réduit à quelques étapes, moins de dix dans les cas étudiés. Cette observation est valable quelle que soit la façon de calculer le flux adjoint, transport ou diffusion. Étant donné que la grandeur utilisée pour l'initialisation est intégrée en énergie, il est sans doute possible de réduire le nombre de groupes sur lequel sont menés les calculs sans trop diminuer la qualité de l'initialisation. Ce choix diminuera le temps de calcul déterministe et améliorera par conséquent la figure de mérite. Cette initialisation automatique minimise le risque d'un placement inadéquat de la première génération par l'utilisateur en le déchargeant de ce choix. Une telle démarche est à double tranchant car elle peut avoir un effet de désresponsabilisation de l'utilisateur. Enfin, cela permet de considérer quasiment toutes les étapes comme des étapes actives diminuant ainsi les variances calculée et réelle.

La modification de la sélection des sites de fission améliore l'estimation des grandeurs locales lorsque le couplage est réalisé avec un adjoint de transport, et avec un découpage déterministe plus fin que le découpage Monte Carlo. Cependant, le surcoût engendré par la nouvelle façon de gérer le stockage des sites de fission rend cette technique moins intéressante. Il faudrait revoir de façon astucieuse le système de repérage du neutron Monte

Carlo dans le découpage déterministe. Le flux déterministe utilisé étant un flux intégré en énergie, il pourrait aussi être produit par un calcul avec un nombre réduit de groupes d'énergies. L'essai de ce biaisage de la sélection des sites de naissance avec un flux adjoint issu d'un calcul de diffusion n'a pas donné de résultats suffisamment encourageants pour justifier la décision d'entreprendre ce type de développement. Il serait utile de poursuivre ces investigations en regardant l'influence du découpage déterministe sur cette méthode, et notamment en déterminant si un découpage fin avec un adjoint de diffusion permet d'obtenir une réduction de variance significative compte tenu du coût de mise en place d'un tel couplage.

Le biaisage de la marche aléatoire ne semble pas permettre d'améliorer la simulation Monte Carlo. L'utilisation d'une stratégie de splitting et de roulette russe avec un critère sur un flux adjoint de criticité ne semble pas convenir lors de l'utilisation d'un flux adjoint transport. Avec le découpage déterministe considéré, le nombre de neutrons tués par une roulette est supérieur au nombre de neutrons nés par splitting. Cela conduit à une augmentation de la variance pour les estimateurs locaux. Pour l'utilisation d'un adjoint de diffusion, la variance semble diminuer pour les estimateurs locaux, cependant le temps nécessaire pour produire un adjoint de diffusion à 172 groupes et le temps de simulation supplémentaire engendré pénalisent ce gain. Comme déjà évoqué, il serait intéressant de tester un biaisage à quelques groupes d'énergie.

En résumé, le couplage améliore de façon importante la simulation uniquement grâce à une initialisation optimale. En conséquence, la question d'investir sur une mise en production du couplage peut se poser. En effet, une mise en production demanderait un effort important de développement du couplage, pour un gain qui n'apparaît pas si évident. Cependant, il serait intéressant de maintenir le couplage en prototype afin de pouvoir poursuivre des tests lors de l'apparition de nouvelles méthodes. De plus ce maintien permettrait de déterminer le terme source de la simulation lorsqu'un calcul déterministe est déjà réalisé. En effet, un calcul Monte Carlo peut venir appuyer un étude déterministe en tant que calcul de référence. Dans ce cas, les grandeurs déterministes sont déjà calculées et il serait intéressant de pouvoir en tirer profit.

Nous allons maintenant nous intéresser à la détection automatisée du transitoire s'appuyant sur des tests statistiques et sur les séries du k_{eff} et de l'entropie de Shannon.

Chapitre 5

Détection automatisée du transitoire

Comme nous l'avons vu dans la partie 2.2, les calculs de criticité Monte Carlo sont basés sur une méthode itérative. Idéalement, l'encaissement des grandeurs d'intérêt devrait se faire qu'après l'obtention d'une distribution de fission stationnaire. En pratique, il est malheureusement impossible de déterminer, au cours du calcul et de façon certaine, la fin de la convergence des sources. Les séries des scores peuvent alors être biaisées car elles contiennent une partie du transitoire. Nous allons décrire ci-dessous une méthode permettant, après le calcul, de localiser la fin du transitoire [50, 51] et ainsi de retirer a posteriori des scores les étapes détectées comme faisant partie du transitoire. Cette méthode sera ensuite appliquée au k_{eff} ainsi qu'à l'entropie de Shannon [52].

Une remarque importante est nécessaire avant d'entamer ce chapitre. La méthode présentée ci-dessous a pour seul but d'obtenir des séries stationnaires. Elle ne peut en aucun cas assurer une quelconque convergence.

5.1 Introduction aux tests statistiques

Un test statistique est une méthode qui permet de trancher entre deux hypothèses à partir de l'analyse d'un échantillon. Nous allons introduire la construction d'un test statistique à travers un exemple.

5.1.1 Un exemple

L'exemple qui suit est repris de [53]. Les relevés sur de nombreuses années ont permis d'établir que le niveau des pluies en millimètres par an suit une loi normale de moyenne 600 et de variance 100 : $\mathcal{N}(600, 100)$.

Des entrepreneurs affirmaient pouvoir augmenter le niveau moyen des pluies de 50 mm. Leur procédé fut testé sur 9 ans. Les relevés pluviométriques sont résumés par le tableau (5.1).

Année	1	2	3	4	5	6	7	8	9
mm	510	614	780	512	501	534	603	788	650

TABLE 5.1 – Relevés du niveau des pluies sur 9 années

La question est de savoir si ce procédé augmente vraiment le niveau des pluies de 50 mm ou s'il n'a aucun effet. En notant X la variable aléatoire représentant le niveau des pluies, la question est de déterminer quelle hypothèse entre \mathcal{H}_0 et \mathcal{H}_1 est vraie :

$$\begin{cases} \mathcal{H}_0 : \mathbb{E}[X] = 600 \\ \mathcal{H}_1 : \mathbb{E}[X] = 650 \end{cases}$$

Le procédé étant onéreux, les agriculteurs hésitent à investir. L'expérience doit donc les convaincre et pour cela les observations doivent contredire fortement la validité de l'hypothèse \mathcal{H}_0 . C'est-à-dire qu'en considérant \mathcal{H}_0 vraie, les observations traduisent une éventualité improbable.

Les agriculteurs décident de considérer un évènement comme improbable lorsque la probabilité d'occurrence de celui-ci est inférieur à $\alpha = 0.05$. Ils acceptent donc que les évènements rares ne peuvent se produire sans remettre en cause l'hypothèse \mathcal{H}_0 . Ainsi ils acceptent aussi le fait de se tromper dans 5 cas sur 100, cas où justement ces évènements se réalisent quand même.

Comment, à partir des observations, décider de la véracité de l'hypothèse \mathcal{H}_0 ? Puisqu'on s'intéresse à la moyenne, il apparaît naturel de s'intéresser à \bar{X} la moyenne des observations. \bar{X} sera appelée variable de décision. Si \mathcal{H}_0 est vraie, le théorème central limite nous indique que \bar{X} doit suivre une loi $\mathcal{N}(600, \frac{100}{\sqrt{9}})$.

- La règle de décision va alors être la suivante (cf. fig. 5.1) :
- si $\bar{X} > k$, rejeter \mathcal{H}_0 et accepter \mathcal{H}_1
 - si $\bar{X} < k$, conserver \mathcal{H}_0

k est défini par $\mathbb{P}\{\bar{X} > k\} = \alpha = 0.05$, ces valeurs sont facilement accessibles car tabulées. Dans notre cas, k vaut 655. La moyenne observée sur ces 9 années est de $\bar{x} = 610.2$. La conclusion est donc de garder \mathcal{H}_0 et le procédé des entrepreneurs n'apporte rien.

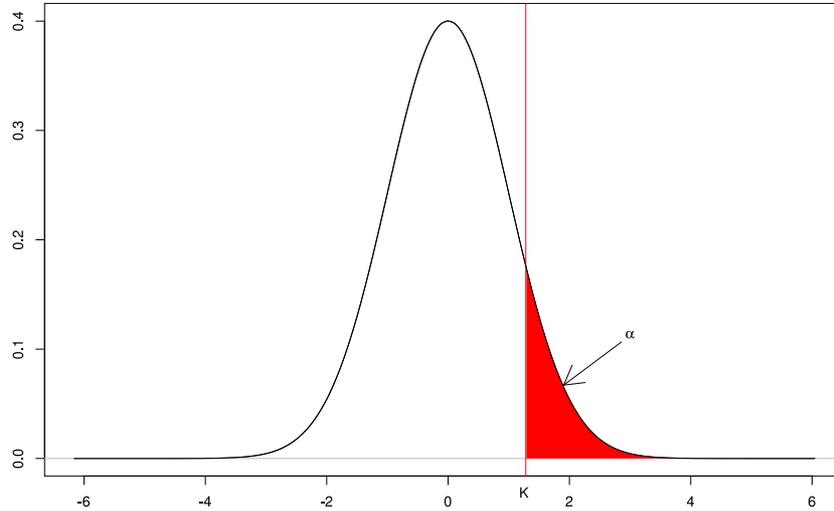


FIGURE 5.1 – Distribution avec la région exclue

Malheureusement, rien ne dit que les agriculteurs ne se sont pas trompés. En effet, le procédé des entrepreneurs peut fonctionner et seul le hasard dû au faible nombre d'observations leur a été défavorable et n'a pas convaincu les agriculteurs. Essayons de déterminer la probabilité d'erreur. Pour cela nous supposons que \mathcal{H}_1 est vraie, et donc \bar{X} suit une loi $\mathcal{N}(m = 650, \sigma = \frac{100}{\sqrt{9}})$. Une erreur est commise à chaque fois que \bar{X} prend une valeur inférieure à k , soit avec la probabilité :

$$\beta = \mathbb{P}\{\bar{X} < k\} \quad (5.1)$$

$$= \int_{-\infty}^k \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - m)^2}{2\sigma^2}\right) dx \quad (5.2)$$

$$= 0.56 \quad (5.3)$$

Ce qui est loin d'être négligeable. Cette erreur est due au recouvrement des distributions comme le montre la figure (5.2).

Il est bon de remarquer que \mathcal{H}_0 et \mathcal{H}_1 ne jouent pas un rôle symétrique. Le choix de \mathcal{H}_0 et \mathcal{H}_1 est souvent dicté par la possibilité de construire la densité associée à l'hypothèse \mathcal{H}_0 et l'objectif désiré.

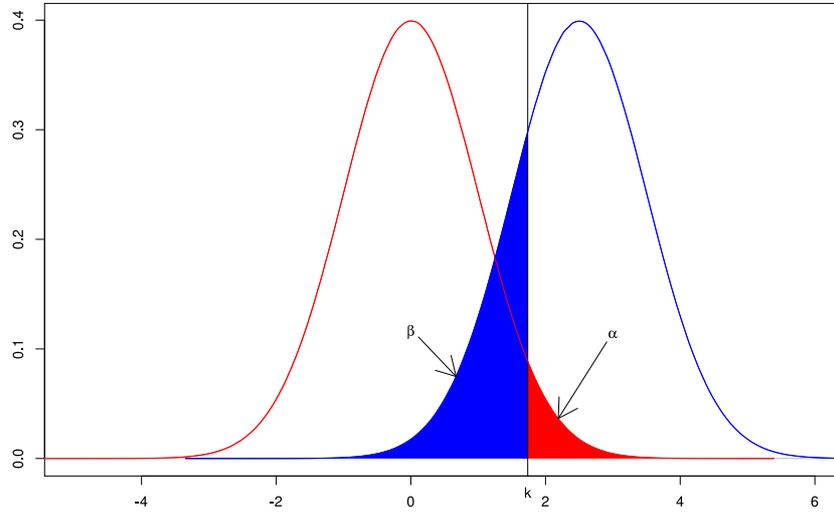


FIGURE 5.2 – Distribution \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_0 avec les erreurs de première et seconde espèce

5.1.2 Quelques généralités

Commençons par mettre un nom sur les différentes grandeurs utilisées dans l'exemple :

- \mathcal{H}_0 est appelée hypothèse nulle
- \mathcal{H}_1 est appelée hypothèse alternative
- α est l'erreur de première espèce
- β l'erreur de seconde espèce.

Le tableau (5.2) résume les choix possibles et les probabilités associées.

Choix \ Vérité	\mathcal{H}_0	\mathcal{H}_1
	\mathcal{H}_0	$1 - \alpha$
\mathcal{H}_1	α	$1 - \beta$

TABLE 5.2 – Représentation des choix possibles avec probabilités correspondantes

Dans les tests statistiques, il est usuel de prendre l'erreur de première espèce (α) comme une donnée en fonction du risque couru. Notons cependant que β varie en sens inverse de α . Ce qui signifie qu'une erreur de première espèce très faible conduira à retenir sauf cas exceptionnels \mathcal{H}_0 , et donc à refuser presque tout le temps \mathcal{H}_1 même si celle-ci est vraie. La probabilité de choisir \mathcal{H}_1 pour \mathcal{H}_1 vraie est $(1 - \beta)$ et est appelée puissance du test. En pratique le seul moyen d'augmenter l'efficacité d'un test sans augmenter l'erreur de première espèce est d'augmenter la taille de l'échantillon, ce qui réduit la variance des distributions et donc le recouvrement. Enfin appelons région critique, l'ensemble des valeurs qui conduisent à rejeter \mathcal{H}_0 au profit de \mathcal{H}_1 , dans notre exemple cela correspond à $\{\bar{X} > k\}$.

Un test statistique s'applique selon la démarche suivante :

1. Choix de \mathcal{H}_0 et \mathcal{H}_1
2. Détermination la variable de décision
3. Détermination de la distribution associée à \mathcal{H}_0
4. Choix de α
5. Calcul de la région critique en fonction de α
6. Calcul de la valeur observée de la variable de décision
7. Rejet ou acceptation de \mathcal{H}_0

Nous allons maintenant construire les éléments nécessaires pour le test statistique de détection de la stationnarité.

5.2 Test de Stationnarité

Par la suite nous allons noter $X = \{x_i\}_{i \in [1, N]}$ une série issue d'un calcul Monte Carlo itératif (k_{eff} ou entropie de Shannon).

5.2.1 Les Hypothèses de test

Les hypothèses de test retenues sont les suivantes :

\mathcal{H}_0 : Les grandeurs par étape $\{x_i\}_{i \in [1, N]}$ sont issues de la même loi de probabilité

\mathcal{H}_1 : Les grandeurs par étape $\{x_i\}_{i \in [1, N]}$ ne sont pas issues de la même loi de probabilité

Choisissons maintenant la statistique de test (ou variable de décision). Pour cela définissons le pont de Student.

5.2.2 Le pont de Student

Le pont de Student est construit par analogie au pont Brownien. L'utilisation de ce dernier pour construire une variable de décision a déjà été étudiée [50, 51]. Le pont Brownien est construit sur la comparaison d'une série « partielle » constituée des premiers éléments de la série X et de la série totale. Le pont de Student [10, 52] se base sur la même idée : comparer deux parties de la série totale. Cependant, la comparaison est faite entre une sous-série constituée des premiers éléments et la sous-série complémentaire en utilisant la statistique de Student.

La statistique de Student permet de déterminer si deux échantillons sont identiquement distribués (issus de la même variable aléatoire) ou non. L'idée est de construire un « pont » (en référence au pont Brownien) en appliquant la statistique de Student aux séries $X1 = \{x_i\}_{i \in [1, n]}$ et $X2 = \{x_i\}_{i \in [n+1, N]}$ avec $n \in [1, N - 1]$. Le pont de Student a des caractéristiques proches de celles du pont Brownien. En particulier, il y a une singularité correspondant à la fin du transitoire, positive si le transitoire est décroissant et négative si il est croissant. Le pont de Student est plus efficace que le pont Brownien pour détecter la présence d'un long transitoire.

Le pont de Student s'écrit : $S(X) = \{s_n\}_{n \in [1, N-1]}$ avec

$$s_n = \sqrt{N-2} \frac{\hat{\mu}_{1,n} - \hat{\mu}_{n+1,N}}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{N-n}\right) \times ((n-1)\hat{\sigma}_{1,n}^2 + (N-n-1)\hat{\sigma}_{n+1,N}^2)}} \quad (5.4)$$

où $\hat{\mu}$ et $\hat{\sigma}$ sont les moyennes et les écarts type calculés des échantillons réduits. En notant $n1$ et $n2$ deux entiers tels que $1 \leq n1 \leq n2 \leq N$.

$$\hat{\mu}_{n1,n2} = \frac{1}{n2 - n1 + 1} \sum_{i=n1}^{n2} x_i \quad (5.5)$$

$$\hat{\sigma}_{n1,n2}^2 = \frac{1}{n2 - n1} \sum_{i=n1}^{n2} (x_i - \hat{\mu}_{n1,n2})^2 \quad (5.6)$$

Le pont de Student permet de bien dissocier les échantillons stationnaires et non-stationnaires : si X est stationnaire, le processus $S(X)$ est constitué de petites valeurs centrées autour de 0. Sinon un biais dû à l'initialisation dans la série X conduit à un pic dans le processus $S(X)$ (cf. fig. 5.3). Une autre caractéristique du pont est de permettre de s'affranchir de la moyenne et de l'écart type de la série X , ce qui est pratique lors de l'étude de systèmes ou de séries différentes. A partir de ce processus, une variable de décision (scalaire) doit être choisie. Désirant caractériser la présence (ou non) d'un pic, les choix suivants peuvent convenir et sont détaillés dans [10] :

- extremum
- moyenne
- écart type
- autocovariance
- la moyenne du log-vraisemblance
- ratio des extremums

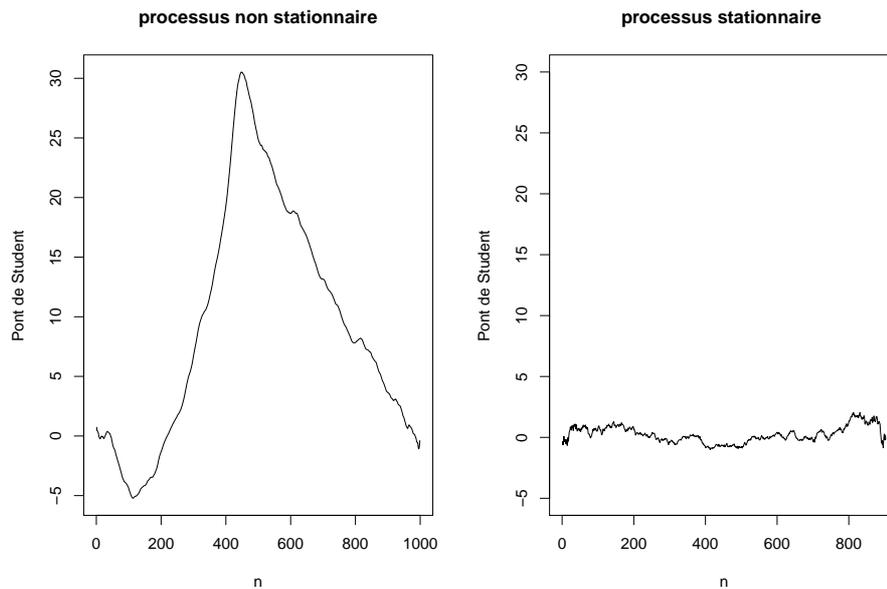


FIGURE 5.3 – Comparaison des ponts de Student de processus non stationnaire et stationnaire

Une étude précédente [10] a montré que la moyenne était une variable de décision robuste. C’est cette variable que nous choisirons par la suite.

L’idée du test de stationnarité est de calculer la moyenne du pont de Student de l’échantillon et de vérifier qu’elle appartient ou non à la distribution de référence. Pour cela la distribution, ou plus précisément son inverse CDF (Cumulative Distribution Function ou fonction de répartition), correspondant à \mathcal{H}_0 est nécessaire. C’est ce que nous allons déterminer dans la partie qui suit.

5.2.3 Distribution de référence

Une série stationnaire issue d’un calcul Monte Carlo itératif peut être grossièrement modélisé par un processus auto-régressif d’ordre 1 :

$$A_{i+1} = A_{mean} + \rho(A_i - A_{mean}) + \epsilon_i \quad (5.7)$$

$$A_1 \equiv \mathcal{N}(A_{mean}, \frac{\sigma^2}{1 - \rho^2}) \quad (5.8)$$

Avec :

- ϵ_i : un bruit blanc gaussien d'écart type σ
- ρ : le coefficient d'auto-régression

Le coefficient d'auto-régression va servir de paramètre pour ajuster le test en fonction de la série étudiée. Les inverse CDF (Cumulative Distribution Function ou fonction de répartition) de la distribution \mathcal{H}_0 ont été tabulées pour ρ allant de 0.0 à 0.9 avec un pas de 0.1 (cf. fig. 5.4). Ce sont ces inverses qui vont être utilisées. Les tabulations ont été réalisées en utilisant des processus auto-régressifs d'ordre 1 construit selon l'équation 5.7. Pour construire la distribution correspondant à ρ , 1000 processus de coefficient ρ et de longueur 1000 ont été utilisés. Une étude de l'impact de la longueur des processus utilisés pour construire les distributions de références permettrait sans doute d'affiner les tabulations. Cependant, l'influence semble a priori relativement faible.

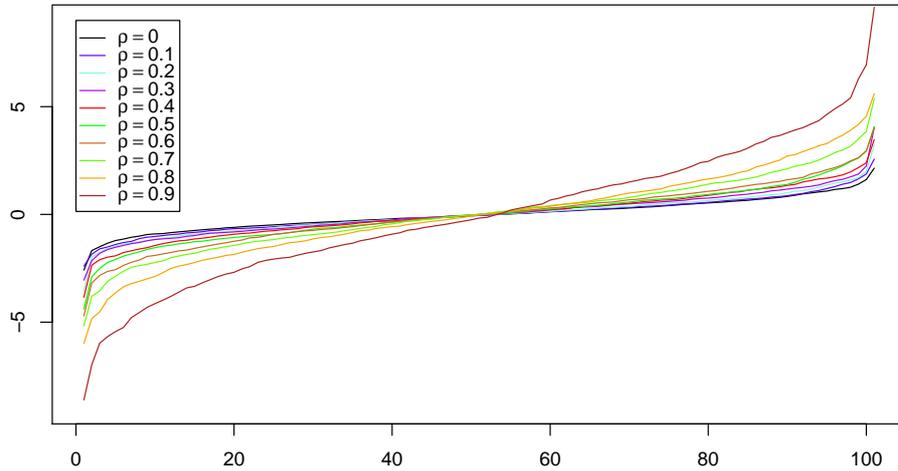


FIGURE 5.4 – Inverse CDF pour ρ allant de 0.0 à 0.9

Nous avons maintenant les éléments pour tester la stationnarité d'une série. Étant donné une série X , le paramètre α est choisi par l'utilisateur, le coefficient d'auto-régression est estimé en se basant sur la série X (ce point sera développé dans la partie suivante). La région critique se détermine alors facilement en utilisant l'inverse CDF appliquée à $\frac{\alpha}{2}$ et $1 - \frac{\alpha}{2}$. En effet, dans notre cas, la région à exclure est constituée des deux extrêmes de la distribution \mathcal{H}_0 . Le calcul de la moyenne du pont de Student appliqué à X , puis la comparaison à la région critique, nous permettent de conclure.

Maintenant qu'un test statistique est construit, nous pouvons passer à la troncature du transitoire.

5.3 Troncature du transitoire

Pour commencer, il faut identifier l'inverse CDF de référence à utiliser pour le test de stationnarité. Ainsi en se basant sur les N_y dernières étapes de la série X , le coefficient d'auto-régression est estimé grâce à un estimateur de type moindres carrés (coefficient d'autocorrélation), et la densité la plus proche est choisie. En notant $Y = \{x_i\}_{i \in [N - N_y, N]}$ et \bar{y} la moyenne de la série Y , l'estimateur s'écrit :

$$\hat{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{N_y-1} (y_i - \bar{y})(y_{i+1} - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{N_y-1} (y_i - \bar{y})^2} \quad (5.9)$$

Cette estimation de ρ repose sur une hypothèse de stationnarité de la fin de la série X . C'est une extension raisonnable de l'hypothèse selon laquelle l'état stationnaire existe et est atteint avant la fin de la simulation.

Le test statistique est appliqué à la série complète X . Si l'hypothèse nulle est acceptée, aucun transitoire n'est détecté, et aucune troncature n'est réalisée. Si l'hypothèse alternative est retenue, la série est supposée contenir un transitoire initial. Un certain nombre d'étapes initiales sont retirées de la série et le test est appliqué à la série restante. Cette itération continue jusqu'à ce que la série passe le test ou que la fin de la série soit atteinte. Dans ce dernier cas, l'hypothèse d'atteinte de la stationnarité est contredite. Le calcul nécessite alors d'être relancé avec plus d'étapes.

La difficulté réside dans la façon de tronquer la série. En effet deux paramètres sont à définir par l'utilisateur et jouent un rôle important : le nombre d'étapes retirées à chaque itération (pas de troncature) et l'erreur de première espèce. Afin que la série tronquée garde un sens, il faut imposer un minimum d'étapes à conserver, ici noté Z . L'algorithme de troncature est décrit par l'algorithme (4) et la figure (5.5).

```

1 Estimer  $\rho$  selon 5.9 et choisir l'inverse CDF la plus proche ;
2 Choisir  $N_{iter}$  : le nombre d'étapes retirées à chaque itération;
3 Choisir  $\alpha$  : l'erreur de première espèce;
4 Calculer  $K1 = \text{inverse\_CDF}(\alpha/2)$  et  $K2 = \text{inverse\_CDF}(1-\alpha/2)$ ;
5  $i = 1$ ;
6 tant que  $i < N$  faire
7    $Y = \{x_k\}$  , avec  $k \in [i, N]$  ;
8    $E = \text{mean}(S(Y))$  ;
9   si  $E \in [K1, K2]$  alors Sortie Boucle;
10   $i = i + N_{iter}$  ;
11 si  $i < N - Z$  alors
12   Le nombre d'étapes à supprimer est  $i$ ;
13 sinon
14   Attention : Aucune stationnarité n'a été détectée;

```

Algorithme 4: Algorithme de Troncature

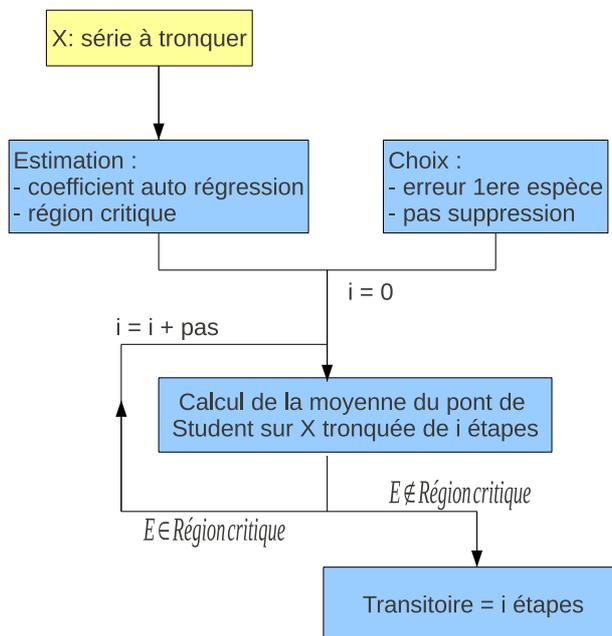


FIGURE 5.5 – Schéma de troncature du transitoire

Avant de continuer sur des tests numériques, il est bon de faire quelques remarques.

L'erreur de première espèce (α) représente le niveau de faux rejet de l'hypothèse nulle. Ce qui signifie que dans un certain nombre de cas une série stationnaire va donner un test faux et être considérée comme une série non stationnaire.

L'erreur de seconde espèce est l'acceptation de l'hypothèse \mathcal{H}_0 alors que la série est non-stationnaire. Étant donné que la densité de l'hypothèse \mathcal{H}_1 n'est pas connue et dépend du problème, cette erreur ne peut pas être évaluée.

L'utilisation du pont de Student pour construire la variable de décision aide à réduire l'erreur de seconde espèce en séparant bien les distributions stationnaires et non-stationnaires. D'un autre côté, l'utilisation d'un fort coefficient d'auto-régression contribue à augmenter cette erreur.

Le choix d'une erreur de première espèce trop grande peut conduire à retirer plus d'étapes que nécessaires. Le pas de troncature peut induire une sur-estimation ou une sous-estimation de longueur du transitoire.

Le choix des paramètres α et N_{iter} sont laissés à la discrétion de l'utilisateur. Une étude de l'impact de ces paramètres sur l'efficacité de la méthode de troncature sera à faire.

Dans la partie suivante, nous appliquons cette méthode au k_{eff} et à l'entropie de Shannon sur quelques cas tests.

5.4 Applications Numériques

Dans cette partie, la méthode de troncature décrite ci-dessus sera appliquée aux séries des k_{eff} (caractéristique de la convergence globale) et de l'entropie de Shannon (caractéristique de la convergence locale) sur quelques cas. Pour les applications suivantes, les paramètres utilisés sont 0.2 (correspond à rejeter 20% des cas stationnaires) pour l'erreur de première espèce et 1 étape pour le pas de troncature. Les calculs ont été menés sans étapes inactives afin de bien identifier le transitoire.

5.4.1 Réseau de crayons

Le premier test numérique consiste à détecter le transitoire pour un calcul sur un réseau (infini) de crayons avec une distribution initiale ponctuelle. Les caractéristiques de ce cas sont les suivants :

- réseau de taille 50×50 crayons avec des conditions de réflexion
- 2000 neutrons par étape
- 2000 étapes
- distribution initiale ponctuelle dans un des crayons
- maillage de l'entropie de Shannon : $50 \times 50 \times 1$

L'estimation des coefficients d'auto-régression pour le réseau donne les résultats suivants :

- 0.116 pour la série de l'entropie
- 0.012 pour la série du k_{eff}

Les distributions utilisées vont être celles associées à $\rho = 0$ pour le k_{eff} et à $\rho = 0.1$ pour l'entropie de Shannon. La méthode de troncature donne le nombre d'étape suivant à tronquer :

- 16 étapes en se basant sur la série de l'entropie
- 0 étape en se basant sur la série du k_{eff}

La figure (5.6) représente le pont de Student de la série des k_{eff} . La figure (5.7) représente l'entropie de Shannon avec le transitoire détecté en bleu, seules les cent premières étapes ont été tracées.

Les résultats confirment nos attentes sur ce cas. Le k_{eff} , en tant que quantité intégrale dans un réseau « infini », ne présente pas de transitoire. En revanche, l'entropie de Shannon contient un transitoire dû à la distribution initiale inappropriée. Cela permet aussi de confirmer que l'entropie de Shannon permet de mieux détecter une convergence locale que le k_{eff} .

5.4.2 Réseau de sphères en interactions

Le cas présenté ici est un benchmark issu du rapport [9] de l'AEN.

Ce calcul a été fait avec les caractéristiques suivantes :

- réseau de sphères (cf. fig (5.8))
- 1000 neutrons par étapes
- 1000 étapes
- distribution initiale ponctuelle dans la sphère se trouvant en position (1,1)
- maillage entropie de Shannon : $5 \times 5 \times 1$

L'estimation des coefficients d'auto-régression pour ce cas donne les résultats suivants :

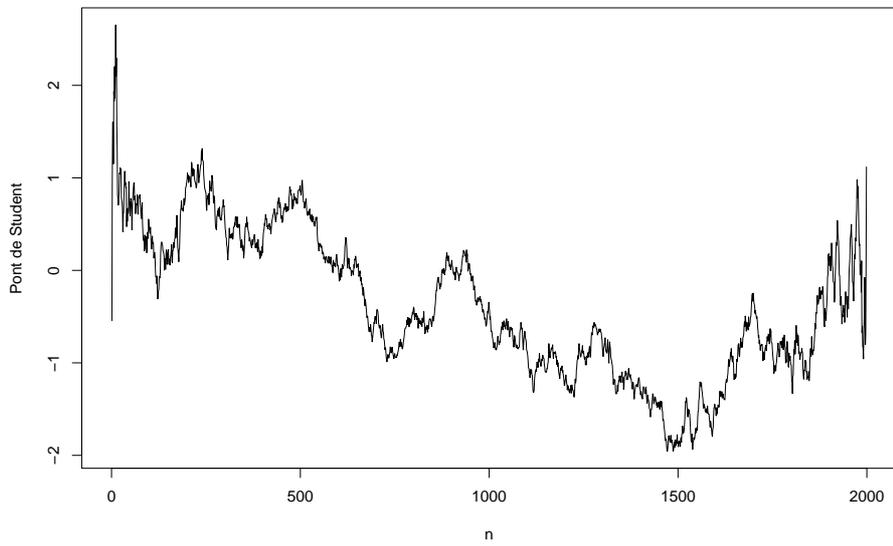


FIGURE 5.6 – Pont de Student de la série des k_{eff}

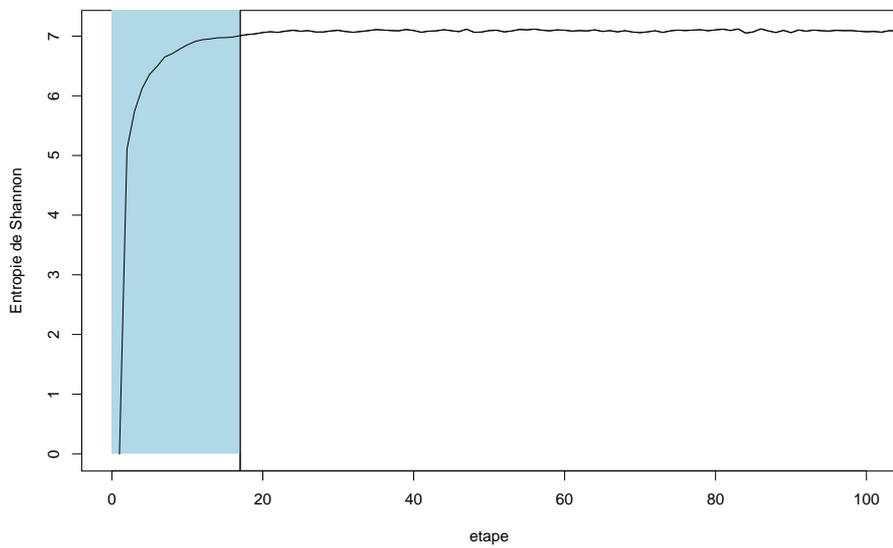


FIGURE 5.7 – Entropie de Shannon du cas réseau avec en bleu le transitoire détecté

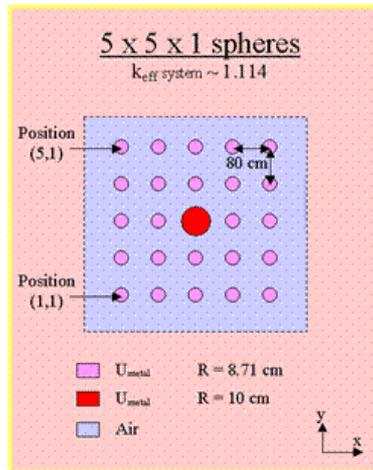


FIGURE 5.8 – Géométrie du cas de réseau de sphères en interaction

- 0.889 pour la série de l'entropie
- 0.108 pour la série du k_{eff}

Les distributions utilisées vont être celles associées à $\rho = 0.1$ pour le k_{eff} et à $\rho = 0.9$ pour l'entropie de Shannon. Le fort coefficient d'auto-régression, pour l'entropie de Shannon, indique que les corrélations cycle à cycle sont fortes. La méthode de troncature donne le nombre d'étapes à tronquer :

- 51 étapes en se basant sur la série du k_{eff} (fig. 5.9)
- 173 étapes en se basant sur la série de l'entropie (fig. 5.10)

Ce résultat met en évidence la différence entre la convergence du k_{eff} et celle de l'entropie de Shannon. La détection des deux transitoires permet à l'utilisateur de choisir le nombre d'étapes à retirer selon le résultat désiré. L'algorithme de troncature du transitoire semble fonctionner correctement en détectant la singularité du pont de Student pour une série non stationnaire.

Un fort coefficient d'auto-régression peut conduire à une augmentation de l'erreur de seconde espèce et conduire à une fausse détection de la stationnarité. La figure (5.11) représente cette fausse détection sur le tracé de l'entropie de Shannon. La fin du transitoire a été détecté trop tôt. Ce cas a été produit avec 125 neutrons par étapes.

Une des pistes à explorer, afin de réduire ce type d'erreur, consiste à ne

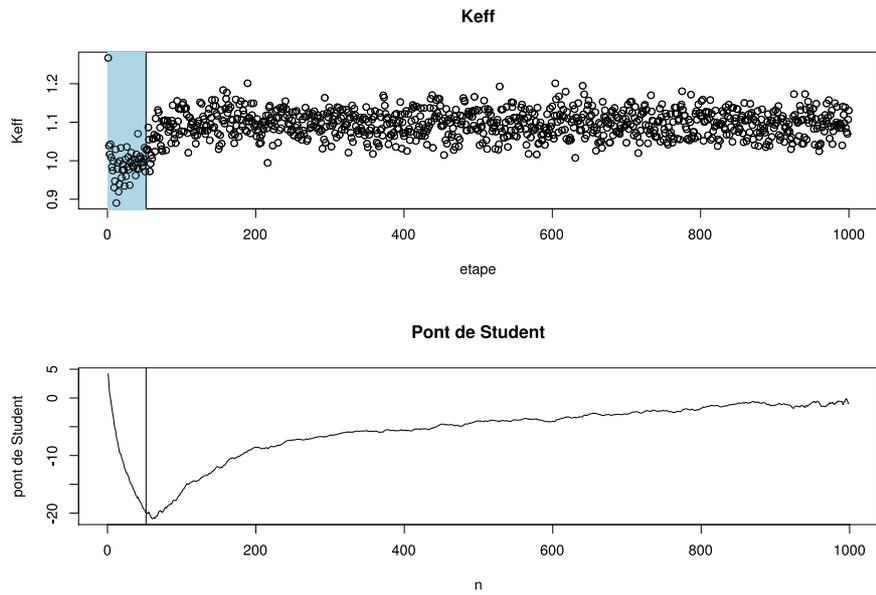


FIGURE 5.9 – Courbes des k_{eff} d'étape et du pont correspondant avec le transitoire détecté en bleu

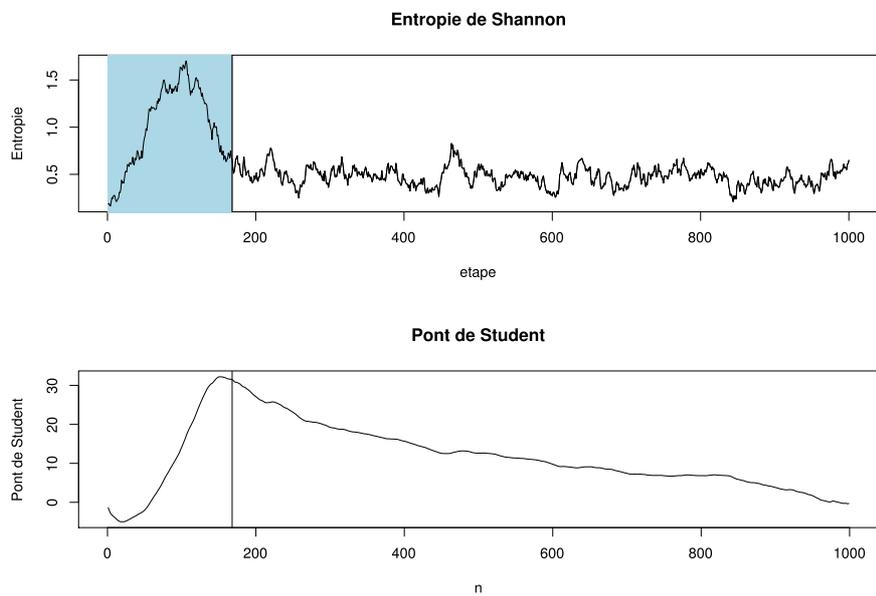


FIGURE 5.10 – Courbes de l'entropie et du pont correspondant avec le transitoire détecté en bleu

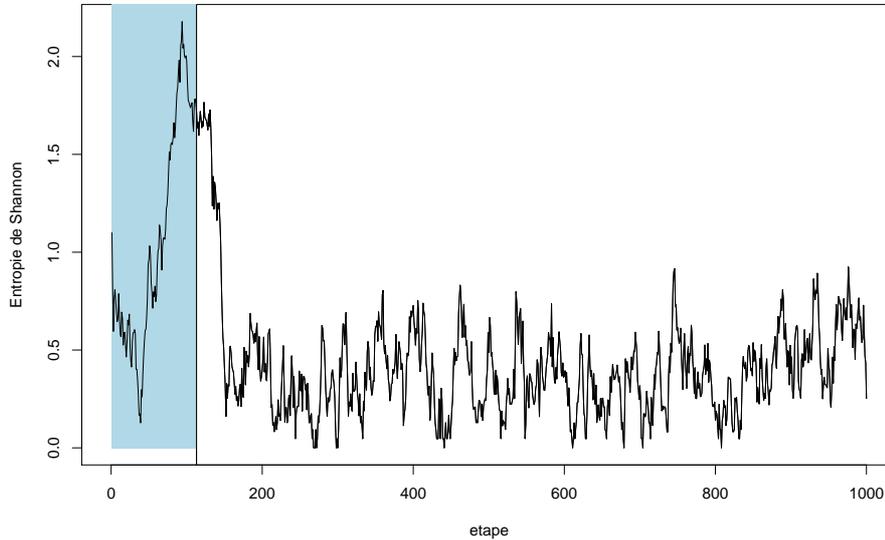


FIGURE 5.11 – Exemple de fausse détection de la stationnarité

pas arrêter la troncature au premier test positif, continuer quelques étapes de troncature et revenir à la première troncature positive si les suivantes le sont.

5.4.3 Solutions de nitrate d'uranyle faiblement couplées

Le cas présenté ici est issu de [9]. La configuration légèrement asymétrique a été utilisée. Elle est constituée de deux volumes fissiles séparés par 30 cm d'eau (cf. fig (5.12)).

Ce calcul a été fait avec les caractéristiques suivantes :

- 2000 neutrons par étapes
- 600 étapes
- distribution initiale uniforme
- maillage entropie de Shannon : 70x1x1

L'estimation des coefficients d'auto-régression pour ce cas donne les résultats suivants :

- 0.866 pour la série de l'entropie
- 0.04 pour la série du k_{eff}

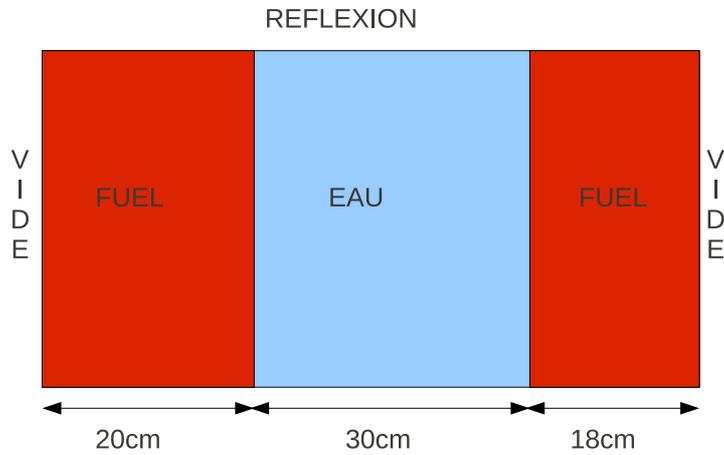


FIGURE 5.12 – Géométrie du cas faiblement couplé

Les distributions utilisées vont être celles associées à $\rho = 0.0$ pour le k_{eff} et à $\rho = 0.9$ pour l'entropie de Shannon.

La méthode de troncature donne le nombre d'étapes à tronquer :

- 0 étape en se basant sur la série du k_{eff}
- 241 étapes en se basant sur la série de l'entropie (fig. 5.13)

Ce cas illustre bien la différence entre les vitesses de convergence des estimateurs du k_{eff} et de l'entropie de Shannon. En considérant que l'entropie caractérise la convergence des sources, les encaissements des quantités locales devraient commencer bien plus tard que ceux du k_{eff} . Cette détection différente pourrait être utilisée pour réaliser des troncatures adaptées aux scores recherchés.

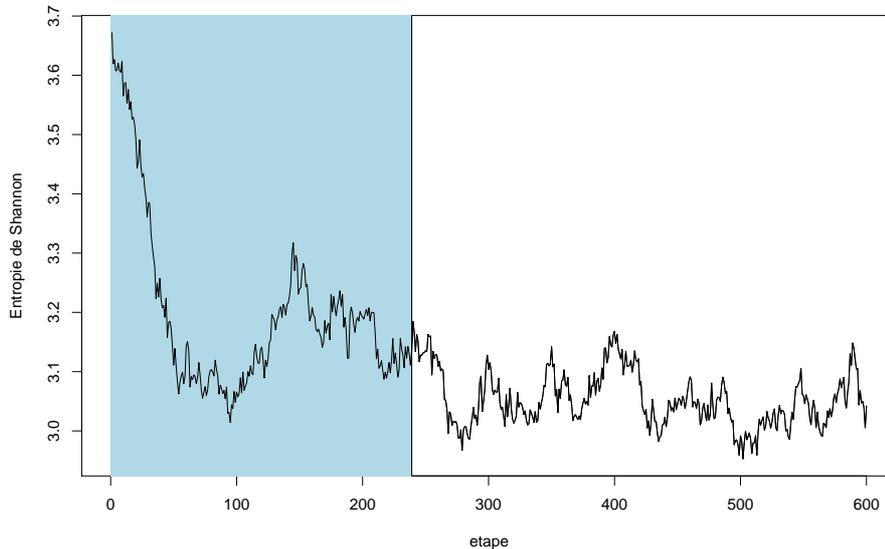


FIGURE 5.13 – Entropie de Shannon pour le cas de deux unités fissiles dé-couplées

5.5 Implémentation dans le code MORET

Cette méthode de troncature du transitoire a été implémentée dans le code MORET. La troncature basée sur la série du k_{eff} est utilisée par défaut lors d'un calcul en remplacement de la méthode de troncature basée sur l'estimation de variance minimale pour donner une indication du nombre d'étapes du transitoire. Les valeurs par défaut sont celles utilisées par les cas tests $\alpha = 0.2$ et $N_{iter} = 1$. L'utilisateur a la possibilité de modifier ces paramètres par la syntaxe suivante dans le module sortie (SORTie).

```
SUPP
KEFF ERR1  $\alpha$  PSUP  $N_{iter}$  PRIO
FINS
```

ERR1 indique l'erreur de première espèce et est suivi d'un nombre α entre 0 et 100. PSUP indique le pas de suppression et est suivi d'un entier N_{iter} . Enfin PRIO indique ici que la suppression du transitoire basée sur la série du k_{eff} est prioritaire par rapport à la suppression basée sur la série de l'entropie de Shannon. Le caractère prioritaire d'une troncature (basée sur l'entropie ou le k_{eff}) par rapport à l'autre intervient (pour le moment) seulement dans le tracé du k_{eff} en fonction du nombre d'étapes retirées comme valeur de

référence.

Chaque variable ayant des valeurs par défaut, tous les paramètres sont rendus optionnels. Ainsi l'erreur de première espèce peut être modifiée sans spécifier le pas de suppression. La troncature peut être basée sur l'entropie de Shannon en utilisant la syntaxe suivante.

```
SUPP
SHAN MAIL  $N_x$   $N_y$   $N_z$  ERR1  $\alpha$  PSUP  $N_{iter}$  PRIO
FINS
```

ERR1, PSUP et PRIO représentent la même chose que dans le cas du k_{eff} . La variable MAIL indique le maillage et prend comme entrées 3 entiers qui décrivent le nombre de mailles dans chaque direction. De même que pour le k_{eff} , tous les paramètres ont des valeurs par défaut et sont rendus optionnels.

Les différents arguments peuvent évidemment être mis dans le même module. Dans la syntaxe qui suit, les blocs optionnels sont mis entre crochets.

```
SUPP
[ KEFF [ERR1  $\alpha$ ] [PSUP  $N_{iter}$ ] [PRIO] ]
[ SHAN [MAIL  $N_x$   $N_y$   $N_z$ ] [ERR1  $\alpha$ ] [PSUP  $N_{iter}$ ] [PRIO] ]
FINS
```

Apportons quelques précisions concernant l'implémentation de la méthode de troncature. Les distributions de référence sont tabulées sur 101 valeurs (de 0.0 à 1.0 par pas de 0.01). Si l'utilisateur renseigne l'erreur de première espèce, il doit fournir un nombre qui sera interprété comme un double précision. La valeur de l'inverse CDF choisie, en ce point, sera alors interpolée linéairement à partir des tabulations. Le choix retenu pour la longueur de l'échantillon sur lequel sera évalué le coefficient d'auto-régression est la moitié de la taille de l'échantillon total. Pour finir, la taille minimale de l'échantillon tronqué est aussi fixée à la moitié de la taille de l'échantillon total. Cette valeur a été choisie pour rester consistant avec l'hypothèse de stationnarité faite pour évaluer le coefficient d'auto-régression.

5.6 Conclusion

Une méthodologie de test de stationnarité a été développée avec une application au k_{eff} ou à l'entropie de Shannon. Cette détection automatisée du transitoire permet d'obtenir, à la fin du calcul, une estimation de la longueur du transitoire fournissant à l'utilisateur une indication du nombre d'étapes initiales à supprimer. Il a été démontré sur quelques cas tests la validité de cette méthode, mais aussi ses limites. En effet, cette méthode reposant

sur un test statistique, de mauvaises détections peuvent apparaître et mener aussi bien à une sous-estimation qu'à une sur-estimation de la longueur du transitoire.

Ces développements seront disponibles dans la prochaine version de MORET. Certaines modifications ont été ajoutées depuis la première version des développements. Les distributions de référence (\mathcal{H}_0) ont été recalculées avec 10 000 chaînes de nombres aléatoires afin de lisser au maximum ces distributions. Le nombre d'étapes sur lesquelles est évalué le coefficient d'auto-régression est fixé à moitié du nombre d'étapes simulées. Si le transitoire détecté est plus long que cette moitié, le coefficient d'auto-régression est réévalué sur le dernier quart de la série, et ainsi de suite avec un nombre d'étapes minimal imposé à vingt.

Là encore, il faut souligner le fait que pour l'utilisation de ces méthodes, l'expertise de l'utilisateur reste primordiale. Ainsi, l'ambition de vouloir utiliser des outils de simulation en boîte noire n'est pas exempte de risques, et donc incompatible avec une démarche de sûreté.

Les prochains travaux à réaliser sur ce sujet seront l'étude de l'impact des différents paramètres sur l'estimation de la longueur du transitoire ainsi qu'une validation plus poussée de la méthode de troncature du transitoire. Les différents paramètres pouvant avoir un rôle dans la méthode de troncature sont principalement : l'erreur de première espèce (α), le pas de troncature (N_{iter}), le nombre d'étapes simulées, le nombre de neutrons par étape, le maillage de l'entropie de Shannon, la longueur des processus utilisés pour les tabulations des distributions de référence.

Perspectives et Conclusions

Perspectives

Nous livrons ici quelques pistes pour poursuivre ce travail de thèse.

Dans un premier temps, le couplage gagnerait à être automatisé afin d'explorer d'autres applications et rendre la validation plus exhaustive. Un travail de traduction d'un jeu de données dans le langage de chaque code doit être effectué. Deux voies sont envisageables, la première étant de traduire automatiquement la géométrie et la chimie MORET en caractéristiques de simulation DRAGON, la seconde étant de réaliser le tracking MOC ou P_{ij} sur la géométrie 3D comme envisagé dans [24]. Cependant, ce choix ne permet pas de profiter des directions invariantes du problème pour réduire le nombre de dimensions et réduire le temps de calcul déterministe. Avant ces deux options, il serait également possible et relativement simple de décrire les jeux de données, MORET, DRAGON et éventuellement DONJON, dans un même fichier puis par un jeu de scripts, les séparer et lancer les différents calculs enchaînés avec transmission des fichiers de sections efficaces et flux adjoint. Une adaptation des scripts existants serait suffisante.

Ensuite, l'impact sur les méthodes de couplage envisagées, d'un relâchement des contraintes de calcul du flux adjoint, sera à étudier. Les principales pistes concernent les critères d'arrêts (précision sur le flux), le nombre de groupes, et la possibilité de toujours utiliser un adjoint de diffusion. L'influence du maillage géométrique déterministe est également un point à approfondir.

En ce qui concerne la modification de la simulation de la marche aléatoire, il serait intéressant de tester l'utilisation d'un critère différent pour l'application du splitting et de la roulette russe. Un choix envisageable et exploré dans [38] est de calculer un flux adjoint à source fixe avec une source judicieusement choisie afin d'uniformiser l'échantillonnage de la géométrie dans le but d'obtenir une variance uniforme sur le système. Cette approche est abordée par l'enchaînement de deux calculs déterministes, un direct pour déterminer le taux de production du système, utilisé dans le second qui est

un calcul d'adjoint à source fixe. Le flux adjoint ainsi calculé sert à définir le biaisage Monte Carlo. Dans ce cas, le flux adjoint estimé est différent de celui utilisé dans le présent travail, car le flux adjoint utilisé dans [38] provient d'un adjoint basé sur plusieurs objectifs (ou réponses), et est limité à la première génération, c'est à dire que les fissions sont considérées comme des absorptions stériles.

Comme évoqué dans [54], il serait intéressant d'essayer de construire une modification de la marche aléatoire avec un critère entièrement Monte Carlo. Par exemple, une piste envisageable pour uniformiser l'échantillonnage et la variance, est d'utiliser un critère proportionnel à la variance calculée d'un estimateur du taux de fission. Dans ce cas un splitting serait appliqué lorsqu'une particule arrive dans un volume de plus grande variance que le volume dont il provient et subirait une roulette russe dans l'autre sens. Une des façons sans doute la plus facile de l'appliquer serait d'attribuer, en début d'étape, des poids cibles à chaque volume afin d'uniformiser les poids des neutrons.

Enfin un biaisage du noyau de collision [31] pourrait être envisagé. Cela nécessiterait de ressortir un flux angulaire de DRAGON qui est aujourd'hui calculé mais non accessible via le module de calcul des taux de réaction (EDI:). En effet, le biaisage du noyau de collision modifie les échantillonnages de l'énergie et du cosinus de diffusion et requiert un flux adjoint angulaire.

La sélection des sites de fission a été modifiée par un flux adjoint. Le stockage a aussi été revu pour s'adapter au découpage du flux adjoint, mais il pourrait être généralisé. Une piste à une modification entièrement Monte Carlo de la sélection consisterait à imposer le nombre de neutrons selon un critère de minimisation de la variance. Par exemple, il est possible d'exprimer le k_{eff} en fonction, d'une part du nombre de neutrons par ensemble fissile et d'autre part de la production, pour en déduire un critère de placement minimisant la variance du k_{eff} [54].

Concernant la détection automatisée du transitoire, les études ont mis en évidence l'apparition (inhérente aux tests statistiques) de cas de sous-estimation et sur-estimation du transitoire. Pour le moment cette méthode n'est utilisée que pour donner une indication sur la longueur du transitoire. Dans l'éventualité d'une modification du test, il serait intéressant de tester d'autres variables de décision, d'estimer le risque de sur-troncature, de rendre plus robuste le test statistique. L'amélioration de la détection du transitoire passera aussi par l'amélioration des indicateurs, car l'entropie de Shannon peut être mise en défaut [43]. Cela implique qu'un critère différent pourrait être utilisé, ou une combinaison de tests sur plusieurs indicateurs. En effet, on peut imaginer utiliser ce test sur plusieurs indicateurs puis exclure les

valeurs extrêmes et faire une moyenne de la longueur estimée du transitoire.

L'application numérique aux cas issus de [9] laisse apparaître un fort coefficient d'auto-régression pour les séries d'entropie de Shannon. La conséquence est d'augmenter les risques de fausses détection de stationnarité (erreur de seconde espèce). Des méthodes de simulations réduisant les corrélations cycle à cycle telles que la méthode de Wielandt ou Super-histoire [45] ou plus simplement évaluer les scores par paquet d'étapes pourraient être utilisées afin de réduire ce risque. Comme déjà suggéré, une possibilité de réduire l'erreur de seconde espèce serait de ne pas s'arrêter au premier test positif, et de tester quelques troncatures supplémentaires.

Cette méthode a été développée dans le cadre d'une application au k_{eff} et à l'entropie de Shannon permettant ainsi de mieux caractériser la convergence des sources. Cependant, une entropie stable (bien que ce soit un bon indicateur) ne permet pas à elle seule de caractériser la convergence des sources ni la stationnarité de l'encaissement de scores locaux. La méthode présentée dans ce chapitre étant finalement assez générale, elle pourrait être étendue à tout type de scores afin de pouvoir obtenir une troncature adaptée au score demandé par l'utilisateur. Cette possibilité trouverait sans doute plus sa place dans un outil de post-traitement.

Pour le moment, la méthode de troncature ne renvoie qu'un nombre d'étapes à supprimer lors de l'estimation des scores. Il serait possible de modifier le test afin d'en faire un test en cours de calcul et ainsi déclencher les encaissements après cette détection. À ce jour, deux paramètres concernant le nombre d'étapes simulées sont demandés à l'utilisateur : un nombre d'étapes inactives et un critère sur les étapes actives (nombre d'étapes ou écart type). L'idée la plus naturelle est tout d'abord, de réaliser un certain nombre d'étapes, puis d'utiliser la troncature afin de localiser la fin du transitoire en vue de retirer les étapes du transitoire des scores, et enfin, de reprendre la simulation afin d'atteindre le critère spécifié par l'utilisateur. Cette démarche permettrait de s'affranchir de la déclaration par l'utilisateur du nombre d'étapes inactives qui est un paramètre toujours difficile à évaluer a priori.

Cette idée de critère d'arrêt basée sur la méthode de troncature soulève cependant quelques interrogations à propos du nombre d'étapes minimales à réaliser afin que la troncature du transitoire ait un sens. En particulier, le nombre minimum d'étapes pour assurer la fiabilité de l'estimation du coefficient d'auto-régression, de la moyenne du pont de Student et de la statistique de l'indicateur. Du côté pratique se pose la question de savoir à partir de quel moment les encaissements doivent commencer. En effet, il est possible d'encaisser les valeurs depuis la première étape puis d'enlever les

étapes du transitoire. Cependant, ce choix implique des encaissements (et donc des ressources) qui ne serviront pas dans le calcul final. Il est aussi possible d'attendre la détection de la fin du transitoire pour commencer les encaissements ce qui impliquerait de simuler des étapes convergées sans encaissements et donc simuler des étapes inutiles.

Conclusions

Ce travail de thèse s'est concrétisé notamment par la réalisation d'un prototype de couplage entre les codes déterministes DRAGON et DONJON et le code Monte Carlo MORET. Ce couplage se base sur un pré-calcul déterministe du flux adjoint et l'utilisation de celui-ci lors de la simulation Monte Carlo. Trois options, toutes utilisant le flux adjoint, ont été étudiées pour le couplage, tel que réalisé dans ce projet : une initialisation automatisée de la source Monte Carlo, et des modifications, lors de la simulation, de la sélection des sites de naissances des neutrons et de la marche aléatoire par une stratégie de roulette et de splitting. Le flux adjoint utilisé est un flux adjoint asymptotique, dans le sens où il est proportionnel au nombre de fission produites par un neutron inséré à un point du réacteur après un nombre important (théoriquement infini) de générations. Le flux adjoint utilisé ici est basé une réponse unique (le k_{eff}).

L'utilisation du flux adjoint pondéré par le spectre de fission permet de réaliser un placement optimal de la première génération de neutrons. L'utilisateur est ainsi déchargé de cette initialisation ce qui pourrait permettre d'éviter les placements inadéquats. Le placement ainsi réalisé initialise le calcul itératif sur une distribution très proche de la distribution stationnaire et réduit ainsi de façon importante le transitoire Monte Carlo. Cette stratégie permet de ne considérer quasiment que des étapes actives lors du déroulement du calcul et ainsi de réduire la variance calculée et la variance réelle. Ce constat est valable aussi bien pour un adjoint issu d'un calcul de transport que de diffusion. Un calcul déterministe réalisé sur un nombre réduit de groupes augmenterait significativement la figure de mérite.

Comme déjà évoqué dans le corps de ce document, la démarche d'une initialisation automatique est à double tranchant car elle peut avoir un effet de déresponsabilisation de l'utilisateur. Ainsi, l'ambition de vouloir utiliser des outils de simulation en boîte noire n'est pas exempte de risques, et donc incompatible avec une démarche de sûreté. Il est important de rappeler que l'utilisation de méthodes automatiques ne doit en aucun cas se substituer entièrement à l'expertise des utilisateurs. Ils doivent être sensibilisés aux limites de ce type d'approche.

La modification de la sélection des sites de fission permet de réduire les variances réelle et calculée lorsqu'un adjoint transport est utilisé. Cependant, le coût du repérage dans la géométrie déterministe est pénalisant dans la réalisation étudiée. Une implémentation plus judicieuse pourrait sans doute améliorer l'efficacité de la méthode mais nécessiterait de lier plus fortement les géométries déterministe et Monte Carlo. Dans le cas d'un pré-calcul de diffusion, aucun avantage significatif n'a pu être mis en évidence. Cependant, il serait intéressant de poursuivre les tests en augmentant le nombre de mailles géométriques du calcul de diffusion.

Enfin la démarche de modifier la marche aléatoire par une stratégie de splitting et de roulette (selon un critère basé sur un flux adjoint de criticité) ne semble pas convenir pour une réduction de variance. La question du choix du critère de splitting et de roulette russe se pose alors. Comme explicité dans la partie 2.3.5, il serait intéressant de suivre ou tester un critère similaire à celui utilisé dans la méthode FW-CADIS, ou d'élaborer un critère uniquement Monte Carlo de biaisage comme évoqué dans les perspectives.

Les cas étudiés dans ce rapport permettent de souligner que l'utilisation d'un calcul déterministe permet de s'affranchir du transitoire initial mais ne permet pas, avec les méthodes envisagées, de pallier aux problèmes de sous-échantillonnage. Seule l'initialisation automatique apporte un gain notable. Concernant les autres méthodes (modifications de l'échantillonnage ou de la marche aléatoire), la réduction de variance dépend plus fortement de la configuration et du type d'adjoint utilisé. Ces éléments suggèrent que la mise en production d'un tel couplage apportera peu de gains par rapport à l'investissement requis. En effet, pour rendre un tel couplage opérationnel dans un outil de production, il serait nécessaire de mettre en place un moyen de générer automatiquement la géométrie déterministe à partir de la géométrie 3D Monte Carlo.

Ce travail de thèse a aussi permis le développement d'un critère mathématique de la stationnarité d'un calcul Monte Carlo. Ce critère se base sur les séries du k_{eff} et de l'entropie de Shannon, dont le calcul a été implémenté lors de ce travail. Ces grandeurs ne sont que des indicateurs et ne peuvent assurer une convergence. La méthode de détection du transitoire permet de localiser automatiquement a posteriori la fin du transitoire de la série. Elle fournit une estimation du nombre d'étapes inactives à considérer. Cette détection est disponible dans la version 5 du code MORET.

Pour conclure, deux stratégies sont envisageables pour la poursuite des études sur la convergence des calculs aux valeurs propres Monte Carlo. La première consiste à poursuivre l'étude des approches hybrides, celles-ci requérant de fortes compétences sur les codes déterministes. La seconde est

d'améliorer les méthodes de simulation entièrement Monte Carlo en définissant de nouveaux estimateurs ou techniques de simulation plus performants. À ce jour, des efforts notables sont constatés sur l'étude des méthodes hybrides. Cependant, celles-ci n'ont pas montré de résultats suffisamment probants pour être utilisées de façon systématique. Aussi, tant que les deux approches n'ont pas montré d'avancées significatives, il reste intéressant de suivre les évolutions de chacune de ces voies.

Bibliographie

- [1] P. Cousinou. Le risque de criticité et sa prévention dans les usines, les laboratoires et les transports. *http://www.cea.fr/content/download/3038/14329/file/09-criticite.pdf*, 2001.
- [2] J.-M. Gomit. Cristal v1 : Criticality package for burnup credit calculation. *Proc. of the NCSD 2005 Meeting on Integrating Criticality Safety into the Resurgence of Nuclear Power, Knoxville, TN, USA*, 2005.
- [3] X-5 Monte Carlo Team. *MCNP : A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 Volume I : Overview and Theory*. Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [4] P. Brémaud. *Introduction aux probabilités*. Springer Verlag, 1984.
- [5] G. Comte de Buffon. *Essai d'arithmétique morale*. Supplément à la naturelle, Vol.4, 1777.
- [6] R. Eckhardt. Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo Method. *Los Alamos Science, Special Issue*, pp. 131-143, 1987.
- [7] N. Metropolis. The beginning of the Monte Carlo method. *Los Alamos Science, Special issue*, 1987.
- [8] G. E. Whitesides. A difficulty in computing the k-effective of the world. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 1971.
- [9] NEA Report. *Source Convergence in Criticality Safety Analyses*. NEA n°5431, OECD, 2006.
- [10] Y. Richet. *Suppression du Régime Transitoire Initial des Simulations Monte Carlo de Criticité*. PhD thesis, Mines de Saint Etienne, 2006.
- [11] N. Martin. *Méthode de Monte Carlo avec tables de probabilité pour le calcul neutronique*. PhD thesis, Ecole Polytechnique de Montréal, 2011.
- [12] A. Hebert. *Applied Reactor Physics*. Presses Internationales Polytechniques, 2009.
- [13] P. Reuss. *Précis de Neutronique*. EDP sciences, 2003.
- [14] D. C. Irving. The adjoint Boltzmann equation and its simulation by Monte Carlo. *Nuclear Engineering and Design*, pp. 273-292, vol. 15, 1971.

- [15] Coveyou et al. Adjoint and importance in Monte Carlo application. *Nuclear science and Engineering*, p. 219, vol. 27, 1967.
- [16] J.R. Lamarsh. *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Addison-Wesley, 1966.
- [17] Bell and Glasstone. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold, 1970.
- [18] H. Hurwitz. *Naval Reactor physics Handbook*. 1964.
- [19] P. Wilson B. Kiedrowski, F. Brown. Calculating kinetics parameters and reactivity changes with continuous-energy Monte Carlo. *PHYSOR 2010, Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania*, 2010.
- [20] A.A. Blyskavka K.F. Raskach. An experience of applying iterated fission probability method to calculation of effective kinetics parameters and keff sensitivities with Monte Carlo. *PHYSOR 2010, Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania*, 2010.
- [21] B.C. Kiedrowski. *Adjoint Weighting for continuous-energy Monte Carlo radiation Transport*. PhD thesis, University of Wisconsin-Madison, 2009.
- [22] G. R. Keepin. *Physics of Nuclear Kinetics*. Addison-Wesley, p. 163, 1965.
- [23] J. Wagner. *Acceleration of Monte Carlo shielding calculations with an automated variance reduction technique and parallel processing*. PhD thesis, Pennsylvania State University, 1997.
- [24] O. Zamonsky Z. Karriem, K. Ivanov. Development of a consistent monte carlo-deterministic transport methodology based on the method of characteristics and MCNP5. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*, 2011.
- [25] R. Le Tellier. *Développement de la méthode des caractéristiques pour le calcul de réseau*. PhD thesis, Ecole Polytechnique de Montréal, 2006.
- [26] D. Rozon. *Introduction à la cinétique des réacteurs nucléaires*. École Polytechnique de Montréal, 1992.
- [27] I. Lux and L. Koblinger. *Monte Carlo particle transport methods : neutron and photon calculations*. CRC Press, 1991.
- [28] A. Bielajew. *Fundamentals of Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*. The University of Michigan, 2001.
- [29] J. Spanier and E. M. Gelbard. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Dover Publications, 2008.
- [30] NEA. JEFF and EFF projects. <http://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/>.

- [31] S. Christoforou. *A zero-variance based scheme for Monte Carlo criticality simulations*. PhD thesis, Delft University, 2010.
- [32] J. E. Hoogenboom. Zero variance monte carlo schemes revisited. *Nuclear science and Engineering*, pp. 1-22, vol. 160, 2008.
- [33] T. E. Booth. Genesis of the weight window and the weight window generator in MCNP - a personal history. *LA-UR-06-5807, Los Alamos National Laboratory*, 2006.
- [34] T. E. Booth. A sample problem for variance reduction in mcnp. *LA-10363-MS, Los Alamos National Laboratory*, 1985.
- [35] T. Becker. *Hybrid Monte Carlo/Deterministic Methods for Radiation Shielding Problems*. PhD thesis, University of Michigan, 2009.
- [36] A. Haghghat. Monte Carlo variance reduction with deterministic importance function. *Progress in Nuclear Energy*, pp. 25-53 vol. 42,n°1, 2003.
- [37] S. W. Mosher J. C. Wagner, D. E. Peplow and T. M. Evans. Review of hybrid (deterministic/monte carlo) radiation transport methods, codes, and applications at oak ridge national laboratory. *Progress in nuclear science and technology*, pp.808-814, Vol. 2, 2011.
- [38] S. W. Mosher T. M. Evans J. A. Turner J. C. Wagner, D. E. Peplow. Hybrid and parallel domain-decomposition methods development to enable monte carlo for reactor analyses. *Progress in nuclear science and technology, Vol. 2, pp.815-820 (2011)*, 2011.
- [39] J. E. Hoogenboom and S. Christoforou. A zero-variance-based scheme for monte carlo criticality calculations. *Nuclear science and Engineering*, pp. 91-104, vol. 167, 2011.
- [40] E. Dumonteil and T. Courau. Dominance ratio assessment and Monte Carlo criticality simulations : dealing with high dominance ratio systems. *Nuclear Technology*, vol. 172, 2010.
- [41] T. Ueki and F. Brown. Stationarity diagnostics using Shannon entropy in monte carlo criticality calculation I : F test. *American Nuclear Society 2002 Winter Meeting, November 17-21, Washington, DC*, 2002.
- [42] F. Brown. On the use of Shannon entropy of the fission distribution for assessing convergence of monte carlo criticality calculations. *PHYSOR 2006, ANS Topical Meeting on Reactor Physics, Vancouver, BC, Canada*, 2006.
- [43] F. Brown B.C. Kiedrowski. Difficulties computing k in non-uniform, multi-region systems with loose, asymmetric coupling. *ICNC, Edinburgh, Scotland*, 2011.
- [44] S. S. Wilks. Determination of sample size for setting tolerance limits. *The Annals of Mathematical statistics*, pp. 91-96, Vol. 12 no.1, 1941.

- [45] L. Heulers et al. MORET5 overview of the new capabilities implemented in the multigroup/continuous-energy version. *ICNC, Edinburgh, Scotland*, 2011.
- [46] R.J. Brissenden and A.R. Garlick. Biases in the estimation of K_{eff} and its error by Monte Carlo methods. *Ann. Nucl. Energy*, pp. 63-83, Vol. 13, No. 2, 1986.
- [47] R. N. Blomquist and E. M. Gelbard. Alternative implementations of the Monte Carlo power method. *Nucl. Sci. Eng.*, pp. 85-100, Vol. 141, 2002.
- [48] T. Yamamoto and Y. Miyoshi. Reliable method for fission source convergence of Monte Carlo criticality calculation with Wielandt's method. *J. Nucl. Sci. Technol.*, pp. 99-107, Vol. 41, No. 2, 2004.
- [49] R. Roy G. Marleau, A. Hebert. *A User Guide for DRAGON Version 4*. Rapport technique IGE-294, Ecole Polytechnique de Montréal, 2004.
- [50] O. Jacquet et al. Eigenvalue uncertainty evaluation in MC calculations, using time series methodologies. *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg*, 2001.
- [51] Y. Richet et al. Initialization bias suppression of an iterative monte carlo calculation. *The Monte Carlo Method : Versatility unbounded in a dynamic computing world, Chattanooga, Tennessee, April 17-21*, 2005.
- [52] A. Jinaphanh et al. Automated convergence detection in Monte Carlo criticality calculations using student's bridge statistics based on K_{eff} or Shannon entropy. *PHYSOR 2012, ANS Physics of Reactors Topical Meeting, Knoxville, TN, USA*, 2012.
- [53] G. Saporta. *Probabilités, analyse des données et statistique*. TECHNIP, 1990.
- [54] Jacquet O. *Communication Personnelle*. 2012.
- [55] J. Densmore. *Variational Variance Reduction for Monte Carlo reactor analysis*. PhD thesis, University of Michigan, 2002.
- [56] M. Baudoin. *Apprends L^AT_EX*. <http://tex.loria.fr/general/apprends-latex.pdf>, 1997.
- [57] A. Jinaphanh et al. Exploring the use of a deterministic adjoint flux calculation in criticality monte carlo simulations. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M²C 2011)*, 2011.

Liste des tableaux

3.1	Composition des milieux (at/b-cm)	67
4.1	Résumé des modifications de l'échantillonnage des sites de naissance	83
4.2	Description du jeux de données	87
4.3	Comparaison des k_{eff} entre les différentes façons d'initialiser	93
4.4	Fraction source dans le volume 1 en regard de l'initialisation	94
4.5	Résumé des modifications de l'échantillonnage des sites de naissance	101
4.6	Comparaison des écarts types avec la simulation naturelle	105
4.7	Comparaison des k_{eff} avec la simulation naturelle	105
4.8	Nombre moyen par étape de splitting et roulettes russes	106
4.9	Comparaison des k_{eff} avec la simulation naturelle	108
4.10	Comparaison des k_{eff} avec la simulation naturelle	110
4.11	Comparaison des temps de calculs	111
4.12	Comparaison des temps de calcul	112
4.13	Fraction source du volume 1 pour une initialisation par le taux de production d'un calcul déterministe direct pour le cas asymétrique	113
4.14	k_{eff} pour une initialisation par le taux de production d'un calcul déterministe direct pour le cas asymétrique	113
4.15	Fraction source du volume 1 perturbé par un taux de production déterministe sur la géométrie symétrique	114
4.16	Comparaison des taux de production pour des initialisations différentes pour 9680 neutrons par étape	122
4.17	Comparaison des taux de production pour des initialisations différentes pour 968 neutrons par étape	122
4.18	Comparaison des k_{eff} entre les différentes initialisations	122
4.19	Comparaison des temps de calculs sur le quart de cœur avec 968 neutrons par étapes	123
4.20	Comparaison des différents taux de production avec une modification de la sélection des sites de fission avec 968 neutrons par étapes	124

4.21	Comparaison des différents taux de production avec une modification de la sélection des sites de fission avec 9680 neutrons par étapes	124
4.22	Comparaison des k_{eff} en modifiant la sélection des sites de naissance pour le quart de cœur	125
4.23	Comparaison des différents taux de production avec une modification de la marche aléatoire avec 968 neutrons par étapes	125
4.24	Nombre moyen par étape de splitting et roulette russe pour 968 neutrons simulés par étape	126
4.25	Comparaison des k_{eff} en modifiant la marche aléatoire des neutrons pour le quart de cœur	126
5.1	Relevés du niveau des pluies sur 9 années	130
5.2	Représentation des choix possibles avec probabilités correspondantes	132

Table des figures

1	Exemple de fausse convergence	10
2.1	Quadrature S6 d'un octant de la sphère unité	24
2.2	Schéma du changement de variable opéré dans la méthode MOC	26
2.3	Exemple d'une configuration pour la méthode des caractéristiques	29
2.4	Exemple d'une configuration où le volume II est inclus dans le volume I pour la méthode des caractéristiques	29
2.5	Calcul de π par la méthode de Monte Carlo	35
2.6	Densité de la loi gaussienne $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	36
2.7	Algorithme Monte Carlo appliqué au calcul de criticité	38
2.8	Schéma de l'algorithme des itérations sur les générations et identification de la localisation de quelques estimateurs	40
2.9	Schéma de l'algorithme de la vie d'un neutron et identification de la localisation de quelques estimateurs	41
2.10	Etapes de convergence d'un calcul Monte Carlo	42
2.11	Diagramme représentant l'enchaînement d'un calcul Monte Carlo	50
2.12	Schéma résumant l'enchaînement des étapes de la simulation de criticité	53
3.1	Géométrie d'une piscine de stockage avec un double chargement d'assemblages	62
3.2	Evolution du K_{eff} en fonction du nombre d'étapes pour différents estimateurs	63
3.3	Evolution du k_{eff} en fonction du nombre d'étapes initiales supprimées de l'estimation pour différents estimateurs	64
3.4	Évolution de l'entropie de Shannon en fonction du nombre d'étapes pour une piscine de stockage avec différentes tailles de maillages	65
3.5	Exemple de fausse convergence	66
3.6	Géométrie du cas test	67
3.7	Histogramme du rapport des taux de production pour 70 aléas pour la simulation naturelle et une initialisation uniforme	68

3.8	Taux de production normalisé en fonction des étapes pour une simulation naturelle	69
3.9	Histogramme du rapport des taux de production avec 10 000 neutrons par étape	70
3.10	Maximum et minimum des entropies de Shannon	71
4.1	Schéma résumant le couplage DRAGON-MORET	77
4.2	Enchaînement des modules DRAGON pour un calcul de flux adjoint	79
4.3	Numérotation des volumes dans DRAGON	80
4.4	Schéma résumant, en vert, les étapes de la simulation modifiées	86
4.5	Géométrie du cas test	89
4.6	Comparaison des distributions initiales uniforme et automatique	90
4.7	Comparaison du flux et taux de production direct avec les distributions initiales uniforme et automatique	91
4.8	Rapport des taux de production en fonction des étapes	92
4.9	Maximum et minimum par étape des entropies de Shannon	93
4.10	Évolution de l'estimation du k_{eff} avec l'initialisation par l'adjoint pour différents estimateurs	95
4.11	Évolution de l'estimation du k_{eff} avec une initialisation uniforme pour différents estimateurs	96
4.12	Rapport des taux de production en fonction des étapes pour différentes initialisations	97
4.13	Fraction source du volume 1 en fonction des étapes pour une modification de l'échantillonnage entre génération dans le cas asymétrique	98
4.14	Histogramme du rapport des taux de production pour 70 aléas pour la simulation naturelle avec une initialisation uniforme	99
4.15	Taux de production normalisé en fonction des étapes pour une simulation naturelle	100
4.16	Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations en multipliant le taux de production par l'adjoint	101
4.17	Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations en utilisant uniquement l'adjoint	102
4.18	Fraction source du volume 1 en fonction des étapes - aléa 1	103
4.19	Fraction source du volume 1 en fonction des étapes - aléa 2	104
4.20	Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations avec une modification de l'échantillonnage	107
4.21	Comparaison du taux de production direct, du flux adjoint et du flux adjoint pondéré par le spectre de fission dans le cas symétrique	108
4.22	Histogramme du rapport des taux de production pour 70 réalisations avec une stratégie de roulette sur le poids	109
4.23	Fraction source en utilisant une stratégie de roulette sur le poids	110

4.24	Coupe en $Z = 150$ de la géométrie d'un quart de cœur	115
4.25	Coupe en $X = 20$ de la géométrie d'un quart de cœur	116
4.26	Évolution du k_{eff} moyen en fonction des étapes pour une initialisation uniforme sur un quart de cœur	118
4.27	Évolution du k_{eff} moyen en fonction des étapes pour une initialisation par un adjoint de diffusion sur un quart de cœur	119
4.28	Encadrement de l'entropie de Shannon pour différentes initialisations	120
4.29	Encadrement de l'entropie de Shannon pour une initialisation uniforme et une initialisation par un adjoint : zoom sur les premières étapes	121
5.1	Distribution avec la région exclue	131
5.2	Distribution H1 et H0 avec les erreurs de première et seconde espèce	132
5.3	Comparaison des ponts de Student de processus non stationnaire et stationnaire	135
5.4	Inverse CDF pour ρ allant de 0.0 à 0.9	136
5.5	Schéma de troncature du transitoire	138
5.6	Pont de Student de la série des k_{eff}	141
5.7	Entropie de Shannon du cas réseau avec en bleu le transitoire détecté	141
5.8	Géométrie du cas de réseau de sphères en interaction	142
5.9	Courbes des k_{eff} d'étape et du pont correspondant avec le transitoire détecté en bleu	143
5.10	Courbes de l'entropie et du pont correspondant avec le transitoire détecté en bleu	143
5.11	Exemple de fausse détection de la stationnarité	144
5.12	Géométrie du cas faiblement couplé	145
5.13	Entropie de Shannon pour le cas de deux unités fissiles découpées	146

Annexe A

Jeux de données du cas cœur

A.1 Jeu de données DRAGON

```
*-----
* TEST CASE
* 17 X 17 PWR ASSEMBLY WITHOUT POISON
* 172-GROUP JEF2.2 DRAGLIB
*
*-----
* Define STRUCTURES and MODULES used
*-----
LINKED_LIST
  ASSMB DISCR LIBRARY CP CALC OUT DATABASE ISOT SPHGEOM MTRACK OUT2
  MACRO OUT3 MACROTMP ;
SEQ_ASCII
  res MACROREP MACRODIF ;
MODULE
  LIB: GEO: SYBILT: BIVACT: SHI: ASM: FLU: EDI: COMPO: SPH: DELETE:
  END: M2T: UTL: MAC: ;
PROCEDURE assertS ;
*-----
* Microscopic cross sections from Jef 2.2 Draglib
*-----
LIBRARY := LIB: ::
  NMIX 8 CTRA WIMS
  MIXS LIB: DRAGON FIL: DLIB_J2_P5
  MIX 1 579.9
    H1H20   = H1_H20   4.76690E-2   016H20   = 016       2.38345E-2
    B10     = B10     4.71444E-6   B11      = B11       1.90959E-5
  MIX 2 579.9
    Cr52    = Cr52    7.54987E-5   Fe56     = Fe56       1.47624E-4
```

Zr91	=	Zr0	4.18621E-2			
MIX 3 579.9						
H1H20	=	H1_H20	4.65292E-2	O16H20	=	O16
				Cr52	=	Cr52
Fe56	=	Fe56	4.45845E-5	Ni58	=	Ni58
				MoNat	=	Mo95
				Al27	=	Al27
Mn55	=	Mn55	4.15901E-7			
B10	=	B10	4.60867E-6	B11	=	B11
Zr91	=	Zr0	8.92427E-4			
MIX 4 579.9						
				O16	=	O16
Cr52	=	Cr52	7.07291E-5	Fe56	=	Fe56
Zr91	=	Zr0	3.92175E-2			
MIX 5 579.9						
H1H20	=	H1_H20	4.71346E-2	O16H20	=	O16
				Cr52	=	Cr52
Fe56	=	Fe56	2.09013E-5	Ni58	=	Ni58
				MoNat	=	Mo95
				Al27	=	Al27
Mn55	=	Mn55	1.94976E-7			
B10	=	B10	4.66484E-6	B11	=	B11
Zr91	=	Zr0	4.18372E-4			
MIX 6 579.9						
H1H20	=	H1_H20	4.71676E-2	O16H20	=	O16
				Cr52	=	Cr52
Fe56	=	Fe56	1.96130E-5	Ni58	=	Ni58
				MoNat	=	Mo95
				Al27	=	Al27
Mn55	=	Mn55	1.82957E-7			
B10	=	B10	4.66791E-6	B11	=	B11
Zr91	=	Zr0	3.92583E-4			
MIX 7 579.9						
H1H20	=	H1_H20	4.72020E-2	O16H20	=	O16
				Cr52	=	Cr52
Fe56	=	Fe56	1.82630E-5	Ni58	=	Ni58
				MoNat	=	Mo95
				Al27	=	Al27
Mn55	=	Mn55	1.70365E-7			
B10	=	B10	4.67110E-6	B10	=	B10
Zr91	=	Zr0	3.65562E-4			
MIX 8 933.6						
				O16	=	O16
U235	=	U235	7.39237E-4			
U238	=	U238	2.17285E-2			

;

```

*-----
* Geometry ASSMB : a 17 X 17 normal PWR assembly
* contains C1 : cell without fuel
*           C2 : normal fuel cell
*           C3 : peripheral cell
*           C4 : corner cell
*-----
ASSMB := GEO: :: CAR2D 9 9
X- DIAG X+ REFL Y- SYME Y+ DIAG
CELL C1 C2 C2 C1 C2 C2 C1 C2 C3
      C2 C2 C2 C2 C2 C2 C2 C3
      C2 C2 C2 C2 C2 C2 C3
      C1 C2 C2 C1 C2 C3
      C2 C2 C2 C2 C3
      C1 C2 C2 C3
      C2 C2 C3
      C2 C3
      C4
MERGE 1  3 12 11 12 12 11 12 15
        4  6  5  6  6  5  6  8
        13 5  6  6  5  6  8
          2  5  5 10  5  8
          13 5  5  6  8
            2  5  7  8
            13 7  8
              14 8
                9
TURN  H  H  B  H  H  B  H  H  A
      H  G  G  H  G  G  H  A
      A  E  E  F  E  E  A
      H  H  F  H  H  A
      H  E  G  H  A
      H  H  A  A
      H  A  A
      A  A
      A
::: C1 := GEO: CARCEL 2
MESHX 0.0 1.26472 MESHY 0.0 1.26472
RADIUS 0.0 0.572435 0.613142 MIX 1 2 3 ;
::: C2 := GEO: C1 RADIUS 0.0 0.412660 0.474364 MIX 8 4 5 ;
::: C3 := GEO: C2 MESHX 0.0 1.31472 MIX 8 4 6 ;
::: C4 := GEO: C3 MESHY 0.0 1.31472 MIX 8 4 7 ;
;
*-----

```

```

* Self-Shielding calculation SYBIL
* Transport calculation      SYBIL
* Flux calculation for B1 homogeneous leakage
* Editing using SPH model for transport-diffusion
*----
DISCR := SYBILT: ASSMB ::
  TITLE 'TCDR02: 17 X 17 MULTICELL PWR BENCHMARK WITHOUT POISON'
  MAXR 400 QUA2 6 3 ;
LIBRARY := SHI: LIBRARY DISCR :: LJ ;
CP := ASM: LIBRARY DISCR ;
CALC := FLU: CP LIBRARY DISCR ::
  TYPE B B1 ;
!assertS CALC :: 'K-INFINITY' 1 1.256444 ;

* *****
* Sortie a 172 g          *
* *****

* OUT2 := EDI: LIBRARY DISCR CALC ASSMB ::
*   EDIT 0 SAVE ON 'TOTO' MERG COMP ;

* OUT3 := EDI: LIBRARY DISCR CALC ASSMB ::
*   EDIT 0 SAVE ON 'TOTO' MERG MIX 1 0 0 0 0 0 0 0 ;

* MACRO := OUT2 :: STEP UP 'TOTO' STEP UP 'MACROLIB' ;
* MACROTMP := OUT3 :: STEP UP 'TOTO' STEP UP 'MACROLIB' ;

* MACRO := MAC: MACRO MACROTMP :: MIX 1 1 UPDL MIX 2 1 OLDL ;

* MACRODIF := MACRO ;

* MACROREP := M2T: MACRO :: PN 0
*   MIX FUEL1 FROM 1 ENDMIX
*   MIX WATER FROM 2 ENDMIX ;
* *****
* fin Sortie a 172 g      *
* *****

* *****
* Sortie a 2 g          *
* *****

```

```

OUT2 := EDI: LIBRARY DISCR CALC ASSMB ::
      EDIT 0 SAVE ON 'TOTO' MERG COMP COND 0.625 ;

OUT3 := EDI: LIBRARY DISCR CALC ASSMB ::
      EDIT 0 SAVE ON 'TOTO' MERG MIX 1 0 0 0 0 0 0 0 0 COND 0.625 ;

MACRO := OUT2 :: STEP UP 'TOTO' STEP UP 'MACROLIB' ;
MACROTMP := OUT3 :: STEP UP 'TOTO' STEP UP 'MACROLIB' ;

MACRO := MAC: MACRO MACROTMP :: MIX 1 1 UPDL MIX 2 1 OLDL ;

MACRODIF := MACRO ;

END: ;
QUIT "LIST" .

```

A.2 Jeu de données DONJON

```

LINKED_LIST IAEA3D MACRO TRACK SYSTEM FLUX EDIT REF ;
MODULE GEO: MAC: TRIVAT: TRIVAA: FLUD: OUT: ERROR: END: UTL: ;
SEQ_ASCII iaea3d_ref MACRODIF MACRO_2G ;
PROCEDURE assertS ;
*
IAEA3D := GEO: :: CAR3D 9 9 6
      EDIT 2
      X- REFL X+ VOID
      Y- REFL Y+ VOID
      Z- VOID Z+ VOID
      MESHX 0.0 10.0 30.0 50.0 70.0 90.0 110.0 130.0 150.0 170.0
      MESHY 0.0 10.0 30.0 50.0 70.0 90.0 110.0 130.0 150.0 170.0
      MESHZ 0.0 20.0 105.0 190.0 275.0 360.0 380.0
      SPLITZ 1 1 1 1 1 1
      ! PLANE NB 1
      MIX 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2
          2 2 2 2 2 2 2 2 2

```

```
2 2 2 2 2 2 2 2 2
! PLANE NB 2
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 2 2 2 2
1 1 1 1 2 2 2 2 2
1 1 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
! PLANE NB 3
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 2 2 2 2
1 1 1 1 2 2 2 2 2
1 1 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
! PLANE NB 4
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 2 2 2 2
1 1 1 1 2 2 2 2 2
1 1 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
! PLANE NB 5
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 1 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 1 2 2 2
1 1 1 1 1 2 2 2 2
1 1 1 1 2 2 2 2 2
1 1 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
! PLANE NB 6
2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2
```

```

                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                2 2 2 2 2 2 2 2 2
                ;

MACRO := MACRODIF ;

TRACK := TRIVAT: IAEA3D ::
        TITLE 'TEST IAEA 3D'
        EDIT 0 MAXR 500 DUAL 3 3 ;
SYSTEM := TRIVAA: MACRO TRACK ::
        EDIT 0 ;
FLUX := FLUD: SYSTEM TRACK ::
        ADJ THER 10 EXTE 1000 EDIT 1 ;

EDIT := OUT: FLUX TRACK MACRO IAEA3D ::
        ADJO EDIT 1 INTG IN ;

END: ;

```

A.3 Jeu de données MORET

Le jeu de données présenté ici est celui utilisant le flux adjoint pour la modification de l'initialisation du calcul.

```

DEBUT_MORET
Cas iaea3d issu test non regression dragon
*un quart de coeur

GEOM
* BOITE EXTERIEUR AIR
MODU 0
* boite exterieure remplie d'eau (chimie 5)
  TYPE 1 BOIT 85.0 85.0 190.0
    VOLU 1 0 1 2 85.0 85.0 190.0
    * reflexions x et y, vacuum en Z
    RBOIT 1. 0. 1. 0. 0. 0.

  TYPE 12 BOIT 10. 10. 42.5

```

TYPE 22 BOIT 10. 5. 42.5

TYPE 32 BOIT 5. 10. 42.5

TYPE 42 BOIT 5. 5. 42.5

* plan 1 decoupage fissile

* ligne 1

VOLU 111 1 42 1 5. 5. 62.5
VOLU 112 1 22 1 20. 5. 62.5
VOLU 113 1 22 1 40. 5. 62.5
VOLU 114 1 22 1 60. 5. 62.5
VOLU 115 1 22 1 80. 5. 62.5
VOLU 116 1 22 1 100. 5. 62.5
VOLU 117 1 22 1 120. 5. 62.5

* ligne 2

VOLU 121 1 32 1 5. 20. 62.5
VOLU 122 1 12 1 20. 20. 62.5
VOLU 123 1 12 1 40. 20. 62.5
VOLU 124 1 12 1 60. 20. 62.5
VOLU 125 1 12 1 80. 20. 62.5
VOLU 126 1 12 1 100. 20. 62.5
VOLU 127 1 12 1 120. 20. 62.5

* ligne 3

VOLU 131 1 32 1 5. 40. 62.5
VOLU 132 1 12 1 20. 40. 62.5
VOLU 133 1 12 1 40. 40. 62.5
VOLU 134 1 12 1 60. 40. 62.5
VOLU 135 1 12 1 80. 40. 62.5
VOLU 136 1 12 1 100. 40. 62.5

* ligne 4

VOLU 141 1 32 1 5. 60. 62.5
VOLU 142 1 12 1 20. 60. 62.5
VOLU 143 1 12 1 40. 60. 62.5
VOLU 144 1 12 1 60. 60. 62.5
VOLU 145 1 12 1 80. 60. 62.5
VOLU 146 1 12 1 100. 60. 62.5

* ligne 5

VOLU 151 1 32 1 5. 80. 62.5
VOLU 152 1 12 1 20. 80. 62.5
VOLU 153 1 12 1 40. 80. 62.5
VOLU 154 1 12 1 60. 80. 62.5

```

        VOLU 155 1 12 1 80. 80. 62.5
* ligne 6
        VOLU 161 1 32 1 5. 100. 62.5
        VOLU 162 1 12 1 20. 100. 62.5
        VOLU 163 1 12 1 40. 100. 62.5
        VOLU 164 1 12 1 60. 100. 62.5
* ligne 7
        VOLU 171 1 32 1 5. 120. 62.5
        VOLU 172 1 12 1 20. 120. 62.5
*****
* plan 2 decoupage fissile
*****
* ligne 1
        VOLU 211 1 42 1 5. 5. 147.5
        VOLU 212 1 22 1 20. 5. 147.5
        VOLU 213 1 22 1 40. 5. 147.5
        VOLU 214 1 22 1 60. 5. 147.5
        VOLU 215 1 22 1 80. 5. 147.5
        VOLU 216 1 22 1 100. 5. 147.5
        VOLU 217 1 22 1 120. 5. 147.5
* ligne 2
        VOLU 221 1 32 1 5. 20. 147.5
        VOLU 222 1 12 1 20. 20. 147.5
        VOLU 223 1 12 1 40. 20. 147.5
        VOLU 224 1 12 1 60. 20. 147.5
        VOLU 225 1 12 1 80. 20. 147.5
        VOLU 226 1 12 1 100. 20. 147.5
        VOLU 227 1 12 1 120. 20. 147.5
* ligne 3
        VOLU 231 1 32 1 5. 40. 147.5
        VOLU 232 1 12 1 20. 40. 147.5
        VOLU 233 1 12 1 40. 40. 147.5
        VOLU 234 1 12 1 60. 40. 147.5
        VOLU 235 1 12 1 80. 40. 147.5
        VOLU 236 1 12 1 100. 40. 147.5
* ligne 4
        VOLU 241 1 32 1 5. 60. 147.5
        VOLU 242 1 12 1 20. 60. 147.5
        VOLU 243 1 12 1 40. 60. 147.5
        VOLU 244 1 12 1 60. 60. 147.5
        VOLU 245 1 12 1 80. 60. 147.5
        VOLU 246 1 12 1 100. 60. 147.5
* ligne 5
        VOLU 251 1 32 1 5. 80. 147.5

```

VOLU 252	1	12	1	20.	80.	147.5
VOLU 253	1	12	1	40.	80.	147.5
VOLU 254	1	12	1	60.	80.	147.5
VOLU 255	1	12	1	80.	80.	147.5
* ligne 6						
VOLU 261	1	32	1	5.	100.	147.5
VOLU 262	1	12	1	20.	100.	147.5
VOLU 263	1	12	1	40.	100.	147.5
VOLU 264	1	12	1	60.	100.	147.5
* ligne 7						
VOLU 271	1	32	1	5.	120.	147.5
VOLU 272	1	12	1	20.	120.	147.5

* plan 3 decoupage fissile						

* ligne 1						
VOLU 311	1	42	1	5.	5.	232.5
VOLU 312	1	22	1	20.	5.	232.5
VOLU 313	1	22	1	40.	5.	232.5
VOLU 314	1	22	1	60.	5.	232.5
VOLU 315	1	22	1	80.	5.	232.5
VOLU 316	1	22	1	100.	5.	232.5
VOLU 317	1	22	1	120.	5.	232.5
* ligne 2						
VOLU 321	1	32	1	5.	20.	232.5
VOLU 322	1	12	1	20.	20.	232.5
VOLU 323	1	12	1	40.	20.	232.5
VOLU 324	1	12	1	60.	20.	232.5
VOLU 325	1	12	1	80.	20.	232.5
VOLU 326	1	12	1	100.	20.	232.5
VOLU 327	1	12	1	120.	20.	232.5
* ligne 3						
VOLU 331	1	32	1	5.	40.	232.5
VOLU 332	1	12	1	20.	40.	232.5
VOLU 333	1	12	1	40.	40.	232.5
VOLU 334	1	12	1	60.	40.	232.5
VOLU 335	1	12	1	80.	40.	232.5
VOLU 336	1	12	1	100.	40.	232.5
* ligne 4						
VOLU 341	1	32	1	5.	60.	232.5
VOLU 342	1	12	1	20.	60.	232.5
VOLU 343	1	12	1	40.	60.	232.5
VOLU 344	1	12	1	60.	60.	232.5
VOLU 345	1	12	1	80.	60.	232.5

	VOLU	346	1	12	1	100.	60.	232.5
* ligne	5							
	VOLU	351	1	32	1	5.	80.	232.5
	VOLU	352	1	12	1	20.	80.	232.5
	VOLU	353	1	12	1	40.	80.	232.5
	VOLU	354	1	12	1	60.	80.	232.5
	VOLU	355	1	12	1	80.	80.	232.5
* ligne	6							
	VOLU	361	1	32	1	5.	100.	232.5
	VOLU	362	1	12	1	20.	100.	232.5
	VOLU	363	1	12	1	40.	100.	232.5
	VOLU	364	1	12	1	60.	100.	232.5
* ligne	7							
	VOLU	371	1	32	1	5.	120.	232.5
	VOLU	372	1	12	1	20.	120.	232.5

* plan 4 decoupage fissile								

* ligne	1							
	VOLU	411	1	42	1	5.	5.	317.5
	VOLU	412	1	22	1	20.	5.	317.5
	VOLU	413	1	22	1	40.	5.	317.5
	VOLU	414	1	22	1	60.	5.	317.5
	VOLU	415	1	22	1	80.	5.	317.5
	VOLU	416	1	22	1	100.	5.	317.5
	VOLU	417	1	22	1	120.	5.	317.5
* ligne	2							
	VOLU	421	1	32	1	5.	20.	317.5
	VOLU	422	1	12	1	20.	20.	317.5
	VOLU	423	1	12	1	40.	20.	317.5
	VOLU	424	1	12	1	60.	20.	317.5
	VOLU	425	1	12	1	80.	20.	317.5
	VOLU	426	1	12	1	100.	20.	317.5
	VOLU	427	1	12	1	120.	20.	317.5
* ligne	3							
	VOLU	431	1	32	1	5.	40.	317.5
	VOLU	432	1	12	1	20.	40.	317.5
	VOLU	433	1	12	1	40.	40.	317.5
	VOLU	434	1	12	1	60.	40.	317.5
	VOLU	435	1	12	1	80.	40.	317.5
	VOLU	436	1	12	1	100.	40.	317.5
* ligne	4							
	VOLU	441	1	32	1	5.	60.	317.5
	VOLU	442	1	12	1	20.	60.	317.5

VOLU 443 1 12 1 40. 60. 317.5
 VOLU 444 1 12 1 60. 60. 317.5
 VOLU 445 1 12 1 80. 60. 317.5
 VOLU 446 1 12 1 100. 60. 317.5
 * ligne 5
 VOLU 451 1 32 1 5. 80. 317.5
 VOLU 452 1 12 1 20. 80. 317.5
 VOLU 453 1 12 1 40. 80. 317.5
 VOLU 454 1 12 1 60. 80. 317.5
 VOLU 455 1 12 1 80. 80. 317.5
 * ligne 6
 VOLU 461 1 32 1 5. 100. 317.5
 VOLU 462 1 12 1 20. 100. 317.5
 VOLU 463 1 12 1 40. 100. 317.5
 VOLU 464 1 12 1 60. 100. 317.5
 * ligne 7
 VOLU 471 1 32 1 5. 120. 317.5
 VOLU 472 1 12 1 20. 120. 317.5

FINM
 FING

GRAPH Z 150. FGRAPH
 PEIN Z 150. FPEIN

CHIMie

MULTigroupe

* fuel 1

APO2 1 NORDre 1

* WATER + B10

APO2 2 NORDre 2

FINChimie

SORT

POST SHAN 15 15 15 FPOST

* POST STAR FPOST

FSORT

SIMU

ALEA 201

ADJD

INIT

GEOM

CELL 1

```

      1 CAR3 1 1 1
      LATT 9 9 6
* PLANE 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
* PLANE 2
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
* PLANE 3
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
* PLANE 4
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
      1 1 1 1 1 1 1 1 1
* PLANE 5
      1 1 1 1 1 1 1 1 1

```

```

1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
* PLANE 6
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1
MESX 0.0 10.0 30.0 50.0 70.0 90.0 110.0 130.0 150.0 170.0
MESY 0.0 10.0 30.0 50.0 70.0 90.0 110.0 130.0 150.0 170.0
MESZ 0.0 20.0 105.0 190.0 275.0 360.0 380.0
FADJ
FSIMU

SOUR
* UNIF 1 MODU 0 FUNI
* UNIF 1000 MODU 0 VOLU 111 FUNI
  AUTO 968
FINS

ARRE
  ETAP
    ACTI 1000
    PASS 0
FINA

FIND
FIN_MORET

```

Résumé

Les calculs Monte Carlo en neutronique-criticité permettent d'estimer le coefficient de multiplication effectif ainsi que des grandeurs locales comme le flux ou les taux de réaction. Certaines configurations présentant de faibles couplages neutroniques (modélisation de cœurs complets, prise en compte de profils d'irradiations, ...) peuvent conduire à de mauvaises estimations du k_{eff} ou des flux locaux. L'objet de cette thèse est de contribuer à rendre plus robuste l'algorithme Monte Carlo utilisé et améliorer la détection de la convergence. L'amélioration du calcul envisagée passe par l'utilisation, lors du calcul Monte Carlo, d'un flux adjoint obtenu par un pré-calcul déterministe réalisé en amont. Ce flux adjoint est ensuite utilisé pour déterminer le positionnement de la première génération, modifier la sélection des sites de naissance, et modifier la marche aléatoire par des stratégies de splitting et de roulette russe. Une méthode de détection automatique du transitoire a été développée. Elle repose sur la modélisation des séries de sortie par un processus auto régressif d'ordre 1 et un test statistique dont la variable de décision est la moyenne du pont de Student. Cette méthode a été appliquée au k_{eff} et à l'entropie de Shannon. Elle est suffisamment générale pour être utilisée sur n'importe quelle série issue d'un calcul Monte Carlo itératif. Les méthodes développées dans cette thèse ont été testées sur plusieurs cas simplifiés présentant des difficultés de convergence neutroniques.

Abstract

Monte Carlo criticality calculation allows to estimate the effective multiplication factor as well as local quantities such as local reaction rates. Some configurations presenting weak neutronic coupling (high burn up profile, complete reactor core, ...) may induce biased estimations for k_{eff} or reaction rates. In order to improve robustness of the iterative Monte Carlo methods, a coupling with a deterministic code was studied. An adjoint flux is obtained by a deterministic calculation and then used in the Monte Carlo. The initial guess is then automated, the sampling of fission sites is modified and the random walk of neutrons is modified using splitting and russian roulette strategies. An automated convergence detection method has been developed. It locates and suppresses the transient due to the initialization in an output series, applied here to k_{eff} and Shannon entropy. It relies on modeling stationary series by an order 1 auto regressive process and applying statistical tests based on a Student Bridge statistics. This method can easily be extended to every output of an iterative Monte Carlo. Methods developed in this thesis are tested on different test cases.