



Développements et validation de calculs à énergie continue pondérés par l'importance

Guillaume Truchet

► **To cite this version:**

Guillaume Truchet. Développements et validation de calculs à énergie continue pondérés par l'importance. Génie des procédés. Université Grenoble Alpes, 2015. Français. <NNT : 2015GREAI037>. <tel-01224452>

HAL Id: tel-01224452

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01224452>

Submitted on 4 Nov 2015

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 GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Ingénierie-matériaux mécanique énergétique
environnement procédés production**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Guillaume TRUCHET

Thèse dirigée par **Alain SANTAMARINA** et
encadrée par **Pierre LECONTE**

préparée au sein du **Laboratoire d'Études de Physique du CEA
de Cadarache, DEN/DER/SPRC**
et rattaché à l'**École Doctorale IMEP-2**

Développements et Validation de Calculs à Énergie Continue Pondérés par l'Importance

Thèse soutenue publiquement le **25 septembre 2015**
devant le jury composé de :

M. Daniel HEUER

Directeur de Recherche au CNRS, Président

M. Paul REUSS

Professeur à l'INSTN, Rapporteur

M. Wilfred van ROOIJEN

Professeur à l'Université de Fukui, Rapporteur

M. Alain SANTAMARINA

Directeur de Recherche à l'INSTN, Directeur de thèse

M. Pierre LECONTE

Docteur au CEA, Encadrant de thèse

M. Joachim MISS

Docteur à l'IRSN

Mme. Laurence VILLATTE

Docteur à AREVA

M. Fausto MALVAGI

Docteur au CEA



Résumé

L'un des enjeux actuels de la neutronique concerne la propagation rigoureuse des incertitudes d'entrée (e.g. données nucléaires, tolérances de fabrications, etc.) aux résultats finaux calculés par les codes (e.g. k_{eff} , taux de réaction, etc.). Pour propager les incertitudes, il est de coutume de faire l'hypothèse de petites variations autour d'une référence et de calculer, dans un premier temps, des profils de sensibilités. Or, les codes Monte Carlo, qui se sont imposés comme des références de calcul, ne possèdent pas – ou n'ont intégré que très récemment – un moyen direct de calculer des sensibilités et donc de réaliser un calcul précis d'incertitudes. Les approches déterministes, elles, permettent le calcul de ces sensibilités mais introduisent parfois de très fortes hypothèses, notamment sur la géométrie.

Le premier objectif de ce travail de thèse est d'introduire dans le code Monte Carlo du CEA de transport des neutrons, TRIPOLI-4[®], des méthodes à même de calculer des profils de sensibilités du k_{eff} aux données nucléaires ou à toute autre perturbation. Pour cela, il a d'abord été nécessaire de mettre en place le calcul du flux adjoint d'un milieu critique. Pour la première fois, et grâce aux développements informatiques de ce travail, il a été possible de calculer dans un cas réel, concret, et applicatif, des spectres de flux adjoints en un point quelconque d'un réacteur. Ceci a été réalisé à l'aide de la probabilité itérée de fission (*Iterated Fission Probability* ou IFP) qui assimile le flux adjoint à l'importance d'un neutron dans un réacteur exactement critique. Ce calcul de flux adjoint a, par la suite, ouvert la porte au premier développement d'une méthode de calcul de « perturbations exactes » en Monte Carlo, théorie qui permet de s'affranchir des hypothèses de petites variations, et qui ouvre la porte à certaines applications jusqu'alors difficiles à analyser.

Au delà de l'analyse poussée de la méthode IFP et de son application au calcul de flux adjoint, cette thèse propose également, d'obtenir dans le code TRIPOLI-4[®], les paramètres cinétiques d'un réacteur pondérés par le flux adjoint. A cette fin, l'implémentation reprend et améliore un algorithme déjà développé par la communauté scientifique pour estimer des perturbations au premier ordre.

Abstract

A key issue in current Reactor Physics is the propagation of input data uncertainties (e.g. nuclear data, manufacturing tolerances, etc.) to the final results of nuclear codes (e.g. k_{eff} , reaction rate, etc.). In order to propagate uncertainties, one typically assumes small variations around a reference in order to evaluate sensitivity profiles. The problem is that nuclear Monte Carlo codes are not – or were not until very recently – able to straightforwardly process such sensitivity profiles, even though they are considered as reference codes.

The first goal of this PhD thesis is to implement a method to calculate nuclear data k_{eff} -sensitivity profiles or reactivity difference induced by any kind of perturbations in TRIPOLI-4[®], the CEA Monte Carlo neutron transport code. To achieve such a goal, a method has first been developed to calculate the adjoint flux using the Iterated Fission Probability (IFP) principle that states that the adjoint flux at a given phase space point is proportional to the neutron importance in a critical core after several power iterations. Thanks to our developments, it has been made possible, for the first time, to calculate the continuous adjoint flux for an actual and complete reactor core configuration. From that new feature, we have developed a new method able to forwardly apply the exact perturbation theory in Monte Carlo codes. Exact perturbation theory does not rely on small variations which makes it possible to calculate very complex experiments.

Finally, after a deep analysis of the IFP method, this PhD thesis also reproduces and improves an already used method to calculate adjoint weighted kinetic parameters.

Remerciements

Cette thèse est le fruit de trois bonnes années passées au *Laboratoire D'Études de Physique* (LEPh) sur le centre du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) de Cadarache. J'y ai trouvé un environnement scientifique et technique très riche, qui m'a permis de mener à bien mon étude dans de bonnes conditions, et avec beaucoup de liberté. Je ne serai jamais assez reconnaissant envers mon encadrant Pierre Leconte, de ses précieux conseils et du dynamisme qu'il m'a communiqué ; ou bien envers Alain Santamarina, mon directeur de thèse, avec qui j'ai pu longuement discuter du sens physique à donner à chaque petit détail. Merci à Yannick Penelieu, qui m'a beaucoup appris sur le fonctionnement des codes Monte Carlo et avec qui j'ai pu débiter ma programmation dans le code TRIPOLI-4[®] ; et plus généralement à l'aide que j'ai toujours pu trouver auprès de Pascal, Jean-Marc, Gerald, Jean-François.

Merci à Cyrille de Saint Jean, d'avoir rendu possible mes utiles visites à l'équipe des développeurs du code TRIPOLI-4[®] du centre CEA de Saclay avec qui j'ai pu beaucoup échanger et apprendre sur des périodes très courtes. Je pense en particulier à Andrea, Emeric, François-Xavier, Odile, et mon premier professeur de neutronique : Fausto Malvagi.

Par ailleurs, je n'oublierai jamais les nombreuses discussions acharnées (scientifiques ou culturelles) que j'ai pu avoir avec mes confrères de thèse, Pierre, Maxence, Léonie, Nans, Edwin, Claire, Tristan et bien d'autres !

J'aimerais aussi remercier mes amis chers, Antoine, Maxime et William qui m'ont permis à plusieurs reprises d'évacuer stress et fatigue.

Un grand grand merci à « ti Tracy en mwen » qui a veillé sur moi jusqu'à la dernière ligne de ce manuscrit. C'est une force que de l'avoir à mes côtés.

C'est aussi l'occasion pour moi de remercier chaleureusement ma famille : parents, sœurs, beaux-frères et neveux, qui m'entourent depuis ma naissance (ou presque), et qui ont démontré un soutien sans faille à mes projets.

Table des matières

I	Introduction	5
I.A	Cadre de la Thèse	7
I.A.1	La Simulation Neutronique	7
I.A.1.i	Des Codes Déterministes et Probabilistes	8
I.A.1.ii	Les Applications des Codes Neutroniques	9
I.A.1.iii	La Démarche de VVUQ	9
I.A.2	Qualification et Retour sur les Données Nucléaires	11
I.A.2.i	Les Données Nucléaires	11
I.A.2.ii	La Propagation des Incertitudes des Données Nucléaires	13
I.A.2.iii	Le Retour des Expériences Intégrales sur les Données Nucléaires	13
I.B	Problématiques et Objectifs	15
I.B.1	Sensibilités & Perturbations → Incertitudes	15
I.B.2	Interprétation des Expériences MINERVE	16
I.B.3	Calculs de Référence de Paramètres Fonctions du Flux Adjoint	16
I.B.3.i	Calcul du Flux Adjoint	16
I.B.3.ii	Calcul des Paramètres Cinétiques	17
I.C	Plan de la Thèse	17
II	Flux Adjoint Monte Carlo	21
II.A	Le Flux Adjoint	23
II.A.1	Définitions	24
II.A.1.i	Définition « Mathématique »	25
II.A.1.ii	Définition « Physique », ou Probabilité de Fission Itérée (IFP)	26
II.A.2	État de l'Art des Méthodes Monte Carlo	27
II.A.2.i	La Probabilité Itérée de Fission	27
II.A.2.ii	Monte Carlo Direct vs Monte Carlo Inversé	28
II.A.2.iii	La Matrices de Fission	30
II.A.2.iv	Synthèse du Calcul d'Importance	32
II.B	Implémentation dans TRIPOLI-4®	34
II.B.1	Méthode AIWS	34
II.B.1.i	Algorithme	34
II.B.1.ii	Précisions sur les Estimateurs	36
II.B.1.iii	Calcul du Taux Total Adjoint	37
II.B.2	Choix des Paramètres de Simulation	37
II.B.2.i	Définition des Sources, des Scores	37
II.B.2.ii	Définition de la Longueur du Cycle	38
II.B.2.iii	Seuil de la Roulette-Russe	42
II.B.3	Vérification & Validation	43
II.B.3.i	Flux Angulaires Monocinétiques Direct et Adjoint	43
II.B.3.ii	Flux Adjoint « Matrice de Fission » vs Flux Adjoint IFP	44
II.B.3.iii	Flux Adjoint IFP multigroupe vs APOLLO2-MOC	45

II.C Illustrations – Qualification	48
II.C.1 Illustration : Validation des Codes Déterministes, Cellule UOX	48
II.C.1.i Spectre Adjoint Moyen dans une pastille UOX	48
II.C.1.ii Flux Adjoints Angulaires dans une Résonance de l' ²³⁸ U	51
II.C.2 Cas de Qualification : Maquette DIMPLE	52
III Méthodes de Perturbations Stochastiques	65
III.A Les Perturbations de Réactivité	67
III.A.1 Différence des Valeurs Propres	68
III.A.2 Méthodes « Perturbatives »	68
III.A.2.i Théorie « Exacte » des Perturbations et 1 ^{er} ordre	69
III.A.2.ii Introduire des Corrélations	70
III.B État de l'Art Monte Carlo	71
III.B.1 Méthode IFP	71
III.B.2 Méthode CLUTCH	72
III.B.3 Méthode des <i>Échantillons Corrélés</i>	73
III.B.4 Synthèse	75
III.C Approches Envisagées dans cette Thèse	76
III.C.1 Perturbations « Exactes » par Approche Ponctuel	77
III.C.2 Perturbations « Exactes » par Collision (CEP)	79
III.C.3 Perturbations « Exactes » par Corps Noir	79
III.C.3.i Perturbations de Réactivité (BBEP)	79
III.C.3.ii Extension aux Perturbations Généralisées « Exacte » (BBEGPT)	80
III.C.4 Synthèse des Approches Envisagées	82
III.D Implémentation des Perturbations Exactes par Collision (CEP)	83
III.D.1 Méthode & Choix d'implémentation	83
III.D.1.i Théorie Appliquée	83
III.D.1.ii Définir une Perturbation	86
III.D.1.iii Stockage des Collisions	88
III.D.1.iv Conversion de l'état d'un neutron dans l'état ② du réacteur vers l'état ①	88
III.D.1.v Perturbation des Fonctions de Renvoi	89
III.D.2 Optimisations et Options de Calculs	89
III.D.2.i Gestion des Architectures Parallèles	89
III.D.2.ii Biaisage	90
III.D.2.iii Multiplicités	91
III.D.2.iv Approximation Semi-Multigroupe	91
III.D.3 Vérification & Validation	91
III.D.3.i Perturbation de Concentrations	91
III.D.3.ii Perturbation d'une Section Efficace Microscopique	93
III.D.3.iii Perturbation de Température	94
III.D.3.iv Bibliothèques de Données Nucléaires	95
III.E Implémentation de la Méthode du Corps Noir (BBEP)	99
III.F Illustrations	100
III.F.1 Vidange d'un Plenum Sodium	100
III.F.2 Benchmark CHANDA / OCDE-BUC-Phase VIII	104
III.F.3 Interprétations EOLE	108
III.F.3.i Coefficient de Bore MISTRAL1 et MISTRAL2	108
III.F.3.ii Poids d'un Crayon UO ₂ Empoisonné à l'Erbium	109

IV Profils et Coefficients de Sensibilité	115
IV.A Expressions Calculées par TRIPOLI-4®	117
IV.B Illustrations	118
IV.B.1 Solutions Critiques de Plutonium	118
IV.B.2 Benchmark OCDE, UACSA, Phase III	121
IV.B.2.i Coefficients de Sensibilités Intégrés	122
IV.B.2.ii Profils de Sensibilités	122
IV.B.3 Capacités de Post-Traitement	130
IV.B.3.i Sensibilités en Fonction de l'Énergie Incidente et Sortante	130
IV.B.3.ii Sensibilités en Fonction de l'Énergie Incidente et de l'Angle de Déviation μ	131
IV.C Vers l'Évaluation des Incertitudes	133
V Paramètres Cinétiques	141
V.A Dérivation des Paramètres Cinétiques Effectifs	143
V.A.1 Équation Cinétique du Modèle Point Exact	144
V.A.2 Choix des Paramètres du Modèle	144
V.B Implémentation	145
V.B.1 Algorithme	146
V.B.2 Vérification	147
V.B.2.i Système INFINI à deux Groupes d'Énergie	148
V.B.2.ii Système FINI à deux Groupes d'Énergie	149
V.C Validation et Qualification	149
V.C.1 La Suite de Validation/Qualification des α_{Rossi}	149
V.C.2 Le Réacteur CALIBAN	150
V.C.3 Les Configurations MISTRAL 1 et 2	151
V.D Discussions	152
V.D.1 Sensibilités aux Données Nucléaires	152
V.D.2 Longueur du Cycle IFP	153
V.D.3 Corrélations Inter-Génération	154
VI Conclusions	161
VI.A Rappels et Conclusions des Chapitres	163
VI.A.1 Du Calcul des Sensibilités et des Incertitudes	163
VI.A.2 Du Calcul Exact des Perturbations de la Réactivité	163
VI.A.3 Du Calcul de Flux Adjoint ou d'Intégrales Pondérées par l'Adjoint	164
VI.A.4 Du Calcul des Paramètres Cinétiques	164
VI.B Perspectives	165
VI.B.1 Perspectives de Développements	165
VI.B.2 Perspectives d'Applications	165

Chapitre I

Introduction

Sommaire

I.A	Cadre de la Thèse	7
I.A.1	La Simulation Neutronique	7
I.A.2	Qualification et Retour sur les Données Nucléaires	11
I.B	Problématiques et Objectifs	15
I.B.1	Sensibilités & Perturbations → Incertitudes	15
I.B.2	Interprétation des Expériences MINERVE	16
I.B.3	Calculs de Référence de Paramètres Fonctions du Flux Adjoint	16
I.C	Plan de la Thèse	17

L'énergie nucléaire libérée par la fission du noyau des atomes possède bien des avantages et bien des inconvénients. Loin de nous l'idée d'en dresser ici la liste, défendons simplement le fait que pour poursuivre son exploitation, le monde du nucléaire doit s'adapter aux peurs et apprendre de ses erreurs afin de démontrer une sûreté irréprochable. C'est en cela que les actions entreprises simultanément par le Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA), Électricité de France (EDF) et AREVA, dans le développement, la simulation, ainsi que dans la qualification par l'expérience, constituent un gage de qualité et de fiabilité unique au monde.

La sûreté d'un réacteur repose sur l'expertise combinée de plusieurs « domaines scientifiques » comme la thermodynamique, la mécanique des fluides, la résistance des matériaux, l'étude du facteur humain, etc. Comme dans d'autres secteurs hautement technologiques, tout repose sur des compromis, à ceci près que la sûreté d'un réacteur fait appel à une science spécifique : la *neutronique*, ou l'étude du cheminement des neutrons dans la matière et de ses conséquences. Afin de prévoir le comportement neutronique d'un système nucléaire, les chercheurs et les industriels se basent sur des résultats fournis par des codes de calcul hautement qualifiés, c'est-à-dire des modèles théoriques qui permettent de prédire par le calcul (*i.e.* simuler) le transport des neutrons et les potentielles cascades de fissions qu'ils engendrent. L'essor de l'informatique a permis le développement rapide des codes et limité le recours à la coûteuse et difficile expérimentation nucléaire¹. Tout cela contribue à l'amélioration globale de la sûreté de nos installations présentes et futures.

Thématique de la Thèse : la création de nouvelles méthodes de calcul à destination des codes neutroniques pour des prédictions toujours plus justes et maîtrisées.

I.A Cadre de la Thèse

La neutronique est le cœur même des sciences nucléaires, c'est elle qui régule, via la prédiction du nombre de fissions par unité de temps, la puissance dégagée, la stabilité, et donc, en grande partie, le niveau de sûreté d'un système nucléaire. Bien que cette science soit relativement jeune, elle n'en demeure pas pour le moins mature : il reste peu à découvrir sur le cheminement des neutrons, les véritables enjeux du « nucléaire » sont désormais d'ordre calculatoire, expérimental ou bien concernent des domaines autres que la neutronique.

I.A.1 La Simulation Neutronique

La naissance de l'ère atomique [3] (1932, découverte du neutron par J. Chadwick [4], 1933, introduction du concept de la réaction en chaîne nucléaire par L. Szilárd [5], 1939-1942 début du projet Manhattan [6]) a coïncidé avec celle de l'informatique. C'est en partie sous l'impulsion des travaux sur la création et de l'amélioration de la bombe, que les capacités informatiques ont progressé (*cf.* Fig. I.1), d'abord par l'augmentation de la « vitesse » des processeurs puis, après les années 2001-2006², par la multiplication de leur « nombre » sur une même carte mère. La loi de Moore [7], exprimée en 1965 et vérifiée depuis 1973, prévoit un doublement de la puissance des ordinateurs tous les deux ans. Dans cette thèse, nous avons fait bon usage de la machine Curie, un supercalculateur hébergé par le CEA de Bruyère-le-Châtel, qui développe une puissance crête de 2 pétaflops, soit 2×10^{15} opérations par seconde. Par comparaison, la machine IAS de la Figure I.1 développait une puissance considérable d'environ 2×10^3 opérations par seconde.

¹Citons, par exemple, la signature internationale du traité d'interdiction complète des essais nucléaires (TICEN) en 1996 [1] qui entérine la fin des essais atomiques français et le lancement du programme *Simulation* [2] visant à développer les outils de simulation de la bombe afin d'en assurer sa pérennité. Ce traité n'a cependant pas été ratifié par tous les pays signataires.

²Arrivée du premier processeur à deux cœurs sur une même carte en 2001, l'IBM POWER4. En 2006, arrivée de l'Intel Core Duo avec une portée plus grand public.

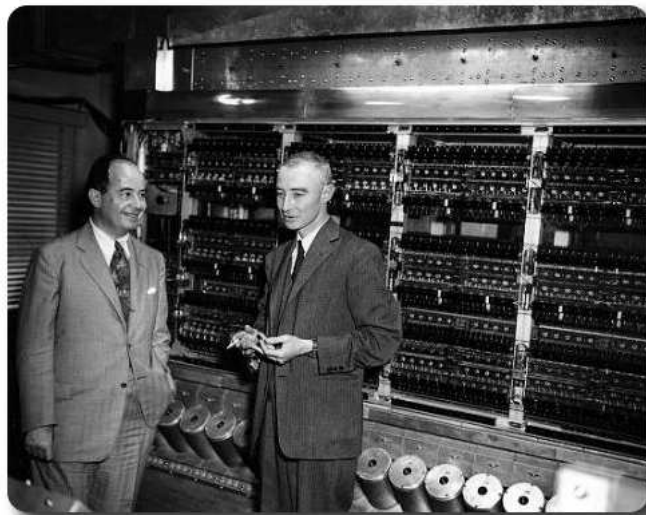


FIGURE I.1 – Le mathématicien John von Neumann (à gauche) et le Directeur de l’Institut d’Etudes Avancées (Institute for Advanced Study - IAS) et ancien directeur du programme Manhattan, J. Robert Oppenheimer devant l’ordinateur IAS, Princeton, New Jersey, 1945.

I.A.1.i Des Codes Déterministes et Probabilistes

Forts de cette capacité nouvelle et toujours en plein essor, les codes de calculs neutroniques, qui ont pour vocation de résoudre l’équation du transport des neutrons dans la matière (ou équation de Boltzmann³), ont suivi deux voies de développement :

- Les codes dits *déterministes*. Ces codes résolvent l’équation du transport sur un espace des phases discrétisé via des méthodes d’algèbre linéaire.
- Les codes dits *stochastiques* ou *Monte Carlo* [8]. Ces codes résolvent les équations de manière probabiliste et intégrale en simulant de nombreuses histoires possibles de neutrons depuis leur création par fission à leur disparition par absorption ou fuite. La relative simplicité des algorithmes et de leur implémentation « pas-à-pas » permet d’y introduire les toutes dernières avancées théoriques des modèles sans modifications profondes de la structure du code.

Chaque méthode possède ses atouts et ses défauts synthétisés pour plus de clarté dans le tableau I.1. Les atouts de l’une sont les faiblesses de l’autre. Les méthodes déterministes conservent un fort sens physique et permettent des analyses précises d’une multitude de paramètres en relativement peu de temps. A travail équivalent, les méthodes Monte Carlo requièrent généralement une plus grande puissance de calcul, mais fournissent des résultats dits de « référence » grâce à une résolution continue sur l’espace des phases des équations du transport et à l’utilisation de modèles plus proches de phénomènes physiques.

Bien souvent, ces deux types de codes n’en restent pas moins complémentaires. Les études actuelles, quand elles ne concernent pas des cœurs de très petites tailles, se basent souvent sur une approche mixte où les codes Monte Carlo très coûteux en ressources sont utilisés pour valider certaines étapes du calcul déterministe. Le choix d’utilisation d’un code déterministe ou Monte Carlo se fait en fonction de la précision recherchée, de l’application concernée, et doit être appuyé par un avis d’expert.

³L’équation de Boltzmann régit le comportement microscopique d’un gaz. Les neutrons évoluant dans un réacteur nucléaire suivent en partie les mêmes lois que celles suivies par les gaz, à ceci près qu’ils interagissent avec la matière de façon différente via des réactions plus complexes.

TABLEAU I.1 – Synthèse des Avantages et Inconvénients des Méthodes Déterministes et Monte Carlo.

Méthode	Avantages	Inconvénients
Déterministe	<ul style="list-style-type: none"> • Rapide • Résultats fins 	<ul style="list-style-type: none"> • Hypothèses fortes • Parallélisation difficile
Monte Carlo	<ul style="list-style-type: none"> • Précision de référence • Parallélisation 	<ul style="list-style-type: none"> • Lent • Résultats intégrés

I.A.1.ii Les Applications des Codes Neutroniques

Dans le domaine de la physique des réacteurs, l'application d'un code de calcul a plusieurs objectifs :

- *La conception de nouveaux réacteurs.* Concevoir de nouveaux réacteurs implique de devoir tester des nouvelles hypothèses, d'optimiser un ensemble de paramètres de performance et de sûreté, de prévoir des situations inédites d'accident, de modéliser l'ensemble des capteurs qui instrumenteront le cœur, de tester de nouvelles fonctionnalités, etc. Les codes de calculs utilisés doivent donc être à la fois rapides afin de tester un grand nombre de paramètres (utilisation des codes déterministes et de modèles simplifiés) et fiables, afin d'assurer, une fois les paramètres choisis, le meilleur résultat (codes Monte Carlo).
- *Le suivi des réacteurs en fonctionnement.* Afin d'assurer le bon fonctionnement des réacteurs, il est nécessaire de prévoir les nouveaux plans de chargement des assemblages combustible neufs⁴, de réaliser les études en lien avec les évolutions des exigences de sûreté. Citons comme exemple l'étude de la fluence⁵ cuve [9] qui est un facteur clef du prolongement de la vie de nos centrales. Pour chacune de ces actions, les simulations neutroniques permettent de sélectionner les meilleures solutions à mettre en œuvre.
- *L'étude du risque de criticité.* Lors de la manipulation, du transport ou de l'entreposage de matières nucléaires, il est primordial de s'assurer qu'aucune configuration, aucun agencement de matière fissile ne pourra mener à une divergence incontrôlée, c'est-à-dire à une réaction en chaîne non maîtrisée.
- *Les études de propagation des rayonnements.* Dans toute installation nucléaire, bien que la dose⁶ reçue par chaque travailleur soit contrôlée, il est primordial de la calculer au préalable afin d'en limiter la magnitude dès la conception. Ces études sont aussi nécessaires afin de démanteler une centrale dans les meilleures conditions de sécurité, ou bien encore lors de la mise en place de traitements médicaux par irradiation.

I.A.1.iii La Démarche de VVUQ

Les applications des codes neutroniques sont toutes des applications où de grandes incertitudes sont rarement permises, le premier objectif des codes est donc d'assurer une capacité prédictive. Il est alors primordiale de *Vérifier, Valider, Qualifier*, ainsi que de *Quantifier* les incertitudes introduites dans chaque nouvelle fonctionnalité du code. On parle alors de démarches de type VVUQ (*Verification, Validation and Uncertainty Quantification*).

⁴Un réacteur nucléaire de puissance change l'intégralité de son combustible en plusieurs fois. Lors de chaque rechargement, il est nécessaire de prévoir où placer chaque élément combustible (ancien ou nouveau) dans le cœur afin d'optimiser leur consommation jusqu'au prochain rechargement.

⁵La fluence est une mesure de l'irradiation d'un matériau. La résistance à l'effort d'un matériau évolue en fonction de la quantité d'irradiation reçue, ce qui peut devenir un facteur limitant la durée de vie d'une cuve, soumise à des variations de température et de pression intenses.

⁶La dose quantifie l'effet biologique de l'irradiation sur l'homme.

La démarche VVUQ n'a pas de définition unique bien établie et commune à tous les domaines scientifiques, même si de nombreux efforts ont été faits en ce sens ces dernières années. Ce sont surtout les termes, qui selon les disciplines ou cultures diffèrent légèrement. Nous nous efforcerons dans cette partie de présenter, au mieux, la démarche et les termes utilisés au CEA dans le domaine de la neutronique. La Figure I.2 reprend et adapte une figure de William L. Oberkampf [10] et expose les principales étapes de cette démarche :

- *La vérification* est le processus qui consiste à déterminer si et dans quelle mesure le code implémenté **représente** le modèle conceptuel intenté par le développeur. Cette étape sera, entre autre, réalisée par le biais de cas tests unitaires dont les solutions sont connues analytiquement ou par le biais d'un code étalon représentant le même modèle conceptuel.
- *La validation* « numérique » est le processus qui consiste à déterminer si et dans quelles mesures le code **reproduit** les résultats d'un code étalon. Il s'agit, par exemple, d'une comparaison entre les sorties d'un code déterministe et d'un code Monte Carlo ; ou bien d'une comparaison entre deux voies de calcul d'un même code, l'une utilisant un modèle simplifié et l'autre utilisant un modèle raffiné.
- *La qualification* (ou validation « physique ») est le processus qui consiste à déterminer si et dans quelles mesures le code **prédit** les résultats des expériences. On se limite en général aux cas spécifiques représentatifs des applications envisagées pour le code.

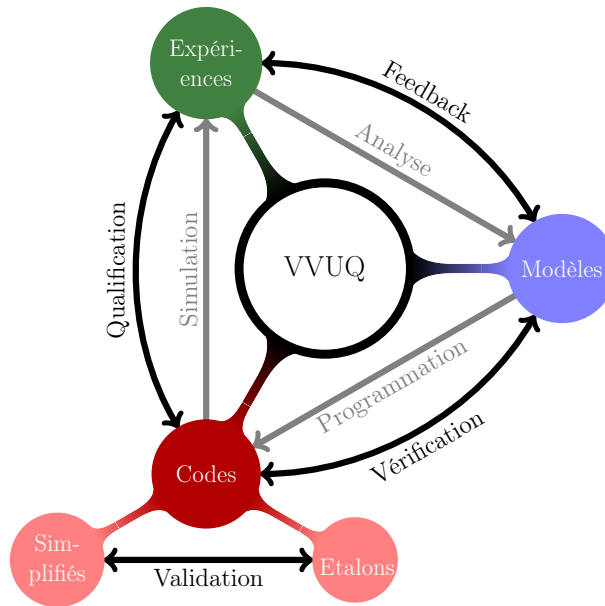


FIGURE I.2 – Phase de Modélisation, de Simulation et Rôle de la VVUQ.

Finalement, la *quantification des incertitudes* vient réaliser la synthèse des écarts calculés directement par le biais d'*expériences intégrales*, ou indirectement par la propagation exhaustive des différentes sources d'incertitudes liées aux données d'entrée de la simulation :

- Les erreurs de modélisations simplifiées de la physique (*e.g.* approximation de la diffusion, etc).
- Les erreurs dues au schémas numériques imparfaits (*e.g.* discrétisation de l'espace trop grossière, etc).

- Les erreurs de description du système (*e.g.* bilan en masse, tolérances de fabrication, etc).
- Les incertitudes des données de base du calcul (*e.g.* les données nucléaires).

L'aboutissement de ces quatre étapes (Vérification, Validation, Qualification et Quantification des Incertitudes) est généralement synthétisé dans un *formulaire de calcul* qui rassemble, pour un domaine d'application bien défini, des conseils généraux, les différents enchaînements et étapes de calculs préconisés, les différents paramètres de simulation, les biais et les incertitudes maximaux attendus.

Le fruit d'une telle démarche aboutit par exemple aux résultats suivants sur le calcul d'un k_{eff} ⁷ d'une configuration critique de cœur du programme AMMON⁸. Les incertitudes de description représentent environ 0.3 % [11] de la valeur, les incertitudes des données nucléaires environ 0.6 % [11], et les incertitudes des codes, dépendantes du type de code (déterministe ou Monte Carlo), jusqu'à 0.2 %. Où l'« expérimentateur » va chercher à réduire les incertitudes technologiques en améliorant son protocole, le neutronicien « simulateur » va, lui, tenter d'améliorer sa connaissance des données nucléaires ou améliorer la précision de son calcul.

I.A.2 Qualification et Retour sur les Données Nucléaires

Afin d'améliorer la précision cible de nos codes, il est nécessaire d'améliorer la connaissance des « données nucléaires » dont les incertitudes, une fois propagées, représentent une part non négligeable des incertitudes finales. Dans la partie qui va suivre nous expliquerons ce que sont les « données nucléaires », comment propager leurs incertitudes et comment il est possible de les améliorer.

I.A.2.i Les Données Nucléaires

Afin de simuler le déplacement des neutrons dans la matière et de résoudre l'équation du transport, les codes neutroniques ont besoin de connaître un ensemble de distributions de probabilité. Prenons l'exemple d'un neutron qui arrive à une certaine vitesse (*i.e.* une certaine énergie) sur une plaque en zirconium derrière laquelle se trouve un milieu enrichi en ^{235}U (fissile) ; pour trouver un des cheminement possibles du neutron, il nous faut connaître la probabilité que le neutron, d'énergie donnée, interagisse avec une certaine épaisseur de zirconium ; s'il change d'énergie suite à un choc, il nous faut connaître une nouvelle probabilité pour une autre énergie. S'il pénètre dans la zone combustible, il nous faut connaître les chances qu'il provoque la fission d'un atome d' ^{235}U , et ainsi de suite. Ces distributions de probabilités, appelées *sections efficaces*, sont inventoriées par isotope, par type de réaction, par énergie incidente, et rassemblées dans des bases de données. Elles constituent une partie de ce que l'on nomme les *données nucléaires*. La figure I.3 représente la section efficace de capture de l' ^{238}U , c'est-à-dire la probabilité qu'un neutron incident de telle énergie forme à la rencontre de l' ^{238}U un ^{239}U . Tout ce travail est rassemblé dans des bases de données, le plus souvent organisées en partenariats géographiques et déclinées dans un certains nombre de versions au fil des nouvelles mesures expérimentales et de l'amélioration des modèles. Citons par exemple les bibliothèques de l'OCDE JEFF (JEFF-3.1.1, JEFF-3.2, etc.) et américaine ENDF (ENDF/B-VII.0, etc).

En physique nucléaire comme dans toutes les sciences, les modèles sont rarement parfaitement prédictifs et ont besoin d'expériences pour nourrir leurs paramètres. L'obtention et la qualification des données nucléaires sont respectivement réalisées par deux types d'expériences :

- Les expériences dites *microscopiques* ou *différentielles*, qui s'attachent à mesurer une réaction, à une énergie donnée, pour un isotope. Elles sont utilisées afin de modéliser et d'alimenter les bibliothèques, c'est le travail des évaluateurs. L'évaluation est une combinaison savante entre interprétations d'expériences microscopiques et de modèles physiques. Une méthode statistique,

⁷Le k_{eff} est le facteur de multiplication effectif des neutrons dans système contenant de la matière fissile. Il représente le nombre moyen de neutrons issus d'une fission qui provoqueront à leur tour une fission.

⁸Le programme AMMON a pour objectif de qualifier par l'expérience le futur cœur du Réacteur de recherche Jules Horowitz (RJH) construit au CEA de Cadarache.

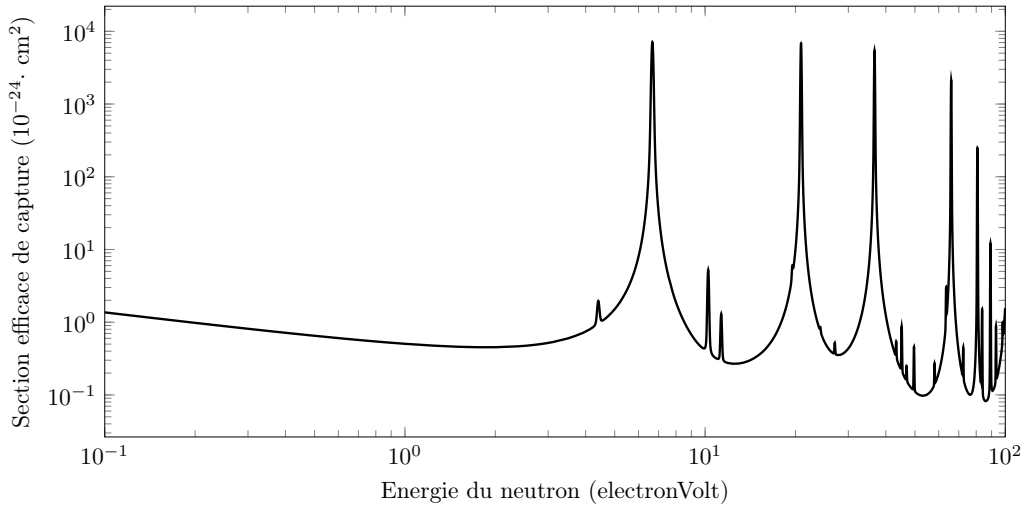


FIGURE I.3 – Section efficace microscopique de capture de l' ^{238}U en fonction de l'énergie du neutron incident (JEFF-3.2). Cette section efficace dite microscopique ne tient pas compte de la concentration des atomes dans la matière, N , en cm^{-3} ni de la distance parcourue dans la matière en cm . Sur un parcours infinitésimal dx , la probabilité de capture est égale à $N\sigma dx = \Sigma dx$ où Σ est appelée section macroscopique.

l'inférence bayésienne⁹, permet à partir d'une combinaison d'expériences microscopiques et de modèles physiques, de décrire chaque donnée nucléaire par une valeur et une incertitude associée. Quand cela est possible, des matrices de corrélations sont associées aux données nucléaires afin de prendre en compte les liens entre les différentes valeurs¹⁰. Notons que l'évaluation des données nucléaires et la qualification des codes sont les deux principaux cœurs de métiers du laboratoire d'accueil de cette thèse : le Laboratoire d'Études de Physique (LEPh) du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle (SPRC), appartenant au Département d'Études des Réacteurs (DER), lui même inclus dans la Division de l'Énergie Nucléaire (DEN).

- Les expériences dites *intégrales*, où sont parallèlement mesurés et calculés des paramètres globaux, par exemple une section efficace intégrée sur l'énergie (*e.g.* mesure d'irradiation), ou bien une grandeur intégrée sur tout un réacteur comme le k_{eff} . Ces expériences ont pour principaux objectifs de qualifier le travail des évaluateurs et de s'assurer de la cohérence du schéma de calcul. Leur retour a vocation à être réinjecté dans l'évaluation de base elle-même [13], afin de parfaire la capacité prédictive du couple code/données nucléaires pour une application spécifique. Les études permettant de démarrer des réacteurs innovants (*e.g.* RJH) s'appuient toujours sur des maquettes (*e.g.* AMMON) représentatives¹¹ de leur futur cœur et dont les mesures qualifient les biais attendus.

Lors de l'interprétation des expériences intégrales, le code fournit la *valeur* d'un paramètre qui doit être compatible avec sa *mesure*. Cette notion de compatibilité, essentielle à la validation des codes et de leur schéma de calcul, est plus formellement obtenue par la comparaison des valeurs et de leurs incertitudes. Voyons comment calculer une incertitude associée aux données nucléaires.

⁹L'inférence bayésienne [12] est une méthode permettant de déduire la probabilité d'un évènement à partir de celles d'autres évènements déjà évalués.

¹⁰La corrélation indique comment la variation de telle section efficace à telle énergie, affecte telle autre section à telle autre énergie. Exemple : le niveau d'une section A est mesuré relativement à celui de la section de fission de l' ^{235}U . Le niveau de la section A sera donc disponible dans l'évaluation mais entièrement corrélé à celui de la section de fission de l' ^{235}U : si le niveau de la section de fission de l' ^{235}U est rehaussé dans une nouvelle évaluation, le niveau de la section A le sera également d'un même facteur.

¹¹Pour déterminer à quel point une expérience se rapproche d'un hypothétique futur réacteur, la neutronique a introduit le concept formalisé de représentativité [14] qui permet de transposer les résultats d'une expérience au projet de réacteur réel.

I.A.2.ii La Propagation des Incertitudes des Données Nucléaires

L'objectif de ce paragraphe n'est pas la rigueur mathématique mais une illustration générale des principes employés en neutronique.

Il est nécessaire de propager les incertitudes des données nucléaires afin d'évaluer l'incertitude finale du calcul (*i.e.* un intervalle de confiance des résultats) de manière à ne pas excéder les limites de sûreté de notre système. Il s'agit de quantifier l'effet d'une potentielle erreur dans les données nucléaires (ou dans les autres données d'entrée) sur les paramètres physiques calculés par le code. D'un point de vue macroscopique, deux méthodes sont employées en neutronique :

- La méthode la plus ancienne et la plus répandue consiste à réaliser un développement de Taylor au premier ordre de la grandeur physique d'intérêt $G(X)$ au voisinage de la valeur des paramètres X dont elle dépend. En supposant un unique paramètre X , l'incertitude sur $G(X)$ en $X = x_0$, $\sigma(G)|_{X=x_0}$, peut s'exprimer comme :

$$\sigma(G)|_{X=x_0} \sim \left[\sigma(X) \frac{\partial G}{\partial X} \right]_{X=x_0} \quad (\text{I.1})$$

où $\sigma(X)|_{X=x_0}$ est l'incertitude du paramètre X en x_0 et $S_{G/X} = \frac{\partial G}{\partial X}|_{X=x_0}$ est la sensibilité de la grandeur G au paramètre X en x_0 . Lorsque les incertitudes sur plusieurs paramètres X_i sont à propager, l'expression fait appel à la formule dite du « sandwich » prenant en compte les matrices de corrélation entre paramètres X_i . Cette formule suppose une quasi-linéarité des sensibilités $S_{G/X_i}|_{X_i=x_i}$ autour des valeurs des paramètres x_i .

En neutronique, le calcul des sensibilités S_{G/X_i} possède une expression exacte nécessitant le calcul préalable de plusieurs grandeurs, dont notamment la solution de l'équation *adjointe*¹² du transport des neutrons : le flux adjoint. L'hypothèse des petites variations est souvent vérifiée, puisque les incertitudes des sections efficaces se limitent en général à quelques pourcents de la valeur des sections.

- Les méthodes d'échantillonnage Monte Carlo, permettent de s'affranchir des hypothèses restrictives du développement de Taylor. Pour se faire, on calcule un grand nombre de fois la fonction :

$$(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) \rightarrow G(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) \quad (\text{I.2})$$

en choisissant l'ensemble des paramètres perturbés $(x'_1, x'_2, \dots, x'_n)$ autour de leur référence (x_1, x_2, \dots, x_n) , en accord avec leurs corrélations et leur distribution de probabilité, dans le but d'obtenir la distribution de probabilité des réponses $G(x'_1, x'_2, \dots, x'_n)$. De cette distribution de probabilité, il est possible d'extraire les intervalles de confiance recherchés.

Il existe d'autres méthodes plus marginales, ou récemment introduites comme, par exemple, des études par polynômes de chaos [15]. Encore peu utilisées en neutronique, ces méthodes se basent sur la construction de méta-modèles, c'est-à-dire de fonctions simplifiées permettant d'approcher la fonction G localement et qui donnent un accès quasi-analytique aux incertitudes.

I.A.2.iii Le Retour des Expériences Intégrales sur les Données Nucléaires

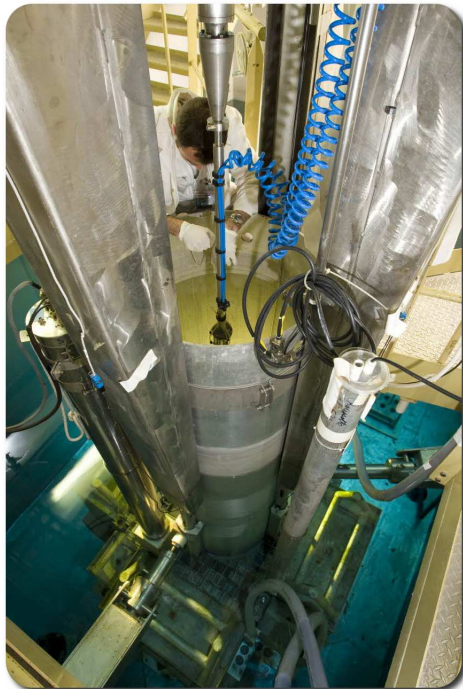
Dans le cas où l'expérience et le calcul ne sont pas « compatibles », ou dans l'objectif de diminuer l'incertitude associée aux données nucléaires, il est possible d'intégrer un certain retour d'une mesure intégrale sur les sections efficaces. La différence calcul-mesure peut permettre la réduction des incertitudes, voir une réévaluation du niveau d'une section. A cette fin, la grandeur intégrale calculée et mesurée doit être très sensible à une donnée nucléaire en particulier. C'est, entre autre, l'objectif des

¹²L'équation adjointe du transport sera décrite en détail dans le chapitre II.

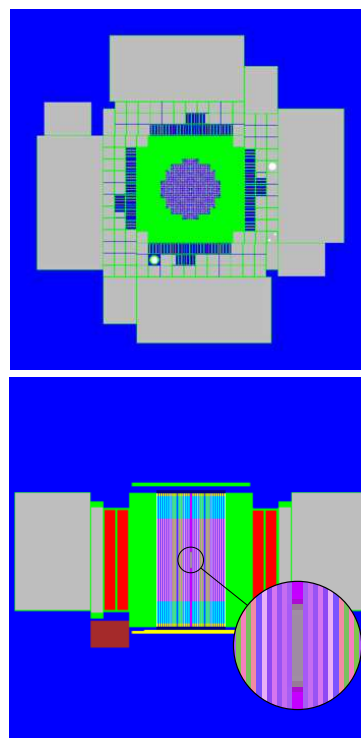
expériences d'oscillations réalisées dans le réacteur MINERVE. Nous porterons une attention particulière au réacteur MINERVE qui est un réacteur de recherche implanté sur le centre CEA de Cadarache (Sud-Est de la France) d'une puissance thermique faible (100 W : une ampoule!); de type piscine, il a la particularité d'avoir été transféré en 1977 du centre de Fontenay-aux-Roses (région parisienne) où il avait été initialement construit en 1958. MINERVE est un réacteur essentiellement dédié à la mesure de l'impact d'un petit échantillon de matériau quelconque sur l'ensemble du réacteur. Cet échantillon est pour cela alternativement extrait puis réinséré au centre du cœur à l'aide d'une canne motorisée (cf. Fig. I.4) pendant que la réponse du réacteur à cette perturbation est mesurée. Cette mesure est directement représentative du *poids en réactivité* de cet échantillon. Ce *poids en réactivité* est l'effet que le petit échantillon va avoir sur la multiplication moyenne des neutrons par fission dans le cœur. Typiquement ces effets mesurés sont inférieurs à 10 « pour cent mille » (pcm), soit une variation mesurée inférieure à 0.01 % de sa valeur nominale. La précision expérimentale sur la variation est ahurissante : 0.00001 % de la valeur nominale! Cette variation peut être quasi-entièrement attribuée à l'échantillon que l'on doit choisir extrêmement pur de manière à isoler l'effet d'un isotope spécifique. De plus, la versatilité du cœur de MINERVE, permet de plonger les échantillons au cœur de différentes configurations de réacteurs de manière à les soumettre à des neutrons d'énergies différentes (*i.e.* de spectres différents) et d'obtenir des retours complémentaires.

Supposons qu'un code de référence dûment validé soit utilisé pour calculer ce poids en réactivité, la différence entre la valeur calculée et la valeur expérimentale peut être entièrement imputée à la méconnaissance des sections efficaces dudit isotope (aux incertitudes technologiques et de mesures près). Elle peut également venir confirmer une bonne évaluation et réduire les incertitudes.

L'analyse des programmes expérimentaux réalisés dans MINERVE constitue à ce titre une manne précieuse et indispensable à l'amélioration continue des données nucléaires et au démarrage des futurs réacteurs.



(a) Photographie du cœur de MINERVE, on peut voir la canne d'oscillations au-dessus du cœur, qui insère et extrait alternativement les différents échantillons au centre du cœur.



(b) Modélisation 3D du cœur dans le code TRIPOLI-4[®]. En haut, coupe horizontale, en bas, coupe verticale.

FIGURE I.4 – Réacteur expérimental MINERVE.

I.B Problématiques et Objectifs

La première partie de ce chapitre nous a permis de présenter le contexte de cette thèse, afin d'en introduire maintenant les grandes problématiques.

I.B.1 Sensibilités & Perturbations → Incertitudes

Comme nous l'avons évoqué, la capacité de prédiction et de maîtrise des biais de l'ensemble code-données nucléaires est la raison d'être de la procédure de **VVUQ**. Afin de réaliser la dernière étape de ce procédé, il faut propager les incertitudes des données d'entrée d'un problème aux paramètres calculés par le code, notamment au facteur de multiplication moyen des neutrons dans le cœur, k_{eff} , qui régit la dynamique de la réaction en chaîne. L'une des méthodes les plus éprouvées nécessite le calcul des sensibilités du k_{eff} aux différents paramètres de modélisation, ce qui nous amène à notre premier constat :

Problématique 1 : Le code Monte Carlo du transport des neutrons TRIPOLI-4[®], développé au CEA, ne permet pas le calcul des sensibilités du facteur de multiplication moyen des neutrons, k_{eff} , aux nombreuses données nucléaires, ou à d'autres types de perturbations, de manière exacte et aisée pour l'utilisateur.

En effet, il paraît primordial qu'un code de référence Monte Carlo puisse calculer ces sensibilités, pour, au mieux, valider la démarche approchée déterministe, au pire, permettre un calcul couteux mais exact de cette réponse du k_{eff} . Il se trouve par ailleurs que l'immense majorité des calculs déterministes de la sensibilité du k_{eff} à d'autres grandeurs est réalisée via des modèles 2D, voire 1D, et présentent de grandes disparités de résultats. Nous nous proposons dans cette thèse d'implémenter dans le code TRIPOLI-4[®] des méthodes permettant le calcul exact de telles sensibilités :

- Aux différentes sections de réactions induites par neutrons (Capture, Fission, Élastique, Inélastique, $N \times N$ ¹³).
- Aux lois de renvoi des réactions,
 - de fissions (*i.e.* spectre de fission¹⁴),
 - des réactions élastiques (*i.e.* à basses énergies, sections de type $S(\alpha, \beta)$ qui prennent en compte la communication d'énergie entre le neutron et le milieu qui l'entoure; à hautes énergies, les sections doublement différentielles qui traduisent le caractère anisotrope des collisions).,
 - des réactions inélastiques (*i.e.* sections doublement différentielles).
- A la multiplicité moyenne $\bar{\nu}$, des neutrons émis par fission.

Afin de répondre entièrement aux besoins, ces sensibilités devront pouvoir être intégrées en angle et en énergie sur l'ensemble du réacteur, ou disponibles par milieu, par groupe d'énergie incidente, sortante et par angle de déviation. Tout cela après un enchaînement limité et simple de calculs. Pour ce faire, nous nous sommes, en partie, inspirés des travaux qui ont été entrepris dans des codes concurrents antérieurement à ce travail de thèse (principalement le code Monte Carlo MCNP [16] et la suite SCALE [17].

¹³Lorsqu'un neutron rencontre un atome, celui-ci peut induire plusieurs types de réactions : de manière simplifiée on distingue la *capture* qui correspond à l'absorption du neutron par l'atome; la *fission*, qui correspond à une absorption qui va induire la fission de l'atome; la *diffusion élastique*, qui correspond ni plus ni moins à un rebond élastique du neutron sur l'atome; la *diffusion inélastique*, pour laquelle, à la différence de la diffusion élastique, le neutron repart avec une perte d'énergie; et les réactions (n, xn) , qui correspondent à l'absorption d'un neutron, suivie d'une ré-émission de x neutrons.

¹⁴Les spectres de fissions correspondent aux densités de probabilités d'émission des neutrons par fission en fonction de l'énergie sortante des neutrons de fission; ils sont tabulés en fonction de l'énergie du neutron induisant la fission.

I.B.2 Interprétation des Expériences MINERVE

Le laboratoire d'accueil de cette thèse est en charge de l'interprétation des expériences passées et futures dans le réacteur MINERVE. Il se trouve que le calcul de référence Monte Carlo de la perturbation de réactivité engendrée par l'oscillation d'un petit échantillon de matériau pur au centre du cœur n'est pas envisageable, dans un temps restreint, pour toute une série de mesures. Bien que l'actuel formulaire de calcul des ces expériences, le formulaire PIMS [18], mis en place peu avant le début de cette thèse, constitue une référence déterministe, son besoin en validation et en qualification implique qu'il ne peut fournir un retour à toute épreuve (notamment en raison du caractère multigroupe et des simplifications géométriques mises en œuvre sur les données nucléaires), comme le pourrait un code de référence Monte Carlo.

Problématique 2 : Aucun code Monte Carlo n'est en mesure de réaliser un calcul de référence sous des contraintes de temps raisonnables, des expériences d'oscillations dans MINERVE. Ces expériences se caractérisent par une forte perturbation locale du flux de neutrons mais par une faible perturbation globale de réactivité.

Le caractère spécifique des perturbations de réactivité mesurées dans le réacteur MINERVE, empêchait jusqu'à présent la réalisation d'un calcul de référence Monte Carlo. Afin de répondre à cette problématique nous introduirons, pour la première fois dans un code Monte Carlo, une méthode capable de calculer une perturbation en réactivité de manière exacte, quelle qu'elle soit. Notamment, il est nécessaire que la perturbation soit calculée correctement :

- Quelle que soit l'amplitude globale de la variation de réactivité.
- Quelle que soit l'amplitude locale de la variation du flux.

De façon similaire au calcul des sensibilités, attribuer la perturbation aux différents isotopes et à leur différentes réactions est crucial dans l'interprétation des expériences en vue d'un retour sur les données nucléaires. Bien qu'il soit possible de s'inspirer des méthodes approchées développées pour le calcul des sensibilités dans les autres codes Monte Carlo, le calcul exact des perturbations impose des contraintes supplémentaires qui n'ont pour l'instant pas été explorées par la communauté scientifique.

I.B.3 Calculs de Référence de Paramètres Fonctions du Flux Adjoint

I.B.3.i Calcul du Flux Adjoint

Les sensibilités, comme les perturbations de réactivité, sont la résultante d'un calcul où intervient le flux adjoint des neutrons – grandeur équivalente à l'importance d'un neutron, que nous serons amenés à définir précisément dans notre prochain chapitre (*cf.* Chap. II). Ainsi, afin de calculer des sensibilités et des perturbations de réactivité, il est nécessaire de répondre à une problématique intermédiaire :

Problématique 3 : Aucun code de production Monte Carlo n'est en mesure de réaliser un calcul de flux adjoint de référence.

Dans cette thèse, nous implémenterons et appliquerons un moyen d'obtenir le flux adjoint en n'importe quel point d'un réacteur. Bien que la théorie soit antérieure à cette thèse, elle n'a, pour l'instant, jamais été appliquée de manière définitive dans un code de production Monte Carlo.

I.B.3.ii Calcul des Paramètres Cinétiques

L'évolution cinétique (*i.e.* comportement du réacteur en fonction du temps, à faible puissance) de la puissance d'un cœur, vis-à-vis des perturbations de réactivité appliquées pour sa conduite (*e.g.* introduction ou extraction d'absorbant, etc.), se résume grossièrement à l'étude (et/ou à la mesure) de deux paramètres moyens :

- La fraction moyenne β de neutrons retardés.
- Le temps de vie moyen Λ des neutrons.

Lorsque ces paramètres sont dits *effectifs*, les moyennes β et Λ sont pondérées par le flux adjoint. Les expressions de β_{eff} et de Λ_{eff} sont alors très proches des expressions des sensibilités que nous développerons pour répondre à la *Problématique 1* ; il nous a donc semblé opportun de répondre également à la problématique suivante :

Problématique 4 : Le code Monte Carlo TRIPOLI-4[®] n'est pas en mesure de calculer les paramètres cinétiques β et Λ dans leur forme pondérée par le flux adjoint (dite effective) soit β_{eff} et Λ_{eff} .

A cette fin, nous reprendrons et améliorerons la méthode récemment implémentée dans le code MCNP.

I.C Plan de la Thèse

Ce manuscrit répondra aux quatre précédentes problématiques dans l'ordre suivant :

- Un premier grand chapitre (*cf.* Chap. II) sera consacré à la définition et au calcul du flux adjoint dans un code Monte Carlo. Le calcul du flux adjoint constitue un pré-requis à l'implémentation et à la validation des méthodes de sensibilités ou des perturbations. A l'aide de cas d'illustratifs simples, nous démontrerons les capacités et la qualité des développements réalisés dans le code TRIPOLI-4[®]. Ce chapitre aboutit à la mise en place de la méthode de calcul de l'Importance d'une Source Arbitraire (*Arbitrary IFP-Weighted Source AIWS*).
- Dans un second chapitre (*cf.* Chap. III), nous exposerons les différentes méthodes permettant le calcul de perturbations de manière exacte dans l'objectif de répondre aux besoins des interprétations d'expériences réalisées dans le réacteur MINERVE, ou plus généralement des faibles perturbations « localement » fortes de la réactivité¹⁵. Nous introduirons deux méthodes novatrices, la Méthode Exacte des Perturbations par Collision (*Collisions-based Exact Perturbations, CEP*) et la Méthode des Perturbations Exacte par Corps Noir (*Black Body Exact Perturbations, BBEP*). Elles seront appliquées sur des perturbations de natures différentes et notamment sur des benchmarks représentatifs des effets à calculer dans le réacteur MINERVE.
- La Méthode Exacte des Perturbations par Collision (*CEP*) sera ensuite appliquée (*cf.* Chap. IV) afin de calculer des sensibilités du k_{eff} , c'est-à-dire des perturbations infinitésimales des données nucléaires. Ces sensibilités de référence peuvent alors être propagées afin d'obtenir l'incertitude des données nucléaires sur le facteur de multiplication des neutrons.
- Enfin, dans un dernier chapitre (*cf.* Chap. V), nous reprendrons et améliorerons la Méthode IFP (*cf.* Sec. III.B.1) afin de calculer des paramètres cinétiques de référence. Ces paramètres cinétiques représentent des quantités intégrales déterminant presque à elles seules l'évolution de la puissance d'un réacteur dans une phase transitoire de la puissance.

¹⁵Par abus de langage on parle de perturbations « localement » fortes de la réactivité, mais il doit être entendu que l'on désigne sous ce terme des perturbations de réactivité très faibles, engendrées par des variations locales de flux très fortes.

Les développements informatiques de ces quatre méthodes dans TRIPOLI-4[®] (version 4.9 de développement) représentent une part non-négligeable du temps total consacré à cette thèse. Dans ce manuscrit, nous ne soulèverons qu'en de rares occasions les problématiques rencontrées lors de l'implémentation C++ et de l'optimisation des différentes méthodes. Ces aspects ont nécessité à plusieurs reprises une refonte totale de la programmation pour aboutir à un tout cohérent, optimisé et évolutif.

Bibliographie

- [1] NATIONS UNIS. *Lettre datée du 22 août 1996 adressée au Secrétaire général par le Représentant permanent de l'Australie auprès de l'Organisation des Nations Unies*. http://www.un.org/fr/documents/view_doc.asp?symbol=A/50/1027. 1996 (cf. p. 7).
- [2] D. BESNARD. *Le programme SIMULATION : la garantie des armes sans essais nucléaires*. <http://www.cea.fr/content/download/2960/13861/file/054a63Besnard.pdf>. 2002 (cf. p. 7).
- [3] P. REUSS. *L'épopée de l'énergie nucléaire*. EDP SCIENCES, 2007 (cf. p. 7).
- [4] J. CHADWICK. "Possible Existence of a Neutron". In : *Nature* (1932) (cf. p. 7).
- [5] L. SZILARD. *Provisional Specification No. 7840 1934. Improvements in or relating to the Transmutation of Chemical Elements*. 1935 (cf. p. 7).
- [6] R. RHODES. *The Making of the Atomic Bomb : 25th Anniversary Edition*. Simon & Schuster, 2012 (cf. p. 7).
- [7] G. E. MOORE. "Cramming more components onto integrated circuits". In : *Electronics* 38.8 (1965) (cf. p. 7).
- [8] R. ECKHART. "Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo Method". In : *Los Alamos Science, Special Issue* (1987) (cf. p. 8).
- [9] L. BERGE. "Contribution à la Modélisation des Spectres de Neutrons Prompts de Fission. Propagation d'Incertitude à un Calcul de Fluence Cuve". Thèse de doct. Université de Grenoble, 2015 (cf. p. 9).
- [10] W. L. OBERKAMPF, T. G. TRUCANO et C. HIRSCH. "Verification, Validation, and Predictive Capability in Computational Engineering and Physics". In : *Foundations for Verification and Validation in the 21st Century Workshop*. 2002 (cf. p. 10).
- [11] O. LERAY et al. "Sensitivity and Uncertainty Analysis applied to the JHR Reactivity Prediction". In : *PHYSOR 2012, Knoxville, USA*. 2012 (cf. p. 11).
- [12] B. LECOUTRE. *Et si vous étiez un bayésien "qui s'ignore" ?* <http://www.modulad.fr/archives/numero-18/lecoutre-18/etsivousetiez.pdf>, Modulad, 18, 81-87. 1997 (cf. p. 12).
- [13] P. ARCHIER. "Contribution à l'amélioration des données nucléaires neutroniques du sodium pour le calcul des réacteurs de génération IV". Thèse de doct. Université de Grenoble, 2006 (cf. p. 12).
- [14] N. D. SANTOS. "Optimisation de l'Approche de Représentativité et de Transposition pour la Conception Neutronique de Programme Expérimentaux dans les Maquettes Critiques". Thèse de doct. Université de Grenoble, 2013 (cf. p. 12).
- [15] N. WIENER. "The Homogeneous Chaos". In : *American Journal Of Mathematics* 60.4 (1938) (cf. p. 13).
- [16] J. F. BRIESMEISTER. "MCNP : A General Monte Carlo N-Particle Transport Code". In : (1993) (cf. p. 15).
- [17] S. M. BROWMAN. "SCALE 6 : Comprehensive Nuclear Safety Analysis Code System". English. In : *Nuclear Science And Technology* 172.2 (2011), p. 126–148 (cf. p. 15).

- [18] A. GRUEL. “Développement et Validation de schémas de calcul dédiés à l’interprétation des mesures par oscillation pour l’amélioration des données nucléaires”. Thèse de doct. Université de Grenoble, 2006 (cf. p. [16](#)).

Chapitre II

Flux Adjoint Monte Carlo

Sommaire

II.A Le Flux Adjoint	23
II.A.1 Définitions	24
II.A.2 État de l'Art des Méthodes Monte Carlo	27
II.B Implémentation dans TRIPOLI-4®	34
II.B.1 Méthode AIWS	34
II.B.2 Choix des Paramètres de Simulation	37
II.B.3 Vérification & Validation	43
II.C Illustrations – Qualification	48
II.C.1 Illustration : Validation des Codes Déterministes, Cellule UOX	48
II.C.2 Cas de Qualification : Maquette DIMPLE	52

Dans tout ce document, et sauf précisions apportées par le contexte, le terme « flux adjoint » désigne le mode fondamental solution de l'équation « homogène » adjointe du transport, dite aussi équation « critique » adjointe. Les solutions adjointes des problèmes de type source/détecteur, correspondant à l'équation « hétérogène », dans les milieux non ou faiblement multiplicateurs ne seront que brièvement discutées dans cette thèse. Le calcul d'un tel flux adjoint peut cependant être réalisé par TRIPOLI-4[®] au moyen des bandes de Green [1], dont le développement est antérieur à ces travaux. De même, le terme « génération » fera toujours référence aux différentes itérations du procédé des itérations de la puissance.

La possibilité pour un code de transport de résoudre le problème adjoint de l'équation de Boltzmann se révèle être une fonctionnalité quasi-indispensable à l'interprétation approfondie du comportement d'un système neutronique. En effet, la connaissance du couple de flux direct et adjoint permet le calcul à coût réduit de nombreuses solutions approchées (notamment le modèle ponctuel de la cinétique des réacteurs [2, 3] (cf. Chap. V)), l'application de la théorie des perturbations [4] (cf. Chap. III) ou bien encore les méthodes variationnelles [5]). Or à l'heure actuelle, il n'existe aucun code Monte Carlo qui soit en mesure de calculer un flux adjoint continu en énergie¹, et qui soit donc en mesure de fournir une référence à la validation des codes déterministes. Le présent chapitre comporte trois objectifs principaux :

- Introduire la notion de flux adjoint, et dresser l'état de l'art des méthodes existantes pour calculer cette grandeur en Monte Carlo (cf. Sec. II.A).
- Présenter les développements réalisés dans cette thèse afin d'introduire une méthode de calcul du flux adjoint continu sur l'espace des phases dans le code Monte Carlo du transport des neutrons du CEA TRIPOLI-4[®] (cf. Sec. II.B).
- Présenter quelques illustrations et démontrer l'intérêt du calcul de flux adjoint via une méthode de référence Monte Carlo (cf. Sec. II.C).

II.A Le Flux Adjoint

Dans cette section seront avancées deux interprétations du « flux adjoint », l'une à dominance mathématique, et l'autre s'appuyant sur la notion intuitive d'importance. Avant d'introduire ces deux définitions, il est nécessaire de rappeler l'équation aux valeurs propres régissant le transport **DIRECT** [6] (par opposition au transport **ADJOINT** dont traite ce chapitre) des neutrons dans un réacteur critique (*i.e.* l'équation homogène), sous la forme d'un bilan synthétique des neutrons sur l'espace des phases à 6 dimensions, \mathcal{E} , constitué des 3 dimensions spatiales \vec{r} , de l'énergie E et d'une direction $\hat{\Omega}$ (2 dimensions) tels que :

$$\forall \epsilon \in \mathcal{E}, \quad \underbrace{[\mathcal{K}\Phi](\epsilon)}_{\text{Disparitions}} = \lambda \underbrace{[\mathcal{P}\Phi](\epsilon)}_{\text{Productions}} \quad (\text{II.1})$$

Transport Direct

- Φ est le flux de neutrons, et $\lambda = \frac{1}{k}$ est l'inverse du coefficient de multiplication des neutrons par fission. Notons qu'il existe généralement un ensemble non fini de couples valeur propre/vecteur propre solutions de l'équation [7], mais que le flux de neutrons fondamental Φ doit être identifié à l'unique mode positif et non nul, lié à la plus petite des valeurs propres, soit le plus grand des k .
- \mathcal{P} est l'opérateur s'appliquant au flux de neutrons $\Phi(\epsilon)$, tel que $[\mathcal{P}\Phi](\epsilon)$ représente les neutrons émis en ϵ par la fission des neutrons présents en ϵ' . Cet opérateur dépend de la géométrie, des

¹Certains codes (MCNP, SCALE, SERPENT) accèdent néanmoins à des quantités intégrées pondérées par l'adjoint du type $\langle \Phi^\dagger A \Phi \rangle$ où Φ et Φ^\dagger sont respectivement le flux direct et le flux adjoint. Mais ils ne peuvent pas, par exemple, remonter strictement au flux adjoint scalaire car il leur est impossible de déconvoluer leur produit. Une explication plus précise sera donnée Section II.B.1.i.

isotopes fissiles présents dans les différents milieux ainsi que de leur capacité à produire des neutrons par fission.

$$\mathcal{P}(\epsilon' \rightarrow \epsilon)\Phi(\epsilon') = \nu(\epsilon')\chi_f(\epsilon' \rightarrow \epsilon)\Sigma_f(\epsilon')\Phi(\epsilon') \quad (\text{II.2})$$

$$[\mathcal{P}\Phi](\epsilon) = \int_{\epsilon'} \mathcal{P}(\epsilon' \rightarrow \epsilon)\Phi(\epsilon')d\epsilon' \quad (\text{II.3})$$

Avec, $\nu(\epsilon')$, le nombre moyen de neutrons émis par une fission induite par un neutron d'état ϵ' , $\chi_f(\epsilon' \rightarrow \epsilon)$, le spectre de fission, qui correspond à la densité de probabilité d'émission d'un neutron dans l'état ϵ , suite à la fission d'un isotope induite par un neutron d'état ϵ' , et, $\Sigma_f(\epsilon')$ la section efficace de fission induite par un neutron dans l'état ϵ' .

- \mathcal{K} est l'opérateur s'appliquant au flux de neutrons $\Phi(\epsilon)$, tel que $[\mathcal{K}\Phi](\epsilon)$ représente les neutrons en ϵ perdus par le système par fuite ou par absorption. Cet opérateur dépend des isotopes absorbants, diffusants, et de la géométrie du problème qui affecte les fuites de neutrons.

$$[\mathcal{K}\Phi](\epsilon) = \underbrace{\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\Phi(\epsilon)}_{\text{Fuites}} + \underbrace{\Sigma_t(\epsilon)\Phi(\epsilon)}_{\text{Absorptions \& Diffusions perdues}} - \underbrace{\int_{\epsilon'} \Sigma_s(\epsilon' \rightarrow \epsilon)\Phi(\epsilon')d\epsilon'}_{\text{Diffusions gagnées}} \quad (\text{II.4})$$

Avec $\Sigma_t(\epsilon)$ la section efficace totale du milieu pour un neutron dans l'état ϵ , et $\Sigma_s(\epsilon' \rightarrow \epsilon)$ la probabilité pour un neutron dans l'état ϵ' d'être diffusé dans l'état ϵ .

L'équation (II.1) est en fait un système qui inclut, implicitement, un ensemble de conditions aux limites que détaille D. G. Cacuci [8]. Pour les codes Monte Carlo comme pour les codes déterministes, la résolution de cette équation est généralement soumise au procédé des *itérations de la puissance* [9] de manière à en extraire la valeur propre et le flux fondamental. Ce procédé consiste à supposer une première distribution des sources de fissions, S_0 , puis à résoudre l'équation hétérogène $\mathcal{K}\Phi_1 = S_0$ pour obtenir successivement le flux Φ_1 puis le terme de production par fission $\mathcal{P}\Phi_1$ qui deviendra la source de l'itération suivante S_1 , etc. Le ratio des disparitions sur les productions de neutrons s'exprime alors comme $\lambda_1 = \frac{S_0}{\mathcal{P}\Phi_1}$. Ce procédé itératif conduit à l'isolement de la plus grande des valeurs propres et de son mode propre associé²,

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \lambda_g = \lambda_{\text{eff}} = \frac{1}{k_{\text{eff}}}, \quad (\text{II.5})$$

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \Phi_g = \Phi. \quad (\text{II.6})$$

II.A.1 Définitions

Nous venons de définir l'équation du transport direct des neutrons qui traduit le transport « naturel » des neutrons et permet de calculer, *in fine*, le flux de neutrons. Le flux de neutrons est directement lié à la quantité de neutrons en déplacement en chaque point de l'espace des phases dans un réacteur. Présentons maintenant son pendant adjoint.

²On admet généralement que l'équation du transport neutronique satisfait aux conditions nécessaires [10], bien que cela n'ait été prouvé que sous des hypothèses restrictives [11].

II.A.1.i Définition « Mathématique »

Opérateur Adjoint

Mathématiquement, le produit scalaire de deux fonctions,

$$\phi: \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{II.7})$$

$$\psi^\dagger: \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{II.8})$$

d'un espace \mathcal{E} , peut être défini par :

$$\langle \psi^\dagger, \phi \rangle = \int_{\epsilon \in \mathcal{E}} \psi^\dagger(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon. \quad (\text{II.9})$$

Dans le cas où les applications ϕ et ψ^\dagger sont « de bonne famille » [4], c'est-à-dire qu'elles respectent un certain nombre de règles de continuité et de conditions aux limites, il est possible de trouver à un opérateur \mathcal{L} , un opérateur adjoint \mathcal{L}^\dagger tel que :

$$\langle \psi^\dagger, \mathcal{L}\phi \rangle = \langle \phi, \mathcal{L}^\dagger\psi^\dagger \rangle. \quad (\text{II.10})$$

Le concept mathématique d'opérateur adjoint permet de démontrer, ou de supposer avec confiance, un certain nombre de résultats relatifs à l'équation (II.1) :

- Les opérateurs \mathcal{P}^\dagger et \mathcal{K}^\dagger , adjoints respectifs des opérateurs directs \mathcal{P} et \mathcal{K} existent et leur expression est connue [8] :

$$\left[\mathcal{P}^\dagger \Phi^\dagger \right] (\epsilon) = \int_{\epsilon'} \mathcal{P}(\epsilon \rightarrow \epsilon') \Phi^\dagger(\epsilon') d\epsilon' \quad (\text{II.11})$$

$$\left[\mathcal{K}^\dagger \Phi^\dagger \right] (\epsilon) = -\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi^\dagger(\epsilon) + \Sigma_t(\epsilon) \Phi^\dagger(\epsilon) - \int_{\epsilon'} \Sigma_s(\epsilon \rightarrow \epsilon') \Phi^\dagger(\epsilon') d\epsilon' \quad (\text{II.12})$$

- La plus grande valeur propre λ^\dagger , du système adjoint,

$$\mathcal{K}^\dagger \Phi^\dagger = \lambda^\dagger \mathcal{P}^\dagger \Phi^\dagger \quad (\text{II.13})$$

Transport Adjoint

est égale à la valeur propre directe. En effet, on montre que les solutions fondamentales existent et qu'elles sont non nulles et positives, alors par définition, l'égalité :

$$(\lambda^\dagger - \lambda) \langle \Phi^\dagger, \Phi \rangle = 0 \quad (\text{II.14})$$

ne peut être vérifiée que si $\lambda^\dagger = \lambda$ [4].

- La discrétisation de l'espace introduite par les codes déterministes leur permet d'écrire l'équation du transport sous une forme matricielle. On montre alors, lorsque la discrétisation est suffisante [12] que les matrices \mathcal{M} s'obtiennent par transposition,

$$\mathcal{M}_{\mathcal{P}^\dagger} = {}^\top \mathcal{M}_{\mathcal{P}} \quad (\text{II.15})$$

$$\mathcal{M}_{\mathcal{K}^\dagger} = {}^\top \mathcal{M}_{\mathcal{K}}. \quad (\text{II.16})$$

Ce qui équivaut à inverser transferts énergétiques et directionnels. Dans le cas de l'équation de la diffusion mono-énergétique, les opérateurs \mathcal{P} et \mathcal{K} sont même auto-adjoints³ [4]. Nous utiliserons ce résultat comme point de vérification un peu plus loin dans ce chapitre (*cf.* Sec. II.B.3.i).

- Par définition,

$$\langle \Phi^\dagger, \mathcal{K}\Phi \rangle = \langle \Phi, \mathcal{K}^\dagger \Phi^\dagger \rangle \quad (\text{II.17})$$

$$\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle = \langle \Phi, \mathcal{P}^\dagger \Phi^\dagger \rangle \quad (\text{II.18})$$

³Dans le cas du transport mono-énergétique, bien que les flux scalaires direct et adjoint soient rigoureusement égaux, les flux angulaires sont eux opposés en angle, plus précisément : $\Phi(-\hat{\Omega}) = \Phi^\dagger(\hat{\Omega})$.

II.A.1.ii Définition « Physique », ou Probabilité de Fission Itérée (IFP)

Ces développements mathématiques abstraits doivent être complétés par la notion d'importance qui vient donner un sens à la notion de flux adjoint. Plus spécifiquement, cette importance est équivalente à la *Probabilité Itérée de Fission* [13–16], ou *Iterated Fission Probability* (IFP) :

Le flux adjoint fondamental est proportionnel à l'importance moyenne d'un neutron dans la réaction en chaîne de fission, qui est elle-même proportionnelle à la quantité moyenne de neutrons produits par fission, par ce même neutron, dans une génération éloignée (suivant le principe des itérations de la puissance). Autrement dit, il s'agit de la contribution asymptotique moyenne de ce neutron à la puissance. Cette contribution est appelée IFP.

Reprenons la démonstration de la référence [14]. Soit $I(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ la proportion asymptotique moyenne de descendants produits par un neutron initialement placé en $(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$. En suivant la définition de I , montrons que l'IFP vérifie l'équation homogène du flux adjoint, et que par conséquent ces quantités doivent être proportionnelles. Soit un petit parcours de neutrons $d\vec{s} = \vec{r}' - \vec{r}$; alors, le long de $d\vec{s}$:

$$\underbrace{I(\vec{r}, E, \hat{\Omega})}_{\text{Importance en } \vec{r}} = p_{\text{nc}} \underbrace{I(\vec{r} + d\vec{s}, E, \hat{\Omega})}_{\text{Importance en } \vec{r}'} + \underbrace{\mathcal{Q}(\vec{r} + d\vec{s}, E, \hat{\Omega})}_{\text{Perte d'importance sur } d\vec{s}}, \quad (\text{II.19})$$

où $p_{\text{nc}} = 1 - \Sigma_t ds$ est la probabilité de non-collision, Σ_t la section totale, et \mathcal{Q} est l'importance moyenne neutrons déviés le long de $d\vec{s}$. Soit $q(\vec{r} + d\vec{s}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}')$ le nombre moyen de neutrons subissant une collision sur le chemin $d\vec{s}$ et qui prennent l'état $\hat{\Omega}', E'$, soit,

$$q(\vec{r} + d\vec{s}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = \Sigma_s(\vec{r} + d\vec{s}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') ds + \lambda \frac{\chi(E \rightarrow E')}{4\pi} \nu \Sigma_f(\vec{r} + d\vec{s}, E) ds, \quad (\text{II.20})$$

où Σ_s est la section de diffusion, Σ_f la section de fission, ν le nombre moyen de neutrons émis par fission, et χ le spectre des neutrons de fission. Le terme \mathcal{Q} peut alors être exprimé comme :

$$\mathcal{Q}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_0^{4\pi} d^2\hat{\Omega}' q(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') I(\vec{r}, E', \hat{\Omega}'). \quad (\text{II.21})$$

En divisant l'équation (II.19) par $d\vec{s}$,

$$0 = \frac{dI(\vec{r}, E, \hat{\Omega})}{d\vec{s}} - \Sigma_t I(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) + \frac{\mathcal{Q}(\vec{r} + d\vec{s}, E, \hat{\Omega})}{d\vec{s}}. \quad (\text{II.22})$$

et en ne gardant que les termes du premier ordre en $d\vec{s}$, on obtient :

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{\Omega} \cdot \nabla I(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) - \Sigma_t I(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) \\ &+ \int_0^\infty dE' \int_0^{4\pi} d^2\hat{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') I(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') \\ &+ \lambda \frac{\nu \Sigma_f(\vec{r}, E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_0^{4\pi} d^2\hat{\Omega}' \chi(E \rightarrow E') I(\vec{r}, E', \hat{\Omega}'). \end{aligned} \quad (\text{II.23})$$

Par identification avec l'équation du transport adjoint (II.13), on remarque que $I(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ satisfait l'équation adjointe du flux, ce qui implique que $I(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) \propto \Phi^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$.

La relation de proportionnalité entre le flux adjoint et la probabilité de fission itérée offre un moyen d'estimation du flux adjoint Φ^\dagger par une méthode Monte Carlo lors d'un transport direct des neutrons. En effet, en calculant la population de neutrons asymptotique générée par un neutron source initialisé aux coordonnées $\vec{r}, E, \hat{\Omega}$, on calcule en fait le flux adjoint en ce point. En pratique, la population asymptotique est mesurée après L générations. L étant ici appelé « cycle IFP ».

II.A.2 État de l'Art des Méthodes Monte Carlo

Dans cette section, nous ferons le tour des différentes méthodes Monte Carlo qui permettent le calcul du flux adjoint à partir des définitions sus-jacentes.

II.A.2.i La Probabilité Itérée de Fission

En lien direct avec la section II.A.1.ii, calculer un flux adjoint en un point de \mathcal{E} revient à mesurer l'importance moyenne d'un neutron source lancé en ce point. Cette importance peut être estimée par le nombre de fissions que ce neutron générera après L générations, où L est appelée « cycle IFP ».

On considère une simulation critique initialisée par une multitude de neutrons sources dans l'état $\epsilon_0 \in \mathcal{E}$. L'importance du neutron est alors liée au nombre de neutrons N^L , générés dans la génération L . Ce nombre de neutrons N^L s'écrit comme le produit des facteurs de normalisation⁴ k_g , de chaque génération g [16] :

$$N^L(\epsilon_0) = \prod_{g=1}^L k_g \quad (\text{II.24})$$

N^L est alors représentatif de la puissance injectée : si le réacteur est sur-critique, N^L diverge vers l'infini en fonction de L , si le réacteur est sous-critique N^L tend vers 0. Une solution divergente n'étant pas acceptable pour définir l'importance, il est préférable de normaliser k_g à chaque génération par sa valeur asymptotique $k_{g \rightarrow \infty}$,

$$I^L(\epsilon_0) = \prod_{g=1}^L \frac{k_g}{k_{g \rightarrow \infty}} \quad (\text{II.25})$$

La convergence de cette seconde définition se déduit trivialement de la convergence du flux et des facteurs k_g en fonction de la génération g dans la démonstration des *itérations de la puissance*. On prouve également [13] que $I^L(\epsilon_0)$ est égale à la projection sur le mode propre fondamental de la source de neutrons $S(\epsilon) = \delta(\epsilon - \epsilon_0)$. Ce qui permet de généraliser cette dernière expression lorsque les sources S sont de natures différentes,

$$\langle I^L(\epsilon), S(\epsilon) \rangle = \langle S(\epsilon) \rangle \prod_{g=1}^L \frac{k_g}{k_{g \rightarrow \infty}}. \quad (\text{II.26})$$

Ainsi, un code Monte Carlo qui possède un mode critique, peut, sans développements spécifiques, accéder au flux adjoint d'une source en calculant le produit des k_g . Cette faculté sera utilisée afin de calculer de manière exacte les perturbations dans notre prochain chapitre (*cf.* Chap. III). Afin d'accéder au flux adjoint en plusieurs mailles de l'espace des phases dans une unique simulation, la méthode du présent chapitre consistera à suivre chaque neutron source au cours des générations de manière à en estimer sa contribution à la population asymptotique. Pour des raisons pratiques, la normalisation par le $k_{g \rightarrow \infty}^L$ ne sera pas effectuée par le code et restera à charge de l'utilisateur⁵. Afin d'affiner sa compréhension du principe des IFP, le lecteur appréciera l'illustration proposée dans l'encadré qui suit.

⁴Ces facteurs de renormalisation correspondent aux estimateurs appelés k_{STEP} dans le code TRIPOLI-4[®]. Bien qu'il soit possible d'utiliser les réalisations du k_{eff} des estimateurs *collision* ou *corde*, il semble plus juste d'utiliser les k_{STEP} qui permettent le calcul strict du nombre de neutrons N^L .

⁵La normalisation par le $k_{g \rightarrow \infty}$ n'est en général pas obligatoire puisque les quantités d'intérêt sont le plus souvent formées de ratios de quantités pondérées par l'adjoint.

Illustration du principe des IFP

Calculons l'IFP en plusieurs points d'une simple boule de matière fissile (Benchmark GODIVA [17] – Fig. II.1). Neuf sources, placées à des distances croissantes du centre de la boule, initialisent neuf calculs critiques Monte Carlo de 20 générations. Pour chacune des simulations, la figure II.2 montre la convergence des facteurs de renormalisation en fonction du nombre de générations. Plus la source se situe au centre de la sphère plus le facteur de normalisation des sources, k_g , surestime le k_{eff} lors des premières générations, ce qui se traduit, *in fine*, par une importance I plus grande calculée après 20 générations (*cf.* Tab. II.1).

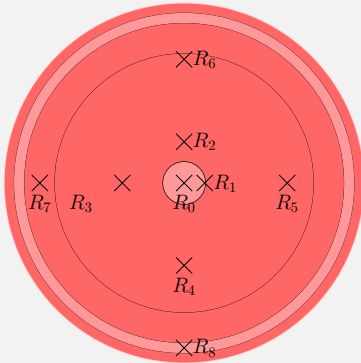


FIGURE II.1 – GODIVA, boule fissile hautement enrichie en ^{235}U . Placement des points dans la boule à différentes distances du centre.

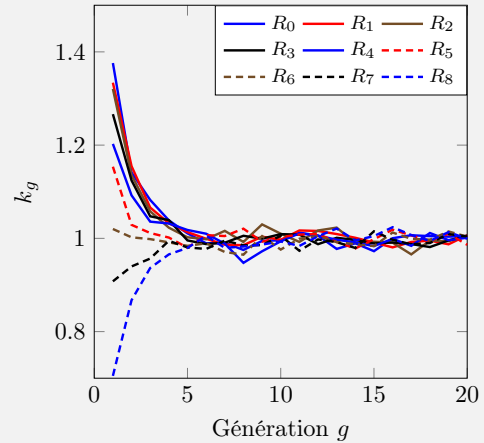


FIGURE II.2 – Facteurs de normalisation k_g entre la génération $g - 1$ et g en fonction de g pour des sources initiales différentes.

TABEAU II.1 – Importances : $I = \prod_{g=1}^{20} k_g$

Sources	Importance (I)
R_0	1.62
R_1	1.67
R_2	1.57
R_3	1.46
R_4	1.28
R_5	1.13
R_6	0.92
R_7	0.71
R_8	0.5

II.A.2.ii Monte Carlo Direct vs Monte Carlo Inversé

Comme les codes multigroupes (déterministes ou Monte Carlo) transposent leurs opérateurs matriciels, on peut imaginer « transposer » les opérateurs continus. Les réactions et le déplacement des neutrons seraient alors simulés « dans l'autre sens » : le neutron adjoint ou « adjoncton » occasionnerait des réactions en sens inverse, (*e.g.* là où le neutron diffuse et perd de l'énergie en diffusant, l'adjoncton au contraire en gagne [18, 19]). Appliquée à d'autres particules que les neutrons [20], la simulation du problème adjoint permet des réductions importantes de variances dans les problèmes de type propagation. La théorie est entièrement développée pour les neutrons [18, 21] mais ne trouve pas d'applications autres qu'expérimentales [22]. Afin de saisir l'ampleur de la tâche, nous décidons de rappeler le fonctionnement du transport direct des neutrons dans un code Monte Carlo, puis de détailler son pendant adjoint.

Transport Direct Les codes Monte Carlo procèdent de la manière suivante pour résoudre le problème du transport direct des neutrons :

- Une simulation est initialisée par des sources de neutrons, c'est-à-dire un ensemble de neutrons dont l'état dans $\epsilon \in \mathcal{E}$ est connu et qu'il faut transporter.

- Pour transporter ces neutrons, on définit l'opérateur de transport $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E', \hat{\Omega}')$ tel que $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E', \hat{\Omega}')d^3V$ représente la probabilité qu'un neutron initialement en \vec{r}' , à une énergie E' et se propageant dans une direction $\hat{\Omega}'$ réalise sa prochaine collision dans un volume d^3V autour de \vec{r} . On peut donner l'expression exacte de T :

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E', \hat{\Omega}') = \frac{\Sigma_t(\vec{r}, E')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \exp \left[- \int_0^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Sigma_t(\vec{r} - s\hat{\Omega}', E') ds \right] \delta \left[\hat{\Omega}' - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \quad (\text{II.27})$$

Cette expression découle de la définition des sections efficaces et de logique simple. L'opérateur de Dirac δ , permet de sélectionner la direction colinéaire à $\hat{\Omega}'$. Dans la pratique, le tirage d'un premier nombre aléatoire va permettre à un neutron de définir, via cet opérateur T , un premier lieu de collision, soit un déplacement de \vec{r}' à \vec{r} .

- L'étape suivante consiste à caractériser la collision. Soit l'opérateur de collision $C(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})$ tel que $C(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega}$ soit la probabilité qu'un neutron présent en \vec{r} avec une énergie E' et dans une direction $\hat{\Omega}'$ interagisse et ressorte dans une direction $\hat{\Omega} \pm d^2\hat{\Omega}$, à une énergie $E \pm dE$. On peut exprimer C de la façon suivante :

$$C(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) = \sum_A N_A(\vec{r}) \sum_j \frac{\sigma_{j,A}(E')}{\Sigma_t(\vec{r}, E')} \nu_{j,A}(E') f_{j,A}(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \quad (\text{II.28})$$

où ont été introduites les quantités N_A , et $\sigma_{j,A}$ correspondant respectivement à la concentration de l'isotope A et à la section efficace de la réaction j de l'isotope A . La fonction $\nu_{j,A}$ correspond au nombre de neutrons émis par la réaction j de l'isotope A et la fonction $f_{j,A}$ correspond à la probabilité qu'un neutron ayant subi une réaction j sur l'isotope A soit diffusé ou ré-émis à l'énergie E et dans la direction $\hat{\Omega}$. En général, un $\nu_{j,A}$ moyen par isotope est utilisé (cependant la fission peut en effet émettre un nombre variable de neutrons).

Les codes Monte Carlo ont universellement adopté la renormalisation de l'opérateur de collision C par la probabilité de non-absorption : en effet, dans le cas où la réaction tirée aléatoirement correspond à l'absorption, la particule simulée est « perdue » pour le système. Il semble alors plus judicieux de poursuivre son histoire en pondérant son poids statistique par la probabilité de non-absorption P_{na} :

$$P_{\text{na}} = \frac{\Sigma_s(\vec{r}, E')}{\Sigma_t(\vec{r}, E')} \quad (\text{II.29})$$

La simulation Monte Carlo devient alors une simulation non-analogue [23, 24] où un poids statistique spécifique est associé à chaque neutron. Néanmoins, ce traitement de la non-absorption à lui seul impliquerait une baisse continue du poids des neutrons à chaque collision et ne permettrait pas de stopper son histoire. C'est par un mécanisme de « roulette russe » (*cf.* Sec. II.B.2.iii) que les poids des neutrons trop faibles sont collectés pour être tantôt rehaussés, tantôt annulés.

- Le neutron se trouve dans un nouvel état qui devient le nouveau point de départ d'un tirage de T , puis de C et ainsi de suite jusqu'à ce que le neutron soit absorbé ou qu'il ait fuit. Dans le cas d'une simulation critique, homogène, et de sa résolution par itération de la puissance, les neutrons issus de fissions sont mis de côté pour être relancés tous ensemble dans une nouvelle génération.

Transport Adjoint Par analogie avec la résolution de l'équation du transport direct, l'auteur des références [18, 25] préconise de définir les opérateurs adjoints :

$$\begin{cases} C^+(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) = \frac{\Sigma_t(\vec{r}, E)}{\Sigma_t^+(\vec{r}, E')} C(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}'), \\ T^+(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, \hat{\Omega}) = T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E, -\hat{\Omega}), \end{cases} \quad (\text{II.30})$$

où l'opérateur de transport T est légèrement modifié : on tire $-\hat{\Omega}$ au lieu de $\hat{\Omega}$. L'opérateur de collisions C est lui profondément changé : de manière à ressembler de nouveau à une distribution de probabilité que l'on puisse échantillonner, on lui a adjoint le terme $\frac{\Sigma_t(\vec{r}, E)}{\Sigma_t^+(\vec{r}, E')}$. Pour se ramener à une forme similaire pour C et C^+ , le problème consiste alors à trouver des fonctions $\sigma_{j,A}^+(E')$ et $f_{j,A}^+(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})$ telles que,

$$\begin{aligned} C^+(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) &= \frac{\Sigma_t(\vec{r}, E)}{\Sigma_t^+(\vec{r}, E')} C(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \\ &= \sum_A N_A(\vec{r}) \sum_j \frac{\sigma_{j,A}(E)}{\Sigma_t^+(\vec{r}, E')} \nu_{j,A}(E) f_{j,A}(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \\ &= \sum_A N_A(\vec{r}) \sum_j \frac{\sigma_{j,A}^+(E')}{\Sigma_t^+(\vec{r}, E')} \nu_{j,A}^+(E') f_{j,A}^+(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}), \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

soit, en intégrant sur toutes les énergies E et tous les angles $\hat{\Omega}$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{j,A}^+(E') = \int_{E, \hat{\Omega}} \sigma_{j,A}(E) f_{j,A}(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') dE d^2\hat{\Omega} \\ \nu_{j,A}^+(E') = \int_{E, \hat{\Omega}} \frac{\sigma_{j,A}(E) \nu_{j,A}(E) f_{j,A}(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}')}{\sigma_{j,A}^+(E')} \\ \Sigma_t^+(\vec{r}, E') = \sum_A \Sigma_A^+(\vec{r}, E') = \sum_A N_A(\vec{r}) \sum_j \sigma_{j,A}^+(E') \nu_{j,A}^+(E') \\ f_{j,A}^+(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) = \frac{\sigma_{j,A}(E) \nu_{j,A}(E)}{\sigma_{j,A}^+(E') \nu_{j,A}^+(E')} f_{j,A}(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \end{array} \right. \quad (\text{II.32})$$

La renormalisation de l'opérateur C^+ permet d'introduire le facteur P^+ , pendant adjoint de la probabilité de non absorption P_{na} :

$$P^+(E) = \frac{\Sigma_t^+(\vec{r}, E)}{\Sigma_t(\vec{r}, E)} \quad (\text{II.33})$$

Partant d'une source connue, la résolution adjointe de l'équation du transport consiste à échantillonner successivement les opérateurs T^+ , C^+ , de façon similaire à la résolution de l'équation directe. Les solveurs Monte Carlo du transport Direct peuvent donc être facilement adaptés au transport adjoint.

Le défi posé par cette méthode et les raisons de sa non-implémentation sont purement techniques et pratiques. La tâche se trouve être en fait considérable si l'on souhaite prendre en compte l'ensemble des subtilités des formats de données nucléaires ainsi que des modèles utilisés, notamment pour la diffusion à basse énergie ou la diffusion résonnante. Les sections obtenues doivent aussi pouvoir être réinjectées dans un format interprétable par les codes, ou bien calculées à la volée en multigroupe [22]. Des tests pratiques ont été réalisés dans ce travail de thèse, puis abandonnés : il a été considéré qu'un travail rigoureux de transposition des sections efficaces directes méritait de se placer directement au niveau des modèles qui paramétrisent les sections efficaces ; nous manquions alors de temps et de perspectives à l'échelle de la thèse pour poursuivre dans cette voie. L'auteur compte néanmoins approfondir le sujet qui permettrait de résoudre les équations adjointes, sans passer par les moyens détournés qu'offre les IFP. C'est-à-dire résoudre l'équation adjointe « directement » plutôt que de calculer le nombre de neutrons au bout de L générations.

II.A.2.iii La Matrices de Fission

La matrice de fission est construite en Monte Carlo par analyse des sources de fissions générées après chaque génération du processus d'itération de la puissance. On note \mathcal{F} cette matrice dont chaque élément $f_{i,j}$ correspond, après discrétisation fine de l'espace \vec{r} , au nombre de « nouvelles » sources

dans l'état j que d'« anciennes » sources dans l'état i vont produire à la prochaine génération. Ni les dimensions angulaires (la fission est un phénomène isotrope) ni la dimension énergétique ne sont alors discrétisées, si bien que la matrice de fission comporte un nombre d'éléments égal au carré du nombre de volumes fissiles discrétisés.

Obtention des Modes Sources Directs et Adjoins Il existe un lien direct entre la source S_g ,

$$S_g = \frac{1}{k_g} \mathcal{P} \Phi_{g-1} = \frac{1}{k_g} \nu \Sigma_f \Phi_{g-1}, \quad (\text{II.34})$$

de l'itération de puissance g , et celles de l'itération $g + 1$, S_{g+1} [12],

$$S_{g+1} = \frac{1}{k_{g+1}} \mathcal{F} S_g \quad (\text{II.35})$$

qui donne accès au mode fondamental des sources, mais aussi à une multitude d'autres modes d'ordre supérieur. Traditionnellement, cette matrice de fission est utilisée dans le but d'analyser (ou d'accélérer) la convergence des sources, voire de reconstruire le flux d'un état de cœur perturbé [26]. Les valeurs propres dans l'espace des sources sont équivalentes aux valeurs propres dans l'espace du flux. Il est possible de définir le pendant adjoint de cette dernière équation,

$$S_{g+1}^\dagger = \frac{1}{k_{g+1}} \mathcal{F}^\dagger S_g^\dagger. \quad (\text{II.36})$$

avec,

$$S_g^\dagger = \frac{1}{k_g} \mathcal{P}^\dagger \Phi_{g-1}^\dagger = \frac{1}{k_g} \frac{\chi}{4\pi} \Phi_{g-1}^\dagger, \quad (\text{II.37})$$

De façon similaire aux autres opérateurs adjoints et dans l'hypothèse d'un maillage spatial fin, on a aussi [12] :

$$\mathcal{F}^\dagger = {}^\top \mathcal{F}. \quad (\text{II.38})$$

Les équations directe (II.35) et adjointe (II.36) sont des dérivées des équations du transport introduites en début de chapitre. La connaissance des sources permet en une unique itération de puissance (*i.e.* la résolution d'une équation hétérogène), de retrouver le flux direct ou adjoint : il suffit de reconstruire la source de fission via le spectre moyen des fissions, χ (*cf.* Annexe de la référence [12]) et de transporter ses neutrons. Soit, sous forme matricielle :

$$\Phi_g = \frac{1}{k_g} \underbrace{\mathcal{G}}_{\text{Transport}} \underbrace{\frac{\chi}{4\pi} S_g}_{\substack{\text{Source} \\ \text{Énergétique}}} = \frac{1}{k_g} \mathcal{G} \mathcal{P} \Phi_{g-1} \quad (\text{II.39})$$

où \mathcal{G} est la matrice de Green, (ou l'opérateur de Green [6]). Cet opérateur donne la probabilité de transport d'un neutron dans l'état ϵ_i vers un état ϵ_j . De même on peut définir le pendant adjoint de cette dernière équation :

$$\Phi_g^\dagger = \frac{1}{k_g} \underbrace{{}^\top \mathcal{G}}_{\substack{\text{Transport} \\ \text{Adjoint}}} \underbrace{(\nu \Sigma_f) S_g^\dagger}_{\substack{\text{Source} \\ \text{Énergétique} \\ \text{Adjointe}}} = \frac{1}{k_g} {}^\top \mathcal{G} {}^\top \mathcal{P} \Phi_{g-1}^\dagger \quad (\text{II.40})$$

En utilisant les outils actuels disponibles dans TRIPOLI-4[®], il est possible de calculer \mathcal{F} , puis de réaliser l'unique itération de la puissance (qui correspond à un calcul direct de propagation d'une source) afin d'obtenir, *in fine*, le flux direct⁶. En revanche, afin d'obtenir le flux adjoint, il est bien

⁶Les autres modes peuvent être obtenus grâce au principe de superposition des sources et à la propagation dans deux simulations distinctes des termes sources positif et négatif.

possible de transposer \mathcal{F} , mais le calcul de propagation de la source adjointe nécessiterait l'implémentation du Monte Carlo inversé (*cf.* Sec. II.A.2.ii). La réalisation d'un calcul d'adjoint source-détecteur constituerait une alternative possible. Il suffirait alors de définir une source constante et uniforme dans chaque maille où l'on souhaiterait obtenir le flux adjoint – en utilisant le bon spectre adjoint – puis de réaliser un calcul type bande de Green (en deux étapes dans TRIPOLI-4[®]) en définissant un ensemble de détecteurs au niveau des volumes de la source adjointe. Le flux et son incertitude sont dans ce cas obtenus après un enchaînement complexe de plusieurs simulations où biais liés à la discrétisation et incertitudes seraient difficilement estimables.

Matrice \mathcal{F} Énergétique Une thèse récente, contemporaine de ce travail, réalisée au CEA-Saclay (DEN/DM2S/SERMA) [27] a permis d'accéder au flux adjoint en définissant une matrice de fission « énergétique » implémentée dans TRIPOLI-4[®]. Une reconstruction du flux adjoint y est effectuée, mais se heurte à plusieurs problèmes dont l'augmentation fulgurante de la mémoire vive nécessaire, qui évolue en fonction du produit du carré du nombre de volumes par le carré du nombre de groupes d'énergie.

II.A.2.iv Synthèse du Calcul d'Importance

Le tableau II.2 synthétise les avantages et les inconvénients des différentes méthodes présentées dans cet état de l'art. L'objectif de cette thèse est de se tourner vers des méthodes de référence, ainsi, il paraît judicieux d'exclure les méthodes basées sur une approche « matrice de fission » qui demandent la définition de maillages arbitraires, potentiellement trop grossiers, et pour lesquels le stockage des scores⁷ en mémoire peut s'avérer prohibitif. Le calcul du flux adjoint par la méthode du transport inversé s'avère être une tâche complexe mais qui peut offrir un fort gain de convergence par rapport à un transport direct. Notre choix d'implémenter des méthodes basées sur les IFP permet, *in fine*, d'obtenir un estimateur ponctuel, permettant le calcul d'intégrales de manière exacte, ce qui nous sera indispensable dans le calcul des perturbations de manière continue et rigoureuse.

TABLEAU II.2 – Synthèse des différentes méthodes du calcul du flux adjoint Monte Carlo.

Méthode	Calcul de Référence	Estimateur Ponctuel	Modes supérieurs	Technicité
IFP	✓	✓	✗	Simple
Transport Inversé	✓	✗	✗	Difficile
Matrice de Fission	✗	✗	✓	Problèmes mémoire

⁷Les scores d'une simulation Monte Carlo correspondent aux réponses que l'utilisateur attend d'une simulation. Bien souvent, il s'agit d'intégrales pondérées du flux sur un sous-ensemble de l'espace des phases \mathcal{E} . Par exemple, les estimations du k_{eff} correspondent à l'intégrale du flux pondéré par l'opérateur de production \mathcal{P} sur \mathcal{E} , $\langle \mathcal{P}\Phi(\epsilon) \rangle$.

Illustration « Matrice de Fission »

Nous traçons, figure II.4, les trois premiers modes sources directs et adjoints obtenus via la matrice de fission (cf. Fig. II.3) pour un réacteur homogène fini à une seule dimension. Un découpage spatial en 80, puis 800 volumes fissiles a été utilisé. La légère influence du maillage spatial est visible, notamment au niveau des limites de la géométrie. La matrice de fission obtenue sur ce maillage très fin constituera un peu plus loin une étape de *vérification* de nos développements sur le flux adjoint. Malheureusement, l'utilisation des mailles toujours plus fines et nombreuses, ralentit le calcul, diminue la précision par maille^a, augmente les besoins en mémoire.

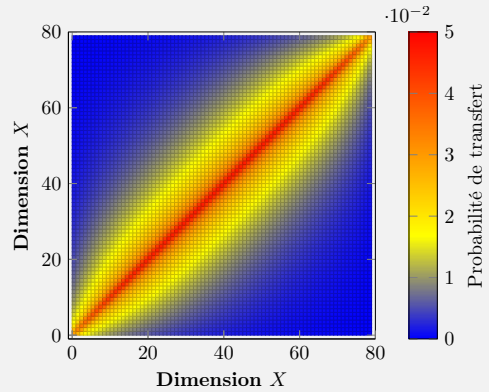


FIGURE II.3 – Matrice de fission 80×80 . Cette matrice est « diagonale » car les milieux sont rangés selon l'axe X et que la probabilité de créer une fission dans les milieux voisins est plus élevée que pour un milieu lointain.

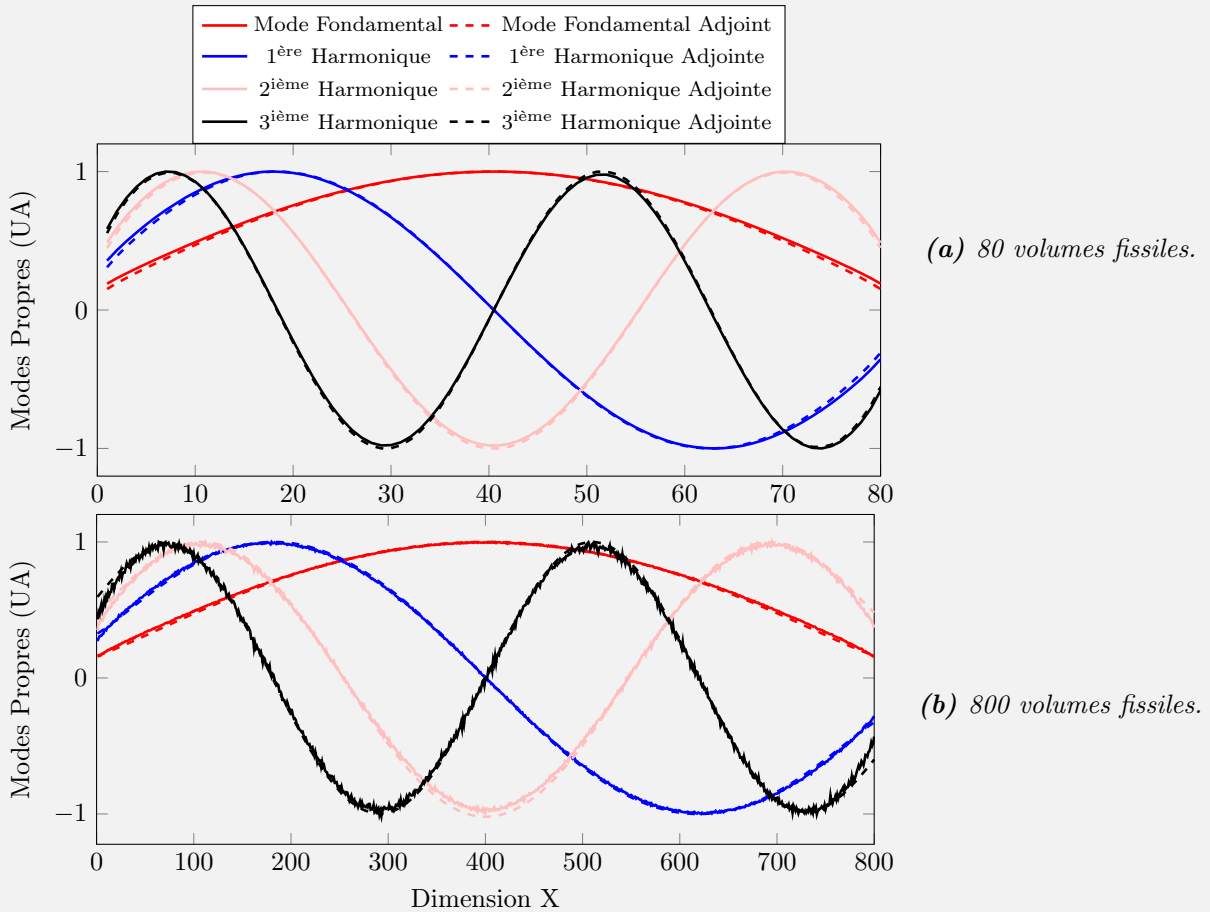


FIGURE II.4 – Modes propres des sources Directes et Adjointes issus de la matrice de fissions TRIPOLI-4[®] sur un cas 1D. En transport, les flux, et par extension les sources, ne sont pas nuls aux limites de la géométrie.

^aDans la nouvelle implémentation [27] des matrices de fissions de TRIPOLI-4[®], il ne semble pas nécessaire de raffiner les volumes de la géométrie pour obtenir la matrice de fission, ce qui ralentit considérablement le transport des neutrons pour la même géométrie dans la version que nous avons utilisée.

II.B Implémentation dans TRIPOLI-4®

Cette partie va introduire les rudiments d’une simulation adjointe IFP telle qu’elle a été implémentée lors de cette thèse dans le code TRIPOLI-4®. La confusion peut être grande dans la littérature en ce qui concerne l’appellation « IFP », terme que l’on relie tantôt au calcul de perturbation premier ordre, tantôt au calcul des paramètres cinétiques effectifs. Afin de clarifier ce document, nous ferons référence à la méthode décrite dans ce chapitre sous l’acronyme AIWS pour *Arbitrary IFP-Weighted Source*, par opposition à la méthode des perturbations premier ordre que nous désignerons sous le nom **Méthode IFP** et qui sera introduite dans le chapitre suivant.

II.B.1 Méthode AIWS

II.B.1.i Algorithme

L’IFP (*cf.* Sec. II.A.1.ii), soit l’importance d’une source, est proportionnelle au flux adjoint. Nous avons vu que, sans aucun développement informatique (*cf.* Sec. II.A.2.i), il était possible de calculer l’IFP d’une source, mais qu’alors il fallait lancer autant de simulations différentes que de flux adjoints à calculer. Afin de calculer plusieurs scores (*i.e.* des flux adjoints sur un sous-espace de \mathcal{E}) dans une même simulation (donc d’offrir une méthode à la fois plus souple et limitant les temps d’initialisation), il est possible de classer les sources en fonction de leur lieu de naissance (*e.g.* dans un maillage) puis de suivre leur descendance comme schématisé figure II.5. En gardant mémoire de la source d’origine, chaque fission d’une génération ultérieure peut être liée à l’une de ces sources et contribuer à un score d’une maille spécifique. Dans notre implémentation, qui reprend et améliore la proposition faite par Y. Nauchi [16], l’état des sources est stocké en début de simulation et chaque source se voit attribuer un identifiant unique. Cet identifiant sera transmis à tous ses descendants au cours des itérations de la puissance si bien que toute fission dans une génération L pourra être reliée à un neutron source. De manière à ne pas stopper la simulation après L cycles, les sources du départ sont réinitialisées à chaque fin de cycle, ce qui permet la convergence des différents scores dans une unique simulation.

Le principe est simple, mais l’implémentation nécessite quelques pirouettes. La première raison est que ce mode de simulation par enchaînement de cycle de générations critiques n’existe pas dans TRIPOLI-4®. Dans un premier temps, notre implémentation réalisait alors un unique cycle : il était cependant impossible de converger efficacement à moins de lancer de nombreuses simulations indépendantes. La définition des scores était également essentielle, il fallait pouvoir créer plusieurs scores, sur plusieurs maillages relativement simplement et avec des longueurs de cycles différentes de manière à être en mesure d’estimer la convergence du flux en fonction du cycle IFP. Les nombreuses alternances de phases d’implémentation et de phases d’utilisation du code ont abouti, nous l’espérons, à une implémentation robuste et pérenne. Désormais, l’utilisateur commence par définir un score IFP selon les paramètres suivants :

- Le nom du score
- Un maillage spatial (et/ou angulaire). Actuellement, il est possible de définir des maillages 3D cartésien scalaire, cylindrique, sphérique ou bien cartésien angulaire.
- Un maillage énergétique.
- Une longueur de cycle IFP.

Plusieurs scores différents peuvent être définis dans une même simulation. S’ensuit alors l’enchaînement des différentes étapes d’un calcul AIWS (*cf.* Alg. 1) :

1. Dans la liste \mathcal{S} de scores adjoints \mathcal{I} demandés par l’utilisateur, le code repère le cycle le plus long L . Ce cycle sera le cycle principal de la simulation.

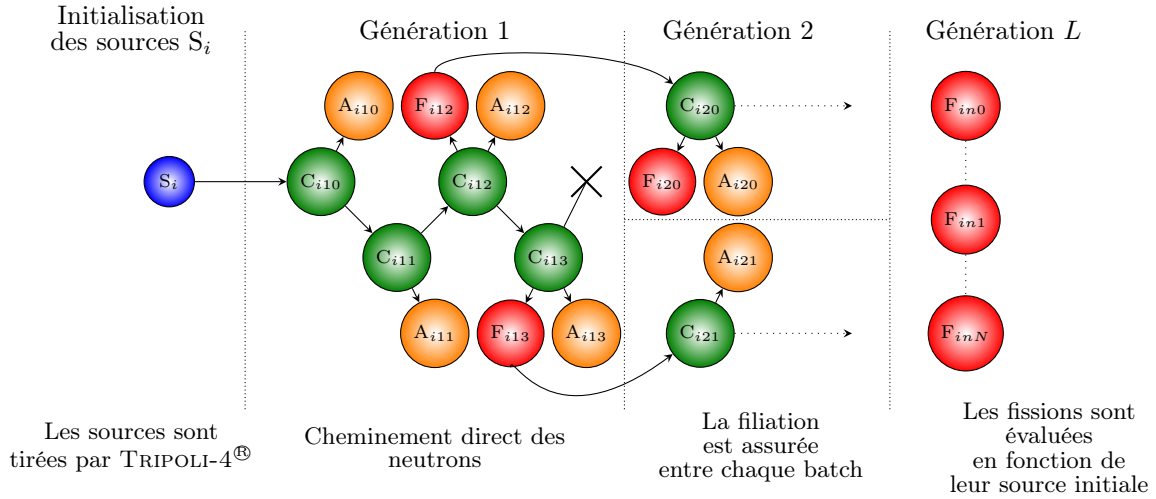


FIGURE II.5 – Déroulement d'un calcul de flux adjoint IFP avec TRIPOLI-4[®] (S : Source, F : Fission, A : Absorption, C : Collision) . Le code procède par le tirage d'une source que nous indexerons i . Lors de la première génération, cette source est propagée jusqu'à une première collision. Au point de collision, une partie du poids de la source est perdue par absorption, une autre partie générera une hypothétique fission, tandis que le reste du poids est de nouveau propagé par tirage d'une réaction de diffusion. La particule est tuée lorsque son poids devient trop faible. Plusieurs sources sont ainsi lancées, qui sont potentiellement différentes et possèdent toute un indice i différent. Les fissions de la première génération deviennent les sources de la seconde génération et garde mémoire de l'indice i de la source qui leur a donné le jour en début de simulation. Et ainsi de suite jusqu'à la génération L où les neutrons de fissions sont classés en fonction de leur source i d'origine, puis comptés.

2. Le tirage des sources. Au début de chaque simulation, les sources sont tirées de manière équivalente au tirage des sources en mode critique. C'est à ce moment que les états des sources sont mémorisés par le code et associés aux différentes mailles des différents scores.
3. Le code procède aux itérations de la puissance sur la source de fission de manière analogue au calcul critique. Lorsque le nombre de générations atteint un cycle demandé par l'utilisateur, les sources de fissions de la génération en cours sont comptabilisées pour le (les) score(s) en question.
4. Lorsque le nombre de générations atteint la longueur du cycle principal et que le(s) dernier(s) score(s) a (ont) été mis à jour, la simulation repart sur un nouveau cycle en initialisant une nouvelle fois les points sources initiaux. Bien que la simulation reparte des mêmes points sources, elle sera néanmoins différente, le générateur de nombres aléatoires possédant à ce stade une graine différente.
5. Les cycles s'enchaînent alors jusqu'au nombre maximal de générations entré par l'utilisateur.

Dans le cas d'un calcul multiprocesseur, chaque simulation est entièrement indépendante. Le rassemblement des scores est effectué par l'intermédiaire d'archives stockées sur le disque par le processeur habituellement chargé de la collection des données. Cette solution a été choisie de manière à limiter l'impact dans le code existant tout en conservant une grande liberté d'action. La taille des fichiers écrits sur le disque étant généralement très faibles, cette méthode garantit une grande scalabilité⁸ du calcul.

⁸Une bonne scalabilité se traduit par une augmentation des performances proportionnelle au nombre de processeurs utilisés.

```

 $\mathcal{S} = \{\{L_0, \mathcal{I}_0\}, \{L_1, \mathcal{I}_1\}, \dots, \{L_n, \mathcal{I}_n\}\};$ 
Tirage des sources;
 $L = \max_i(L_i);$ 
while  $batch < BATCH$  do
    if  $batch \% L == 0$  then
        | (Ré)initialisation des sources;
    else
        | if  $batch \% L = L_i$  then
            | Mise à jour  $\mathcal{I}_i$ ;
        | end
    end
end
    
```

Algorithm 1: *Algorithme de principe de la méthode AIWS. L'ensemble \mathcal{S} des scores \mathcal{I}_i est défini par l'utilisateur avec notamment, une longueur de cycle L_i . Le cycle principal de la simulation L est choisi comme le plus grand cycle parmi les scores. Toutes les L générations, les sources de la simulation sont de nouveau initialisées de manière à calculer la moyenne des importances de chaque score.*

Le calcul du flux adjoint IFP bouleverse la méthode des itérations de puissances du mode « CRITIQUE » utilisé dans TRIPOLI-4[®]. Aussi, lorsque le score IFP est activé, uniquement les scores IFP sont exploitables.

Un algorithme alternatif, basé sur un mode de simulation critique « non-modifié » a été proposé par B. C. Kiedrowski [28]. Cependant l'algorithme considéré ayant été développé dans le but de calculer des intégrales pondérées par le flux adjoint pour des perturbations premier ordre, il faut supposer :

$$\Phi_m^\dagger \simeq \frac{\langle \Phi^\dagger \Phi \rangle_m}{\langle 1, \Phi \rangle_m} \quad (\text{II.41})$$

Ce qui implique que ni le flux adjoint, ni le flux direct ne varient de manière trop importante dans la maille d'intégration m , notamment les flux direct et adjoint doivent être considérés comme isotropes. Les illustrations présentes dans de ce chapitre montreront que cette hypothèse n'est pas toujours vérifiée.

II.B.1.ii Précisions sur les Estimateurs

Selon le nombre de processeurs utilisés, le calcul du flux adjoint et de son incertitude statistique pourrait être implémenté rigoureusement de deux manières différentes :

- En mono-processeur, à chaque maille m d'un score correspond un estimateur statistique du flux adjoint. Pour toute source i initialisée dans une maille m du score, le code va produire, pour chaque cycle de longueur L demandé, une valeur $\tilde{w}_i^{\dagger L}$ qui correspond au nombre moyen de fissions asymptotiques d'une source. Le flux adjoint dans la maille m , \mathcal{I}_m^L et sa variance $\sigma^2[\mathcal{I}_m^L]$ s'expriment alors :

$$\mathcal{I}_m^L = \mathbb{E} \left[\sum_i \tilde{w}_i^{\dagger L} \prod_{j=1}^L k_j \right] \quad (\text{II.42})$$

$$\sigma^2[\mathcal{I}_m^L] = \sigma^2 \left[\sum_i \tilde{w}_i^{\dagger L} \prod_{j=1}^L k_j \right] \quad (\text{II.43})$$

Lorsque la distribution des sources est suffisamment dense dans la maille m , elle n'est pas en pratique source d'incertitude. Il est donc conseillé de choisir un nombre élevé de particules par

génération de manière à ce que les sources soient uniformément réparties dans les mailles de chaque score. L'incertitude calculée correspond à l'écart type de la moyenne des fissions produites par les sources de la maille à la fin de chaque cycle.

- En multiprocesseur, il est possible de supprimer l'hypothèse sur la densité des sources, et de rassembler les moyennes de chaque score indépendamment pour recalculer un écart type. Ceci n'a pas été programmé en pratique car il faut pouvoir assurer un score convenable même dans le cas d'une simulation très peu parallélisée.

II.B.1.iii Calcul du Taux Total Adjoint

S'il est possible de calculer des intégrales du type $\langle \Phi^\dagger, S \rangle$, nous avons aussi introduit la possibilité d'estimer des intégrales du type,

$$\langle \Phi^\dagger(\epsilon), \Sigma_t(\epsilon)S(\epsilon) \rangle \quad (\text{II.44})$$

où Σ_t est la section efficace totale du milieu au point ϵ . Le choix de ce type de score est fait au moment de sa définition dans le jeu de données. On accède au taux total adjoint, $\Sigma_t \Phi^\dagger$, en créant une source uniforme sur l'espace \mathcal{E} . Dans l'absolu, tout opérateur dont on peut connaître la valeur en début de simulation peut être implémenté de manière similaire.

II.B.2 Choix des Paramètres de Simulation

La qualité d'un calcul de flux adjoint dans TRIPOLI-4[®] dépend de plusieurs paramètres qu'il est essentiel de bien maîtriser :

- La définition des sources et des scores. En effet, ce sont les sources qui conditionnent les points de l'espace des phases où l'on souhaite calculer le flux adjoint. Ces sources doivent impérativement être en accord avec le maillage demandé pour les scores flux adjoint.
- La longueur du cycle. Soit le nombre de générations latentes entre le moment où la source est générée et où les fissions engendrées par cette source initiale sont comptabilisées. Bien que le nombre de générations à effectuer dans un cycle soit théoriquement infini, en pratique, 5 à 20 générations sont suffisantes [28].

Si le choix des sources impute à l'utilisateur en fonction de l'application recherchée, nous avons implémenté dans TRIPOLI-4[®] la possibilité d'analyser la convergence d'un flux adjoint en fonction de la longueur du cycle via une analyse d'entropie afin d'ajuster correctement la longueur du cycle.

II.B.2.i Définition des Sources, des Scores

Il a été brièvement signalé ci-dessus que la définition des sources S conditionne la pertinence d'un calcul AIWS. En effet, les sorties produites par le code vont correspondre aux intégrales sur l'espace des phases restreint à la maille m , du flux adjoint Φ^\dagger par la source S :

$$\langle \Phi^\dagger, S \rangle_m \quad (\text{II.45})$$

Si l'on cherche à évaluer le flux adjoint angulaire $\Phi^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ en un point \vec{r} , à une énergie E et dans la direction $\hat{\Omega}$, il faut créer une source angulaire en \vec{r} , d'énergie E et de direction $\hat{\Omega}$. La simulation donnera accès au flux adjoint $\Phi^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ si, et seulement si, le score demandé ne contient que cette source – ou bien que cette source est isolée dans une maille de ce score. Il faut noter ici la puissance du principe de IFP qui nous permet d'estimer le flux adjoint directement en un point, chose généralement impossible en Monte Carlo (*cf.* Sec. III.C.1) où tout score doit être défini sur un intervalle de l'espace des phases. Pour estimer le flux scalaire adjoint,

$$\Phi^\dagger(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \Phi^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) d^2\hat{\Omega} \quad (\text{II.46})$$

défini comme l'intégrale du flux angulaire sur l'ensemble des directions possibles, il suffit de créer un ensemble de sources au point (\vec{r}, E) distribuées angulairement de manière isotrope. Pour estimer le flux scalaire adjoint multigroupe d'un groupe g , d'énergie $E \in [E_{g+1}, E_g[$, (*i.e.* de léthargie $u \in [u_{g+1}, u_g[$),

$$\Phi_g^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{u_{g+1} - u_g} \int_{u_g}^{u_{g+1}} \Phi^\dagger(\vec{r}, u) du \quad (\text{II.47})$$

défini comme l'intégrale du flux scalaire sur le groupe de léthargie g , il suffit de créer un ensemble de sources au point \vec{r} distribuées angulairement de manière isotrope et de manière uniforme en léthargie dans l'intervalle $[u_g, u_{g+1}[$. Il suffit ensuite de créer le score associé sur un maillage contenant ce groupe. Pour estimer le flux scalaire adjoint multigroupe dans un volume v ,

$$\Phi_{g,v}^\dagger = \int_{\vec{r} \in v} \Phi_g^\dagger(\vec{r}) d^3 \vec{r} \quad (\text{II.48})$$

défini comme l'intégrale sur le volume v du flux scalaire multigroupe, il suffit de créer un ensemble de sources distribuées de manière uniforme dans le volume v , angulairement de manière isotrope et de manière uniforme en léthargie dans l'intervalle d'énergie considéré. Le score doit être associé à un maillage distinguant ce groupe et ce volume. Le même raisonnement peut être suivi dans le cas où l'on souhaiterait obtenir un flux angulaire dans un certain angle solide.

A ces lignes de conduite, il faut adjoindre quelques remarques :

- Dans le cadre des calculs de spectres adjoints, bien qu'il soit possible de définir une source uniformément répartie en léthargie entre les bornes limites de la simulation, il est souvent bien plus efficace de définir une source uniforme en léthargie dans chaque groupe d'énergie. Les scores obtenus auront une statistique équivalente dans chacun des groupes, pourvu que le maillage du score soit défini sur les mêmes groupes d'énergie. Le même principe peut être appliqué aux autres dimensions, en particulier si un score flux adjoint est demandé dans un petit volume spatial. La statistique obtenue sera dépendante du nombre de sources tirées dans chaque maille, de la magnitude du flux adjoint, et bien entendu du temps alloué à la simulation.
- Dans le cadre de l'estimation de score intégraux de type :

$$\langle \Phi^\dagger, S \rangle_m \quad (\text{II.49})$$

où S ne serait pas définie par l'utilisateur mais issue d'un calcul préalable, il est par exemple possible, d'estimer $\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle_m$, en stockant les sources de fissions $\mathcal{P}\Phi$ dans une première simulation⁹ pour les relancer dans une simulation AIWS. Ou encore, pour estimer $\langle \Phi^\dagger, \Sigma_t \Phi \rangle_m$, il est possible de stocker toutes les collisions en se limitant aux mailles m pour les relancer ensuite dans une simulation AIWS.

II.B.2.ii Définition de la Longueur du Cycle

La définition de la longueur du cycle est un problème de convergence atypique. En effet, lors d'une simulation AIWS deux effets contraires s'opposent à la convergence des estimateurs :

- Plus le cycle est élevé, moins le biais engendré par l'utilisation d'un cycle fini est faible.
- Plus le cycle est élevé, plus la probabilité qu'une lignée engendrée par un neutron source initial survive en fin de cycle est faible. Ces lignées qui disparaissent sont autant d'informations qui ne sont pas utilisées efficacement dans la production d'un score.

⁹Le code TRIPOLI-4[®] permet de stocker et de relancer de manière simple les sources normalisées $\frac{\mathcal{P}\Phi}{k}$. Il offre aussi de nombreuses autres possibilités de stockage pouvant permettre l'estimation de nombreux types d'intégrales.

Il est possible de comprendre le phénomène très simplement : supposons que l'on simule le parcours de N neutrons sources. A chaque génération il existe une probabilité moyenne p_a qu'un neutron ne donne pas lieu à des fissions lors de la génération courante (il peut fuir, être absorbé, avoir un poids statistique trop faible, etc.). Le nombre de lignées perdues à la première génération est donc de $p_a N$ environ. A la seconde génération, le nombre de lignées perdues serait $p_a^2 N$ si le processus de normalisation de la source ne venait pas multiplier les neutrons de certaines lignées. Dans les premiers temps de la simulation, il y a donc une perte des lignées, puis du fait de la normalisation (*i.e.* de la multiplication des descendants des autres lignées), on observe une stabilisation du nombre de lignées. Il en ressort que pour toute simulation il existe une longueur de cycle optimale assurant la convergence la plus rapide. Lorsqu'un cycle est répété avec les mêmes sources de nombreuses fois, on augmente le recouvrement moyen des lignées en fin de simulation.

Vitesse de Convergence La convergence du flux adjoint est essentiellement liée à la convergence de la suite des k_g qui viennent normaliser l'ensemble des sources de fission à l'issue de chaque génération g du procédé des itérations de la puissance. A ce titre, elle est soumise aux mêmes tendances : si l'on suppose que la source S dont on souhaite calculer l'importance se décompose sur l'ensemble des modes propres $\Phi^{(n)}$ (*cf.* Sec. II.A) de la façon suivante,

$$S \sim \sum_n \alpha^{(n)} \Phi^{(n)} \quad (\text{II.50})$$

alors sa vitesse de convergence dépend des coefficients $\alpha^{(n)}$ de projection de la source sur la base des vecteurs propres et des différents ratios de valeurs propres des différents modes $\frac{k^{(n)}}{k^{(0)}}$:

- Si le problème comporte des symétries, tous les modes impairs disparaissent et la convergence des IFP en fonction du cycle L est accélérée. Les symétries sont donc toujours à privilégier.
- Selon la source, les harmoniques excités vont être très différents, et peuvent conduire à des convergences très lentes lorsque les ratios de valeurs propres (aussi appelés ratios de dominance) sont proches de l'unité.

Estimer la Convergence Pour mesurer et visualiser le faible écart de convergence existant entre deux flux adjoints calculés avec des longueurs de cycles différentes. Il est possible d'estimer l'entropie relative $D(p||q)$ (*cf.* théorie de l'information [29]) entre deux distributions de probabilités p et q (*e.g.* entre deux flux normalisés). Cette entropie relative traduit la distance¹⁰ entre p et q et devient nulle lorsque $p = q$:

$$D(p||q) = \sum_x p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \quad (\text{II.51})$$

Dans notre implémentation, à chaque source i créée en début de simulation et à chaque longueur de cycle L , va correspondre une valeur d'importance $w_i^{\dagger L}$. En définissant,

$$p(x_i) = \frac{w_i^{\dagger L}}{\sum_j w_j^{\dagger L}}, \quad (\text{II.52})$$

$$q(x_i) = \frac{w_i^{\dagger L'}}{\sum_j w_j^{\dagger L'}}, \quad (\text{II.53})$$

¹⁰Attention, l'entropie relative n'est pas une vraie distance puisque la distance n'est pas identique si l'on inverse p et q : $D(p||q) \neq D(q||p)$.

l'entropie relative $D(p||q)$ entre les deux cycles L et L' s'obtient de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 D(p||q) &= \sum_i \frac{w_i^{\dagger L}}{\sum_j w_j^{\dagger L}} \log \left(\frac{\sum_j w_j^{\dagger L'} w_i^{\dagger L}}{w_i^{\dagger L'} \sum_j w_j^{\dagger L}} \right) \\
 &= \log \left(\sum_j w_j^{\dagger L'} \right) - \log \left(\sum_j w_j^{\dagger L} \right) + \frac{\sum_j w_j^{\dagger L'} \log \frac{w_j^{\dagger L}}{w_j^{\dagger L'}}}{\sum_j w_j^{\dagger L}}
 \end{aligned} \tag{II.54}$$

Supposons que l'utilisateur ait demandé des scores de longueurs de cycle différentes. Alors, parmi les distributions d'importance, celle que l'on peut supposer la plus proche de la distribution asymptotique de référence est celle de plus grande longueur de cycle. Estimer la convergence des distributions consiste donc à calculer pour chaque cycle L' , les distances (ou les entropies relatives) entre les différentes distributions et la distribution asymptotique de référence.

De manière à donner plus de sens à $D(p||q)$, les résultats sont donnés par TRIPOLI-4[®] en % de l'entropie absolue $H(p)$ de p :

$$\begin{aligned}
 H(p) &= \sum_x p(x) \log \frac{1}{p(x)} \\
 &= \log \left(\sum_i w_i^{\dagger L} \right) - \frac{\sum_i w_i^{\dagger L} \log w_i^{\dagger L}}{\sum_i w_i^{\dagger L}}
 \end{aligned} \tag{II.55}$$

Le tracé de $D(p||q)$ en % doit ainsi permettre à l'utilisateur de déterminer la longueur de cycle optimale. Cependant celui-ci doit être attentif à ce que la quantité d'information « oubliée » dans le calcul de chaque $D(p||q)$ soit négligeable : en d'autre terme, il faut que la simulation réalise un nombre important de cycles IFP afin que le maximum possible de lignées aient eu, au moins une fois au cours de l'un des cycles, des descendants. Les lignées, qui, malgré une convergence poussée des calculs seraient toujours absentes au bout du plus long cycle pourront être négligées car elles correspondent à une importance nulle¹¹. De manière générale, il convient d'attendre l'obtention d'une belle figure de convergence avant de décréter visuellement la convergence, il est également possible de s'aider de la convergence de l'entropie absolue.

TRIPOLI-4[®] calculera, de manière automatique dans une simulation monoprocasseur comportant des longueurs de cycles différentes, la valeur de l'entropie absolue et relative pour chaque cycle exigé par l'un des scores, ainsi qu'une valeur indiquant le nombre de lignées recouvertes (*i.e.* qui ont au moins eu un descendant à la fin de l'un des cycles simulés). Dans le cadre d'une analyse de convergence, il est conseillé de choisir une source représentative de la simulation à réaliser et un nombre de particules par génération de l'ordre de 100 ou 1000 neutrons¹².

Dans la figure II.6, nous rassemblons les convergences d'entropie de plusieurs benchmarks relativement simples. Les longueurs de cycle idéales semblent toutes se situer aux alentours de 4 ou 6 générations, voire parfois moins. L'application de la méthode sur un cœur plus complexe comme un réacteur de type N4-1450 MWe (Fig. II.7), donne des résultats très différents, avec une longueur de cycle de 30 ou 40 générations selon la distribution des sources. Cela traduit la convergence très lente des sources de fissions dans un cœur de grande taille, que l'on peut attribuer à un faible couplage spatial, lui même lié au rapprochement des premières harmoniques du flux. Nous avons remarqué sur le cas du N4 que selon la source, les harmoniques sont excitées de manières différentes, ce qui conduit à une longueur différente du cycle IFP.

¹¹Une importance, et donc un flux adjoint nul, peut par exemple être obtenu lorsqu'une source pointe vers l'extérieur du réacteur et se trouve non loin d'une frontière; le neutron n'a d'autre choix que de fuir et ne peut pas contribuer à la puissance asymptotique du cœur.

¹²Choisir plus de neutrons ne conduira pas nécessairement à de meilleurs résultats mais augmentera nettement le temps de calcul.

Cette méthode est une méthode continue en ce sens qu'elle n'utilise pas le maillage demandé pour les scores. Elle se distingue ainsi des autres méthodes d'analyse d'entropie mises en place pour déterminer la convergence de la distribution des sources de fissions [30] dans une simulation directe critique.

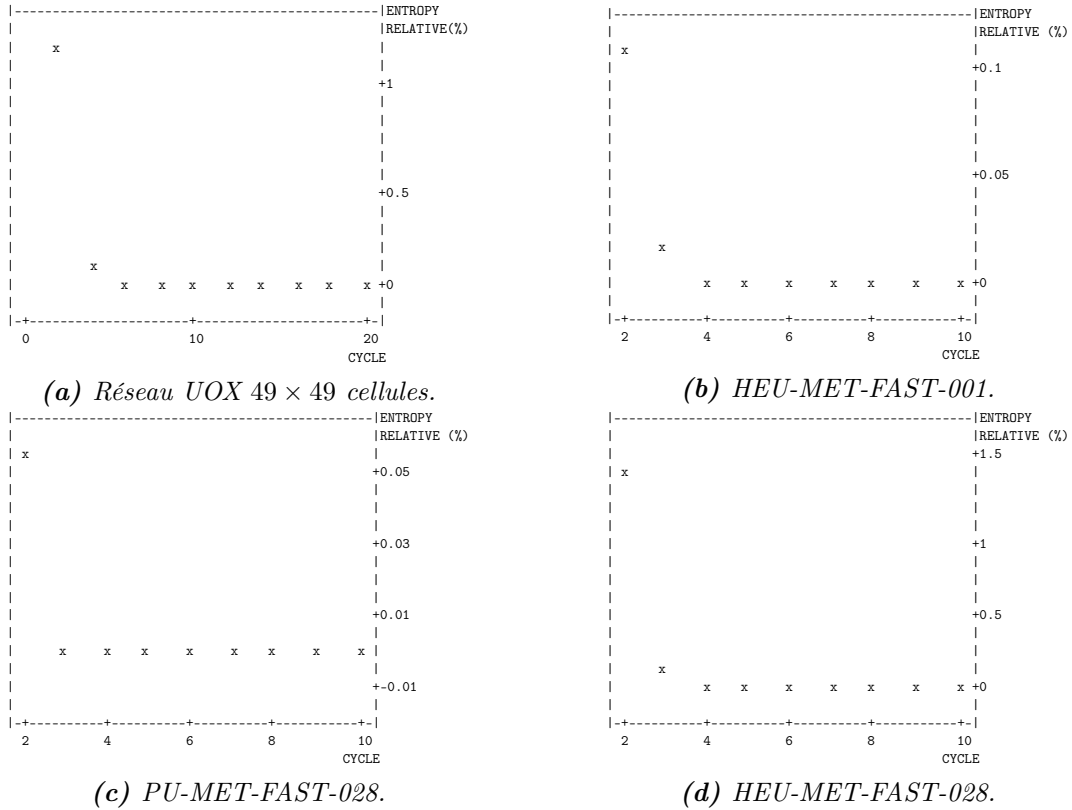


FIGURE II.6 – Entropie relative permettant de déterminer la longueur du cycle IFP optimal sur un ensemble de benchmarks simples. Ces graphiques correspondent aux sorties brutes du code. L'implémentation du tracé des points en mode ASCII est un ajout de cette thèse au code TRIPOLI-4[®] destiné à faciliter le réglage d'une simulation Monte Carlo.

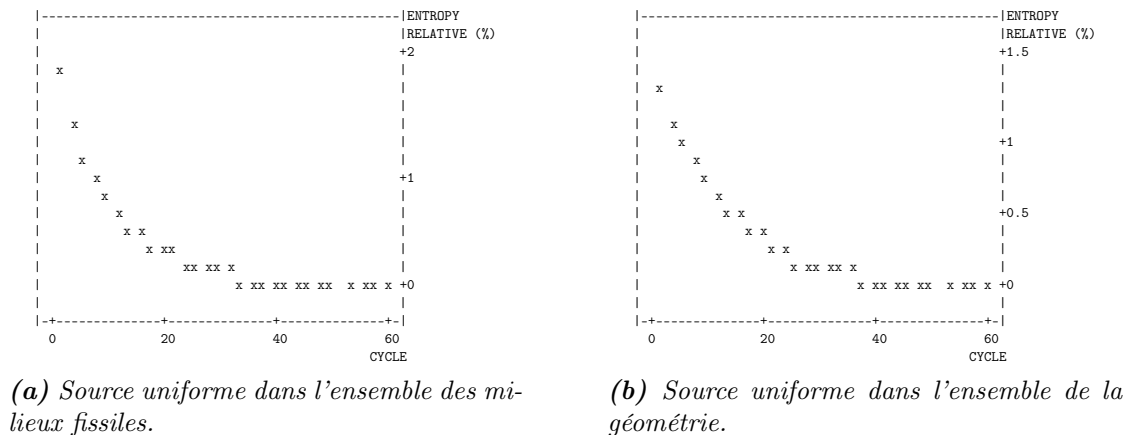


FIGURE II.7 – Entropie relative permettant de déterminer la longueur théorique du cycle IFP pour un cœur du parc français du palier N4 selon deux types de sources. Ces graphiques correspondent aux sorties brutes du code. L'implémentation du tracé des points en mode ASCII est un ajout de cette thèse au code TRIPOLI-4[®] destiné à faciliter le réglage d'une simulation Monte Carlo.

II.B.2.iii Seuil de la Roulette-Russe

Nous avons évoqué (*cf.* Sec. II.A.2.ii) que lors du transport non-analogue des neutrons, le poids statistique w de chacun d’entre eux variait au cours de la simulation. L’un des paramètres majeurs qui régule la distribution des poids des neutrons est le seuil r de la roulette russe. En référence à l’algorithme 2, lorsque le poids du neutron est inférieur au seuil r , le code tire un nombre aléatoire entre 0 et 1 qui va lui permettre de décider de garder ou non le neutron, si ce nombre ξ est inférieur au poids w du neutron, celui est relancé avec un poids égal à 1, sinon, il est tué. Le poids des neutrons est ainsi conservé en moyenne. Intuitivement, ce procédé rassemble le poids des neutrons peu importants dans un unique neutron.

```

if  $w < r$  then
   $\xi \in [0; 1[;$ 
  if  $\xi < w$  then
     $w = 1$ 
  else
     $w = 0$ 
  end
end

```

Algorithm 2: Principe de la « Roulette Russe ».

Dans l’estimation d’une importance très faible, la roulette russe aura pour effet d’augmenter le nombre de neutrons perdus à chaque génération, et de dégrader la statistique. Le réglage par défaut de TRIPOLI-4[®], fixé à $r = 0.8$, n’est donc plus optimum, et il convient d’en abaisser le seuil comme le démontre la figure de mérite¹³ d’un exemple simple (*cf.* Fig. II.8). Dans les cas que nous avons étudiés, il fallait choisir une valeur de seuil de roulette proche de 0.

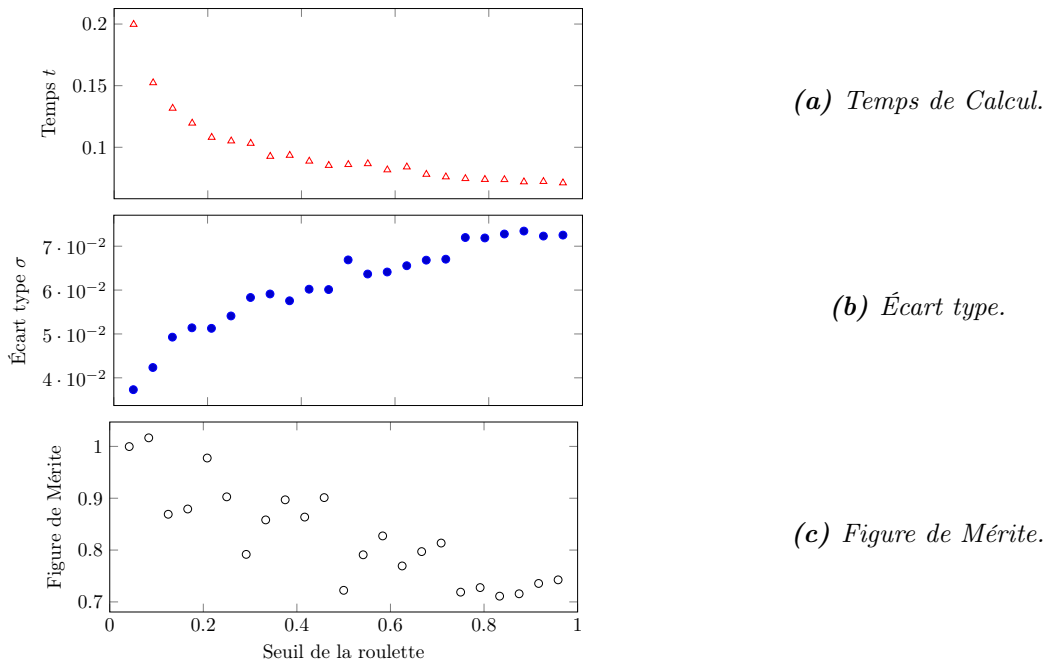


FIGURE II.8 – Impact du seuil de la roulette russe sur la méthode AIWS.

¹³La figure de mérite permet d’analyser l’efficacité d’une méthode Monte Carlo en analysant l’inverse du produit « variance » × « temps ».

II.B.3 Vérification & Validation

Nous avons évoqué dans l'introduction de ce document (*cf.* Sec. I.A.1.iii) les processus de *Vérification* et *Validation*. Dans l'objectif de fournir un code et des méthodes de qualité, ces processus permettent de démontrer que le code applique le modèle et résout correctement les équations intentées par le programmeur, avec le bon niveau de précision. La partie qui va suivre permettra de vérifier et valider l'implémentation des scores IFP sur trois aspects simplifiés :

- La comparaison des flux direct et adjoint angulaires mono-énergétiques, liés par une relation simple.
- Une comparaison des sources adjointes obtenues par la méthode IFP (AIWS) et par une méthode de type « matrice de fission ».
- Des comparaisons de calculs TRIPOLI-4[®] IFP « multigroupe » et APOLL02 (Méthode des Caractéristiques – MOC) [31] sur le même maillage énergétique en utilisant les mêmes sections efficaces multigroupes. La méthode MOC est ici considérée comme une référence déjà dûment validée par ses développeurs.

Ces trois thématiques sont pour nous des étapes de *vérification* à la limite de la validation car elles permettent, moyennant certaines hypothèses, de comparer une méthode à une autre avec conservation du modèle physique : seule la méthode de résolution diffère.

Des valeurs de référence vont être opposées à des valeurs issues des calculs IFP à vérifier et/ou valider. Pour s'assurer que l'écart calculé reste « cohérent », dans les limites des incertitudes statistiques, nous analyserons bien souvent un écart rapporté à l'écart type de l'expression, soit, si A et B sont deux populations statistiques identiquement distribuées, respectant une loi normale, non-corrélées, dont on souhaite analyser la différence, il est possible de s'assurer que la valeur,

$$\frac{\bar{A} - \bar{B}}{\sqrt{\sigma^2[\bar{A}] + \sigma^2[\bar{B}]}} \quad (\text{II.56})$$

reste comprise dans $[-1; 1]$ dans 67 % des cas (soit un écart type égal à 1), et dans $[-3; 3]$ dans 99.7 % des cas. Ceci équivaut à dire, dans notre définition, que les deux calculs sont « cohérents » pour le niveau de précision atteint. Un autre niveau de précision pourrait, hypothétiquement, lever la cohérence en identifiant des biais « résiduels ».

II.B.3.i Flux Angulaires Monocinétiques Direct et Adjoint

Il a été rappelé au début de ce chapitre que lorsque l'équation du transport est réduite à un groupe d'énergie, ses opérateurs sont « auto-adjoints » et que par conséquent une relation simple est vérifiée entre flux adjoint et flux direct en tout point (\vec{r}, E, Ω) :

$$\forall(\vec{r}, E, \Omega) \in \mathcal{E}, \quad \Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \Phi^\dagger(\vec{r}, E, -\hat{\Omega}) \quad (\text{II.57})$$

L'exemple qui va suivre traite une géométrie 1D d'axe X (*cf.* Fig. II.9). Notons que pour le code Monte Carlo TRIPOLI-4[®], il s'agit en fait d'une géométrie 3D cartésienne (X, Y, Z) réfléchie, prenant en compte les symétries, donc définie uniquement sur $X \in [0; 30]$. La simulation utilise un unique groupe d'énergie via le mode multigroupe de TRIPOLI-4[®] et est constituée de deux milieux : un milieu combustible centré en $X \in [0; 20]$ (type combustible UOX, pour *Uranium OXyde*), entouré d'un modérateur/réflécteur en $X \in [20; 30]$ et $X \in [-30; -20]$ (type aqueux).

- Le flux angulaire direct est calculé sur un maillage de 60 directions, θ , du repère sphérique via la définition d'un score angulaire à l'interface combustible-modérateur ($X = +20$ cm).
- Le flux angulaire adjoint est calculé par le placement d'une source isotrope au niveau de l'interface ($X = +20$ cm) et sur 60 mailles directionnelles englobant cette source. Ainsi on s'assure que dans chaque intervalle d'angle la densité d'émission de la source est constante.

Les résultats sont présentés figure II.9. Sur ce graphique en coordonnées polaires, on peut observer les valeurs obtenues pour le flux direct et le flux adjoint au niveau de l'interface UOX/EAU. Dans le cas du flux adjoint, afin de faciliter la comparaison entre flux, nous le représentons en fonction de $-\theta$. Les flux se superposent et leur écart n'excède jamais les 3σ d'erreur « autorisés » pour une précision atteinte de l'ordre de 0.2 %; en effet l'équation précédente nous donne aisément, en intégrant sur $\phi \in [0; \pi]$:

$$\begin{aligned} \forall(\vec{r}, E, \theta) \in \mathcal{E}, \quad \Phi(\vec{r}, E, \theta) &= \int_{\phi=0}^{\phi=\pi} \Phi(\vec{r}, E, \theta, \phi) d\phi \\ &= \int_{\phi=0}^{\phi=\pi} \Phi^\dagger(\vec{r}, E, -\theta, -\phi) d\phi \\ &= \Phi^\dagger(\vec{r}, E, -\theta) \end{aligned} \quad (\text{II.58})$$

L'écart type des erreurs est de 1.004, ce qui traduit un bon accord statistique pour l'ensemble des résultats et vérifie la bonne implémentation des scores angulaires adjoints IFP de la méthode AIWS dans le code TRIPOLI-4[®]. Par curiosité scientifique, on peut vérifier que les flux angulaires sortants du cœur, (*i.e.* $\theta < 90$), sont plus importants que les flux angulaires rentrants; on peut appliquer le raisonnement inverse pour les flux angulaires adjoints (en gardant en tête que le flux adjoint est représenté en fonction de $-\theta$).

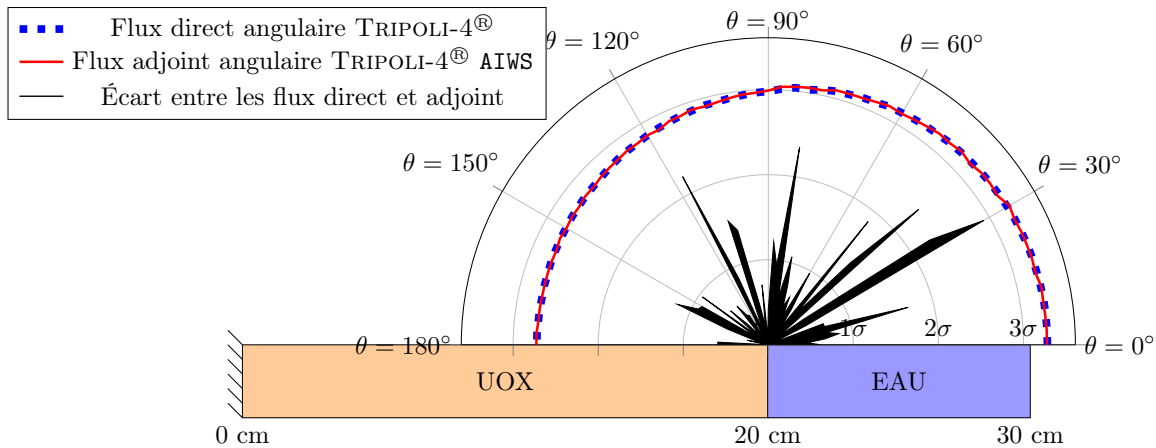


FIGURE II.9 – Comparaison des flux direct et adjoint angulaires, mono-cinétiques, à l'interface UOX/EAU; l'angle de la représentation $\theta \in [0; 2\pi[$ (mais représenté sur $[0; \pi[$ pour des raisons de symétrie) correspond à celui du repère sphérique classique. Dans ce graphique polaire, le module des points représente la valeur normalisée du flux (pour les courbes bleue et rouge). Le tracé noir correspond à la valeur absolue de l'écart entre les deux flux rapporté à leur incertitude combinée σ .

II.B.3.ii Flux Adjoint « Matrice de Fission » vs Flux Adjoint IFP

Comme nous l'avons évoqué au début de ce chapitre, les sources adjointes de fissions peuvent être obtenues via le calcul de la matrice de fission si celle-ci est suffisamment discrétisée en espace. Dans ce cas de validation, nous reprenons l'exemple précédent d'un demi-réacteur symétrique et homogène.

- Le calcul de la matrice de fission est réalisé par TRIPOLI-4[®] (insertion du mot clef `KIJ_MATRIX` dans le block `SIMULATION`) et le raffinement de la géométrie en 800 milieux homogènes. Une fois la matrice obtenue, celle-ci peut être directement exploitée par le logiciel libre OCTAVE [32] afin d'en calculer le mode fondamental « source » adjoint.
- Pour le calcul des sources adjointes de fission, rappelons que la méthode AIWS nous oblige en

premier lieu à définir judicieusement nos sources. De manière à calculer la source adjointe [12] :

$$S^\dagger(\vec{r}) = \int_{E', \hat{\Omega}} \frac{\chi_f(\vec{r}, E')}{4\pi} \Phi^\dagger(\vec{r}, E', \hat{\Omega}) d^2\hat{\Omega} dE' \quad (\text{II.59})$$

où :

$$\chi_f(\vec{r}, E') = \frac{\int_{E, \hat{\Omega}} \chi_f(\vec{r}, E \rightarrow E') \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) d^2\hat{\Omega} dE}{\int_{E, \hat{\Omega}} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) d^2\hat{\Omega} dE} \quad (\text{II.60})$$

il faut définir une source initiale au calcul IFP proportionnelle au spectre de fission $\chi_f(\vec{r}, E')$ pour que celui-ci soit implicitement contenu dans le calcul du flux adjoint. Ceci est possible par le biais d'un calcul préalable du spectre de fission total dans TRIPOLI-4[®] sur un maillage énergétique fin¹⁴ (on considère ici que le milieu étant homogène, le spectre de fission ne dépendra pas de l'espace). Ce premier résultat est alors utilisé afin de créer une source de densité homogène sur l'ensemble du réacteur et de distribution énergétique réintroduite égale, groupe par groupe, au spectre de fission moyen préalablement calculé.

La figure II.10 présente les résultats obtenus par la méthode IFP (pour 2, 3 ou 6 générations) ainsi que les résultats obtenus par le calcul du mode fondamental source de la matrice de fission. La comparaison est effectuée sur 40 mailles de l'axe X . Les écarts rapportés à l'incertitude de la valeur IFP sont tracés en fonction de l'ordonnée secondaire du graphique. Le phénomène de convergence des IFP en fonction du cycle s'observe à travers les écarts des deux calculs, ou bien par le tracé de l'entropie relative (cf. Fig. II.11) en fonction du cycle IFP. L'entropie indique un cycle convergé après la quatrième génération. On voit qu'en effectuant la vérification avec un cycle de 6 générations les écarts sont tous inférieurs à 3σ pour une précision atteinte de 0.2 %. L'écart type moyen des valeurs est de 0.95.

II.B.3.iii Flux Adjoint IFP multigroupe vs APOLL02-MOC

Afin de proposer une vérification plus poussée des développements de ce chapitre, il est possible de traiter des exemples plus complexes. Nous proposons une comparaison de spectres adjoints IFP et APOLL02-MOC. Pour que celle-ci soit le plus juste possible, le code TRIPOLI-4[®] doit utiliser les mêmes sections multigroupes que celles utilisées dans le solveur MOC. Nous avons choisi de traiter une cellule à spectre plus rapide et de type combustible *Mixed uranium OXyde* (MOX) gainé inox environné de sodium (cf. Fig. II.12) en suivant ces différentes étapes :

1. Réaliser un modèle APOLL02 de la cellule.
2. Calculer le flux adjoint moyen dans la pastille combustible via le solveur MOC
3. Exporter les sections macroscopiques autoprotégées de chaque milieu dans le format APOTRIM, qui peut être relu par TRIPOLI-4[®]
4. Réaliser le même modèle dans TRIPOLI-4[®], utilisant le fichier APOTRIM. Les sources doivent être définies uniformément dans la pastille.
5. Calculer le flux adjoint IFP et le taux de réaction total adjoint avec la méthode AIWS.

Les résultats obtenus pour le flux adjoint moyen dans la pastille combustible sont présentés figure II.13. On observe un très bon accord. Une petite discordance est visible dans l'un des groupes, vers 36 eV, étudier son origine nécessiterait une analyse plus précise des sections à cette énergie. Il est possible que la réutilisation des sections P_n par TRIPOLI-4[®] ne soit pas exactement équivalente au traitement APOLL02 ; nous avons pu observer un tel phénomène sur d'autres calculs. La figure II.14, où sont tracés les taux de réaction totaux adjoints, présente également un très bon accord.

¹⁴Pour cette validation nous avons utilisé le maillage 1968 groupes des codes ECCO [33] / ERANOS [34].

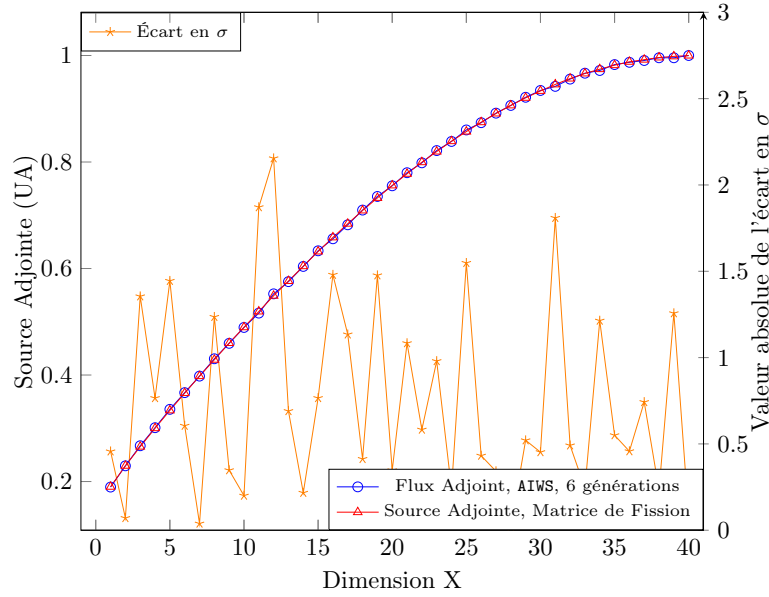
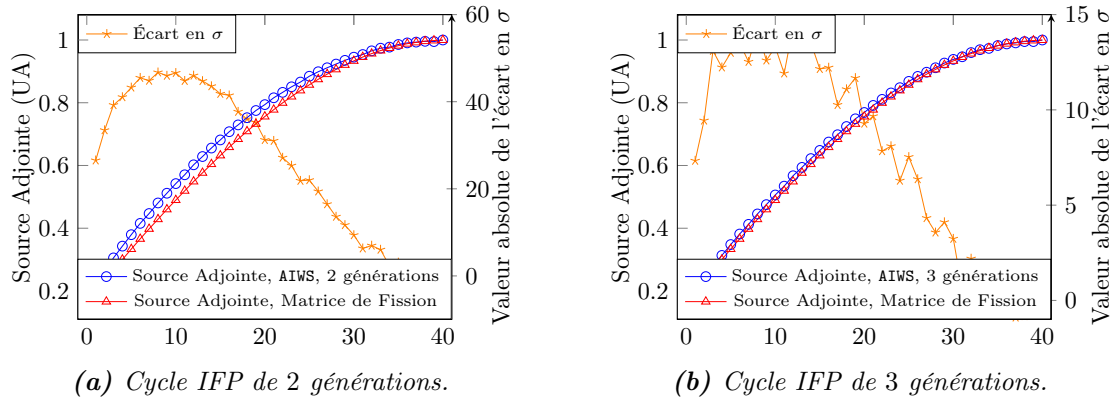


FIGURE II.10 – Vérification du calcul de flux adjoint : comparaison des sources adjointe AIWS et « matrice de fission », réacteur 1D homogène.

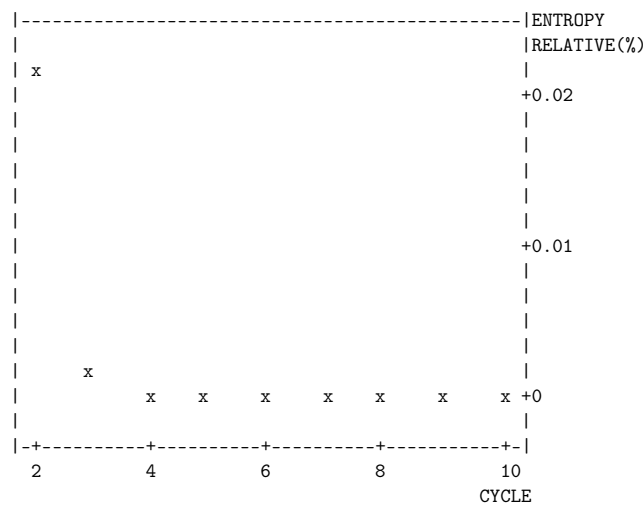


FIGURE II.11 – Vérification du calcul de flux adjoint : détermination de la longueur de cycle optimale par le tracé de l'entropie relative.

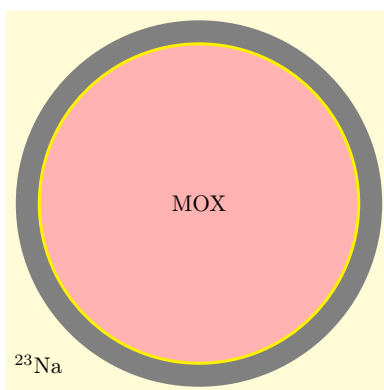


FIGURE II.12 – Cellule MOX de type « rapide ». Cette cellule est placée dans un réseau infini de cellules semblables. La dimension axiale est infinie.

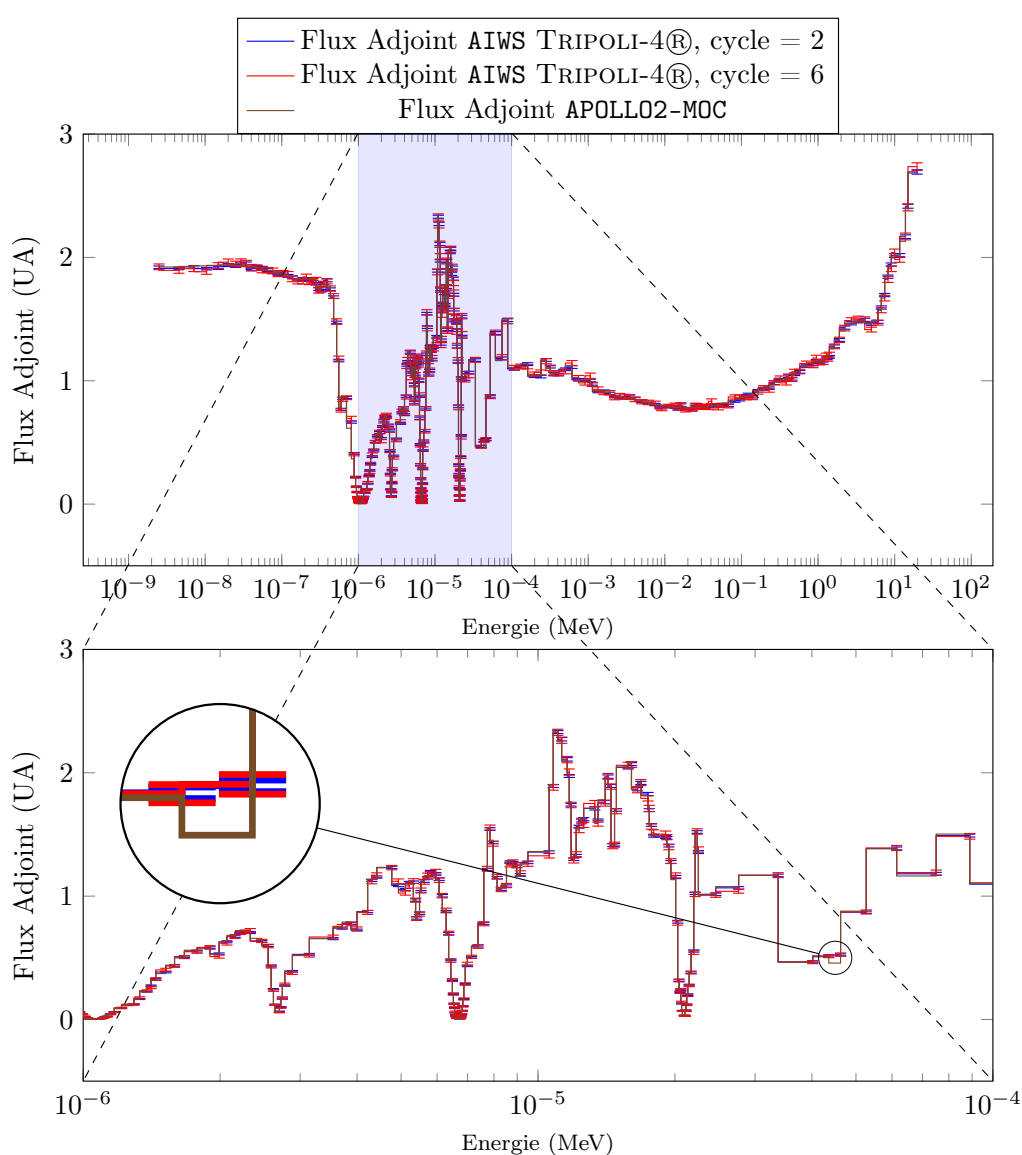


FIGURE II.13 – Réseau Infini de type Réacteur à Neutrons Rapide (RNR)/MOX : Flux adjoints TRIPOLI-4[®] vs APOLLO2-MOC. Même sections efficaces multigroupes dans TRIPOLI-4[®] et APOLLO2.

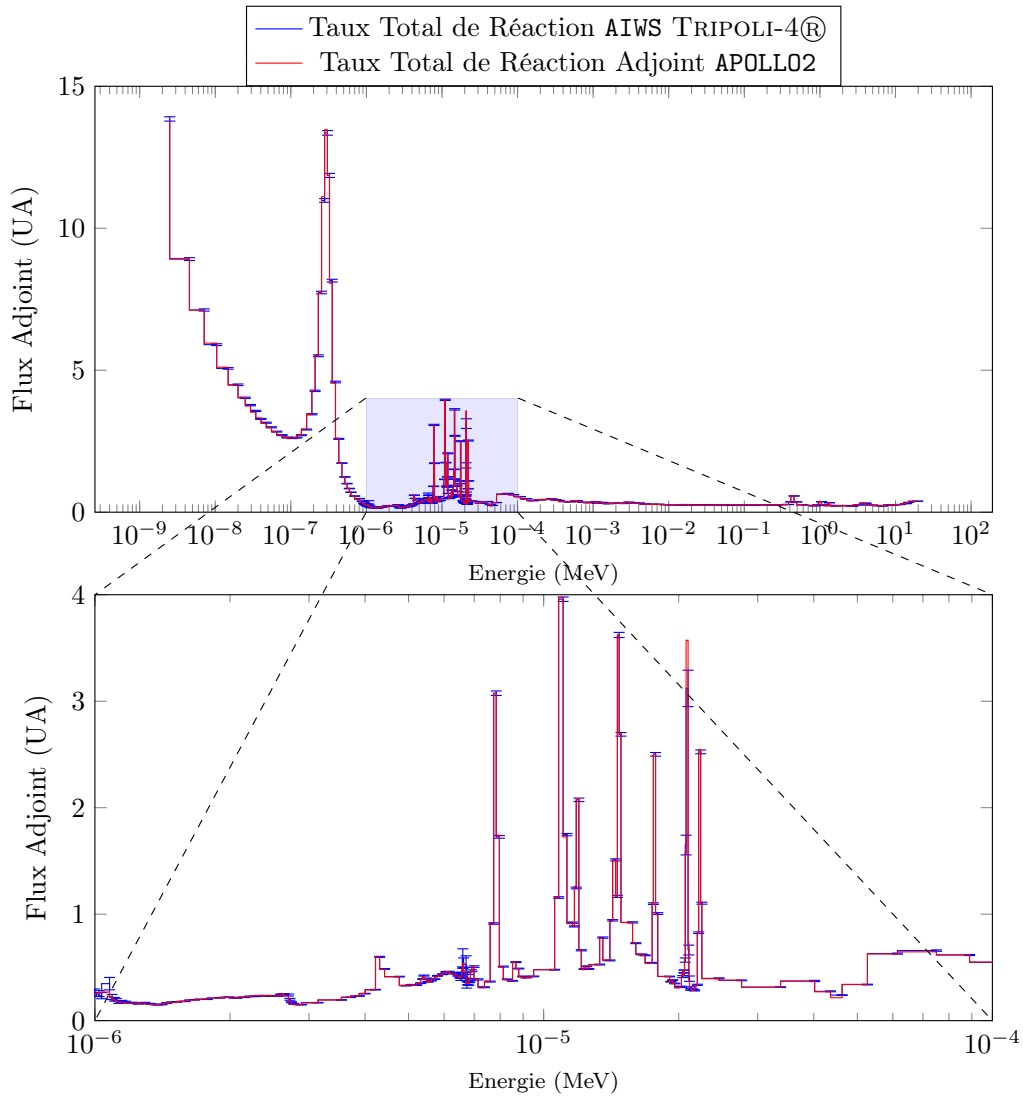


FIGURE II.14 – Réseau Infini de type Réacteur à Neutrons Rapide (RNR)/MOX : Taux Totaux de Réaction Adjointes TRIPOLI-4[®] vs APOLLO2-MOC. Même sections efficaces multigroupes dans TRIPOLI-4[®] et APOLLO2.

II.C Illustrations – Qualification

Faisant suite aux processus de *vérification* et de *validation* des codes, le processus de *qualification* confronte le code à la réalité. Or, les publications faisant état de mesures du flux adjoint sont peu nombreuses [35] et les valeurs mesurées difficilement accessibles. C’est pourquoi dans cette partie, nous présenterons un cas d’illustration permettant de mettre en avant le sens physique du flux adjoint ainsi qu’un cas de validation indirecte obtenue par la mesure oscillante de différents échantillons dans la maquette DIMPLE. Ces analyses et cette *qualification* démontrent aussi l’avantage que procure une méthode de référence vis-à-vis des méthodes déterministes.

II.C.1 Illustration : Validation des Codes Déterministes, Cellule UOX

II.C.1.i Spectre Adjoint Moyen dans une pastille UOX

Sur un réseau infini de type combustible *Uranium OXyde* (UOX) gainé zircaloy et environné d’eau légère (*cf.* Fig. II.15), nous calculons avec TRIPOLI-4[®] un flux (ou plutôt un spectre) adjoint moyen dans la pastille de combustible en utilisant les sections ponctuelles de référence. Le même travail est

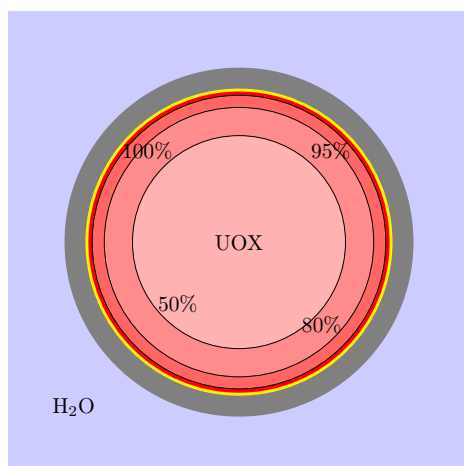


FIGURE II.15 – Réseau Infini de type Réacteur à Eau Légère (REL)/UOX. Les pourcentages indiquent le découpage de la pastille combustible en fonction du volume total de la pastille. La pastille est ici découpée en 4 couronnes. Ces quatre couronnes sont absentes du jeu de données TRIPOLI-4[®], mais sont indispensables à la prise en compte de l'autoprotection spatiale dans le schéma de calcul APOLL02-MOC.

réalisé via le code APOLL02 et l'utilisation d'un solveur MOC 2D couplé au maillage optimisé SHEM à 281 groupes d'énergie. La figure II.16 présente la comparaison des flux adjoints obtenus par les deux codes : sur le grossissement en énergie proposé, on observe une très bonne cohérence entre le calcul Monte Carlo continu et le calcul déterministe multigroupe. Notre sens du détail nous fait cependant remarquer que deux écarts significatifs sont visibles :

- Le premier est visible sur le grossissement de la figure II.16 vers 36 eV. Afin de comprendre l'origine de cet écart, en arrière plan de ces résultats a été tracé la section efficace de capture d'un isotope extrêmement résonnant : l' ^{238}U . La pastille UOX étant en majorité composée de cet élément, son influence est indéniable, qui plus est au niveau de ses grandes résonances qui atteignent les sommets de la capture neutronique. Afin d'expliquer l'écart apparaissant au niveau de la troisième grande résonance, analysons la construction du maillage SHEM-281 [36]. Ce maillage est constitué de groupes fins maillant les deux premières résonances de l' ^{238}U et pour lesquelles aucune auto-protection n'est réalisée, puis de groupes plus larges. C'est précisément au niveau du groupe plus large correspondant à la troisième résonance de l'uranium que la différence apparaît. Il s'agit du problème majeur du calcul de flux adjoint déterministe dont les sections sont auto-protégées par un flux fin direct et non par un flux fin adjoint. Le problème est d'ailleurs exacerbé lorsque l'on compare les taux de réaction totaux adjoints qui sont tracés figure II.17, puisque la « mauvaise » section est alors réinjectée, une seconde fois, dans le résultat. Pour contourner ce problème, il existe deux solutions non appliquées ici, la première consisterait à mailler plus finement les autres résonances de l' ^{238}U (cf. maillage SHEM évolué [37]), et la deuxième, consisterait à s'inspirer du calcul des sections efficaces bilinéaires [38] via une auto-protection différente des sections directes et adjointes.
- Le deuxième écart est visible dans la partie haute du spectre de la figure II.16 où le résultat APOLL02-MOC sous-estime la valeur. Cet effet est aussi une conséquence d'une auto-protection non-adéquate : en effet, à haute énergie, le phénomène d'auto-protection va tirer la section totale vers le bas (car elle est pondérée par le flux direct qui décroît) et conduire à une sous-estimation lors du calcul du flux adjoint.

Ces différences peuvent conduire à de légers écarts lors de l'estimation de quantités pondérées par le flux adjoint.

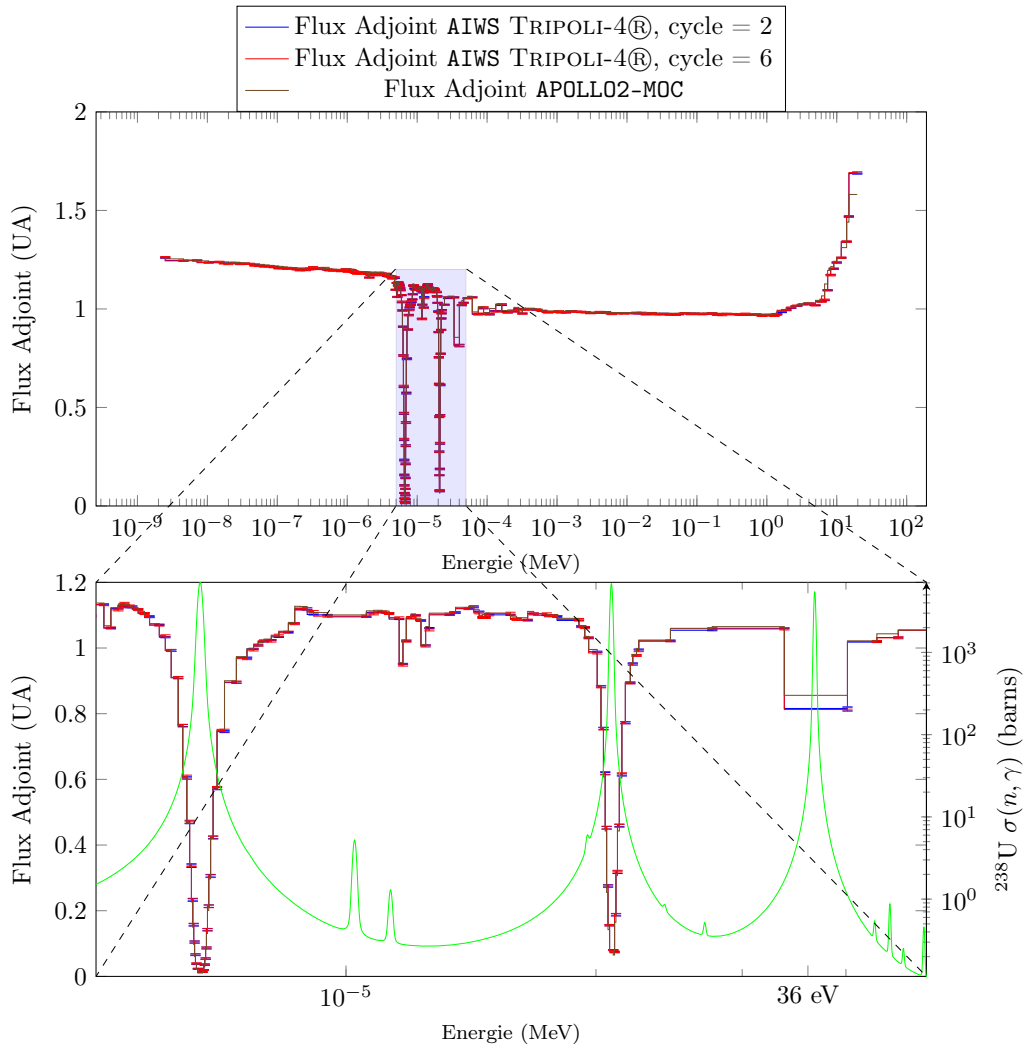


FIGURE II.16 – Réseau Infini de type Réacteur à Eau Légère (REL)/UOX : Flux adjoints TRIPOLI-4® vs APOLLO2-MOC sur le maillage SHEM-281. Est aussi tracée la section de capture (n, γ) de l' ^{238}U sur un maillage fin.

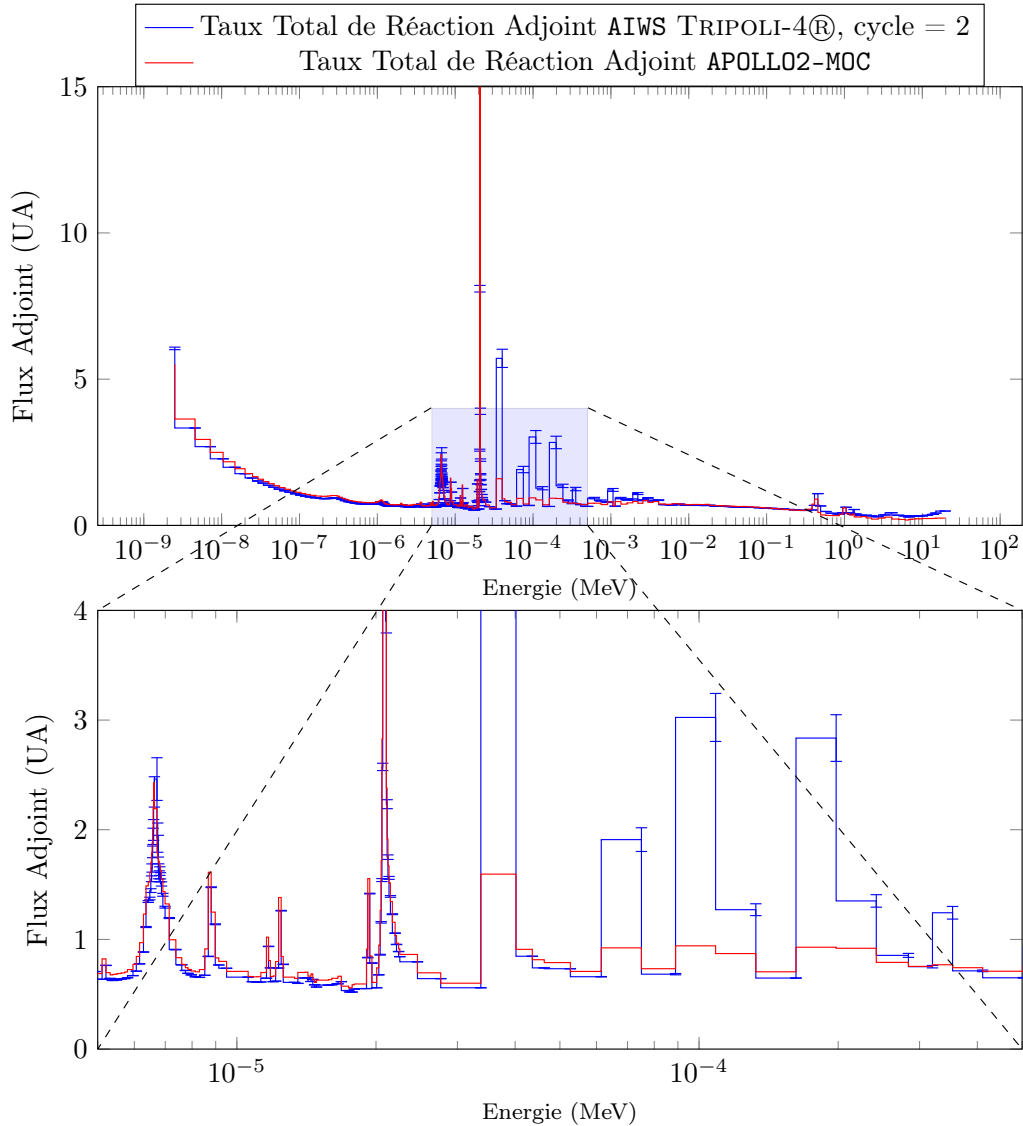


FIGURE II.17 – Réseau Infini de type Réacteur à Eau Légère (REL)/UOX : Taux Totaux de Réaction Adjointes TRIPOLI-4[®] vs APOLLO2-MOC.

II.C.1.ii Flux Adjointes Angulaires dans une Résonance de ^{238}U

Enfin, la figure II.18 donne une image du flux adjoint angulaire dans le réseau UOX pour des énergies proches de la première grande résonance de ^{238}U (6.67 eV) en quatre positions différentes (un point au centre de la pastille combustible, un point à la limite de la pastille, un point dans la gaine en zirconium, un point dans l'eau). Cette illustration permet de bien saisir le concept d'importance d'un neutron : à ces énergies, tout neutron en direction du combustible a de grandes chances d'être capturé par ^{238}U et de ne pas contribuer à la puissance du réacteur, son importance est donc très faible. Les neutrons importants sont ceux se dirigeant vers le milieu aqueux où en un seul choc, il leur sera possible de changer d'énergie et de se « libérer » de la résonance pour aller provoquer, plus tard, une fission. Afin d'aider à la compréhension certaines tangentes au combustible ont été tracées. Le flux adjoint est donc pour ces énergies fortement anisotrope, voir discontinu, un point qui pourra poser problème aux codes déterministes et à leurs flux souvent projetés sur un nombre limité d'harmoniques sphériques – ou discrétisés sur des directions dont les poids servant à la reconstruction ont été calculés pour des fonctions polynomiales intrinsèquement continues. Insistons également sur le fait que le flux direct à ces énergies présente une forme similaire opposée en angle et que le produit du flux direct par le flux adjoint peut alors se révéler incertain.

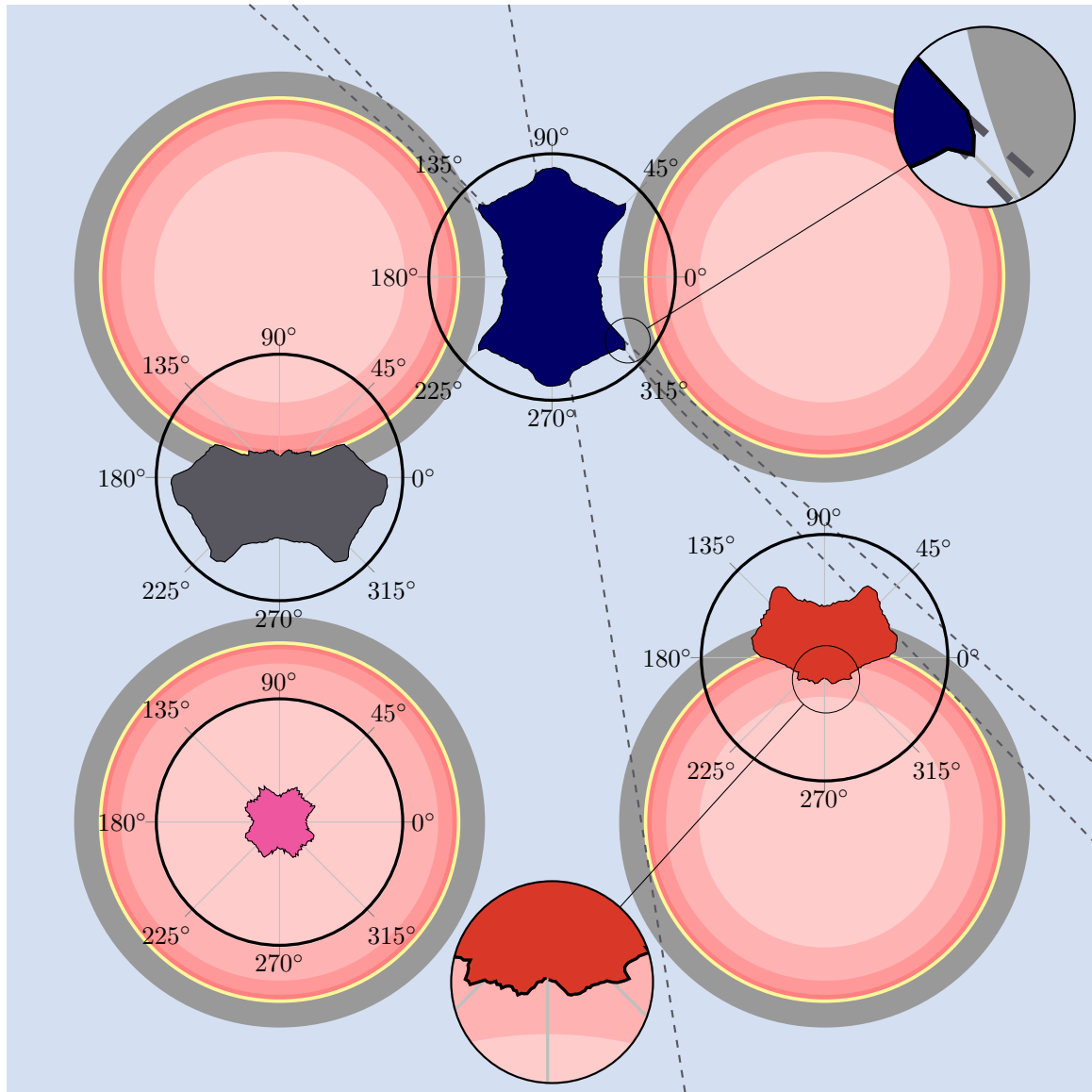


FIGURE II.18 – Flux angulaires autour de 6.67 eV (l'énergie de la plus grande résonance $l^{238}U$) représentés sur quatre cellules UOX (à remplacer dans un réseau infini). Chaque graphique polaire représente un flux adjoint angulaire en un point. Nous invitons le lecteur à se munir d'une règle pour apprécier, au mieux, les différentes tangentes au combustible passant par chacun des points, et à les mettre en corrélation avec la magnitude du flux adjoint.

Ce cas d'application, bien qu'entièrement théorique, nous a permis de démontrer l'intérêt d'un flux adjoint continu de référence vis-à-vis des méthodes multigroupes. Le cas qui va suivre fournira des éléments plus concrets de *qualification* via des analyses d'oscillations réalisées dans la maquette DIMPLE.

II.C.2 Cas de Qualification : Maquette DIMPLE

Cette étude a donné lieu à une publication à la conférence PHYSOR 2014 [39].

Dans cet exemple, nous traiterons trois configurations du réacteur DIMPLE situé à Winfrith (Angleterre) qui ont été utilisées pour réaliser des mesures conjointes entre AEA Technology (UK) et le CEA (France). Par des techniques d'oscillations (ou de subsstitutions), le poids en réactivité de diffé-

rents échantillons utiles à la physique des réacteurs a été mesuré par les deux instituts, il s'agissait du programme CERES [40].

Nous verrons dans le prochain chapitre que le poids en réactivité des échantillons peut être calculé via la théorie exacte des perturbations en faisant appel au calcul du flux adjoint. En particulier, le ratio \mathcal{R} du poids $\Delta\rho^F$ d'un isotope fissile sur celui $\Delta\rho^A$ d'un isotope absorbant pur de référence, dans un réacteur critique, peut être fortement sensible à un ratio de flux adjoint [41] :

$$\mathcal{R} = \frac{\Delta\rho^F}{\Delta\rho^A} \simeq \frac{R_a^F}{R_a^A} \left[1 - \frac{\langle \Phi_f^\dagger \rangle \tilde{\nu} R_f^F}{\langle \Phi_a^\dagger \rangle R_a^F} \right], \quad (\text{II.61})$$

où $\langle \Phi_f^\dagger \rangle$ correspond au flux adjoint moyen des neutrons émis par la fission, $\langle \Phi_a^\dagger \rangle$ au flux adjoint moyen des neutrons induisant les fissions (ou étant capturés par l'isotope absorbant pur). Les paramètres R_a représentent, pour chaque isotope F et A les taux d'absorption moyens et le paramètre R_f^F est le taux moyen de fission. Le paramètre $\tilde{\nu}$ est la moyenne pondérée par le taux de fission du nombre de neutrons émis par fission ν . Cette expression néglige cependant les effets de diffusions que peuvent induire les deux isotopes, hypothèse valide pour des noyaux majoritairement absorbants. Pour réaliser de bonnes estimations de \mathcal{R} , il faut que le code utilisé soit en mesure d'estimer correctement ce ratio de flux adjoint « rapide » (neutron émis par la fission autour de 2 MeV) sur « thermique » (l'absorption a en général lieu à basse énergie).

Les trois configurations sur lesquelles sont réalisées les mesures dans DIMPLE vont permettre de qualifier différents ratios de flux adjoints calculés par TRIPOLI-4[®] (et APOLLO2-MOC) face aux mesures de différences en réactivité :

- La première configuration (*cf.* Fig. II.19), est constituée d'un réseau UOX modéré par l'eau légère et de géométrie annulaire ($\varnothing \simeq 12$ cm) au centre duquel sera inséré puis extrait le matériau dont le poids doit être mesuré. Les flux adjoints calculés par TRIPOLI-4[®] et APOLLO2-MOC (*cf.* Fig. II.20) au centre du cœur montrent un très bon accord qui n'a pu être obtenu qu'après un affinement conséquent des paramètres de calcul du code déterministe. Pour les basses énergies, le niveau du flux adjoint est bas : en effet, la zone centrale d'eau à traverser afin d'atteindre le combustible est d'un rayon conséquent et le faible parcours moyen des neutrons thermiques ou épi-thermiques n'offre que peu de chances d'induire une fission. Dans cette région énergétique, le flux adjoint suit même une loi linéaire en fonction de l'énergie, traduisant ainsi la dépendance inversement proportionnelle en fonction de l'énergie de la section de capture de l'eau jusqu'à 0.1 MeV environ.
- Dans la seconde configuration, l'élément perturbateur est inséré au centre d'un réseau UOX modéré par l'eau légère et de géométrie cylindrique, les flux adjoints TRIPOLI-4[®] et APOLLO2-MOC (*cf.* Fig. II.21) sont en bon accord et présentent une forme marquée par les résonances de l'²³⁸U. L'importance chute à basse énergie : le milieu au centre d'où sont lâchés les neutrons n'est pas fissile et ils ne peuvent donc pas générer de fissions. A haute énergie on assiste à une chute du flux adjoint, celle-ci est simplement liée aux fuites : à ces hautes énergies, le libre parcours moyen permet aux neutrons de fuir en ne réalisant aucune collision.
- La troisième configuration est équivalente à la première à ceci près qu'elle présente en son centre un cylindre d'eau lourde ($\varnothing \simeq 25$ cm). L'eau lourde a la particularité de ralentir efficacement les neutrons et de présenter une section de capture très basse. Contrairement à la configuration I, les neutrons de basses et moyennes énergies sont tous ralentis efficacement pour provoquer une fission et ne sont pas absorbés par l'eau lourde en chemin, leur importance est donc grande (*cf.* Fig. II.22). Au delà de 1 MeV, le libre parcours moyen permet aux neutrons de fuir et fait alors chuter leur importance. Un désaccord flagrant est observé entre le code déterministe et la référence Monte Carlo ; cette différence est la conséquence du modèle 2D approché du MOC APOLLO2-MOC qui se trouve dans l'impossibilité de traiter avec justesse les fuites axiales dans deux milieux radicalement différents en terme d'absorption : l'eau légère et l'eau lourde. La figure II.23 (indexée IIIb par opposition au modèle IIIa avec fuites), présentant un bien meilleur accord, a été

obtenue avec un modèle axial infini dans APOLLO2-MOC. L'absence de fuites axiales (notamment des neutrons de hautes énergie), entraînant une surestimation du spectre adjoint rapide et du k_{eff} du réacteur.

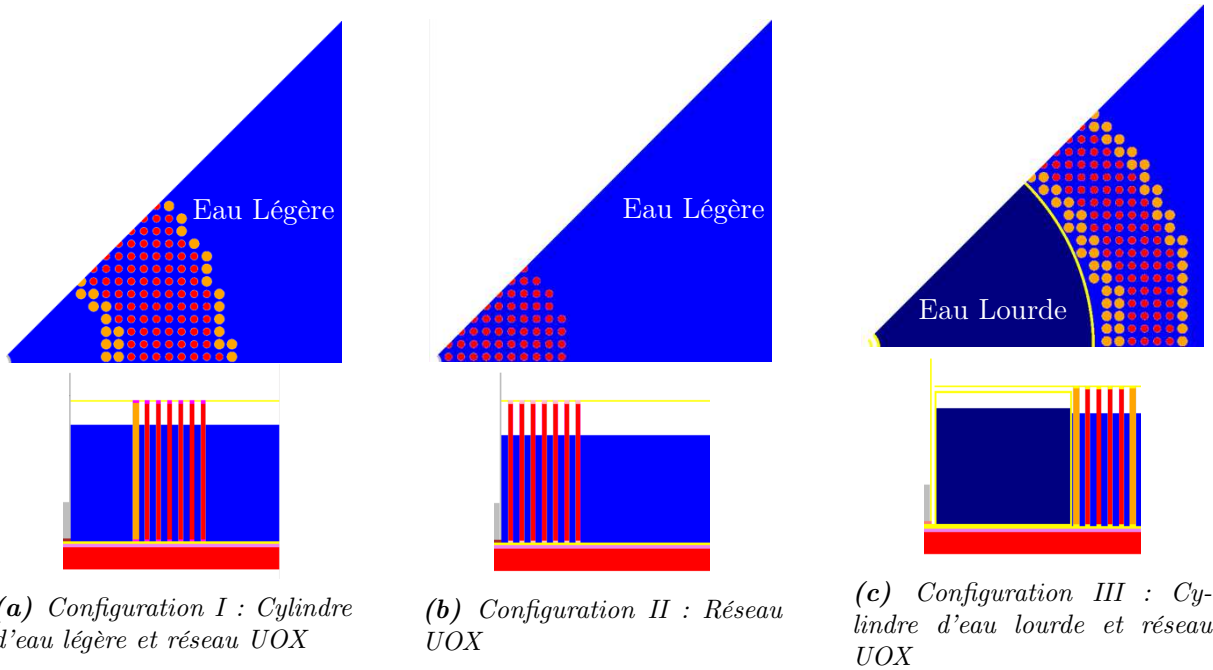


FIGURE II.19 – Modélisations TRIPOLI-4[®] des configurations DIMPLE utilisées dans le programme CERES. Deux types de combustibles sont utilisés : des combustibles enrichis à 7 % en ^{235}U (en rouge) et des combustibles enrichis à 3 % en ^{235}U (en jaune).

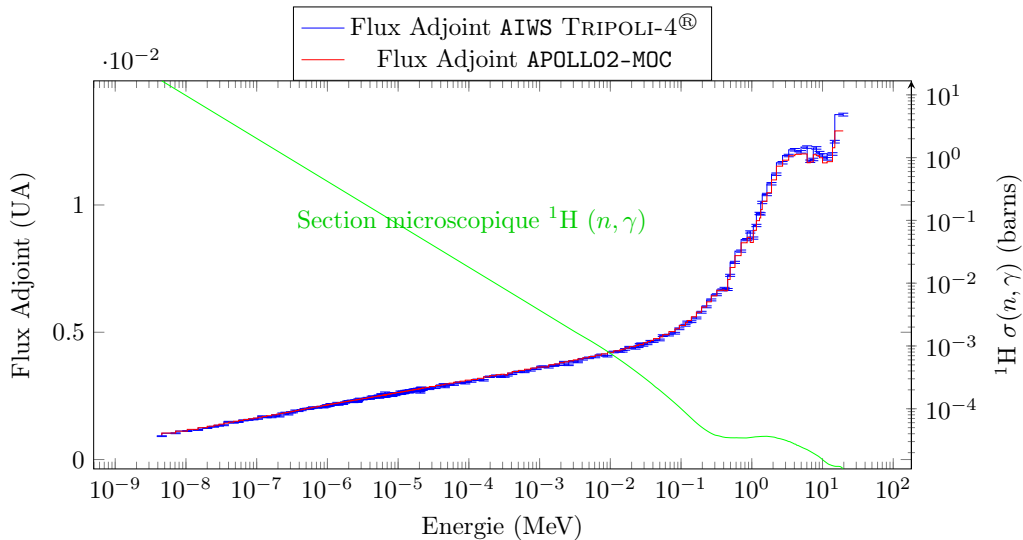


FIGURE II.20 – Flux Adjoints TRIPOLI-4[®] AIWS et APOLLO2-MOC, Configuration DIMPLE I, UOX + EAU. Est aussi représentée la section microscopique de capture de l'hydrogène.

La bonne connaissance des sections du ^{10}B (fort absorbant neutronique) et de l' ^{235}U (isotope fissile majeur des réacteurs actuels) permet de réaliser une phase de calibrage entre le calcul et la mesure. Cette phase consiste à calculer les ratios des poids en réactivité de plusieurs échantillons de ^{10}B et d' ^{235}U et à les comparer aux ratios des poids mesurés. L'étude de ratios permet de s'affranchir de tout

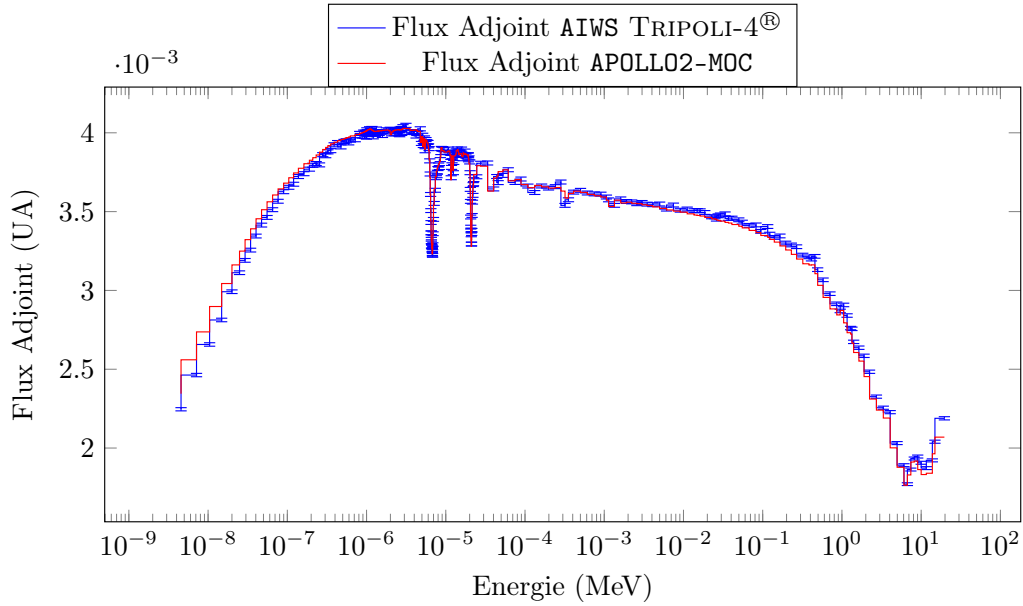


FIGURE II.21 – Flux Adjoints TRIPOLI-4[®] AIWS et APOLLO2-MOC, Configuration DIMPLE II, UOX.

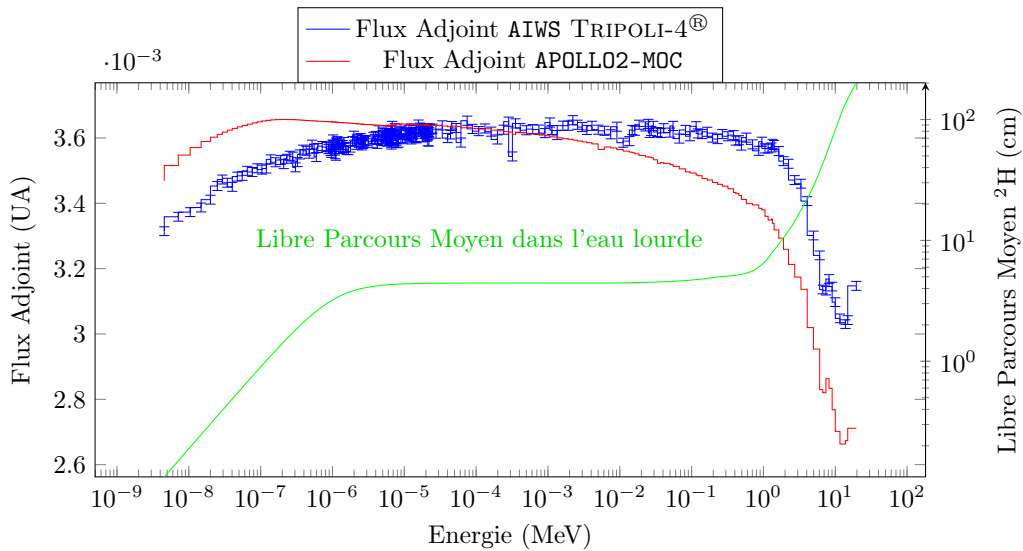


FIGURE II.22 – Flux Adjoints TRIPOLI-4[®] AIWS et APOLLO2-MOC, Configuration DIMPLE IIIa, UOX + EAU LOURDE. La modélisation APOLLO2 2D prend en compte les fuites axiales via l'application d'un modèle B_2 . Est aussi représenté le libre parcours moyen des neutrons dans l'eau lourde.

problème de normalisation des effets entre le calcul et la mesure. Le tableau II.3 donne les comparaisons obtenues, dans les trois configurations décrites précédemment, DIMPLE (I, II, III), entre :

- les mesures et un calcul APOLLO2-MOC,
- les mesures et un calcul TRIPOLI-4[®] utilisant la méthode exacte des perturbations CEP (que nous introduirons dans le prochain chapitre), et qui utilise le principe des IFP introduit dans ce chapitre.

Chaque échantillon y est comparé à un échantillon de référence noté entre parenthèses dans la première colonne du tableau. Les valeurs des ratios calculés par la méthode TRIPOLI-4[®] présentent des accords bien plus justes avec la mesure que les résultats issus du code APOLLO2-MOC. C'est en particulier le cas pour la configuration III du réacteur. Dans cette configuration, nous avons effectivement décelé un

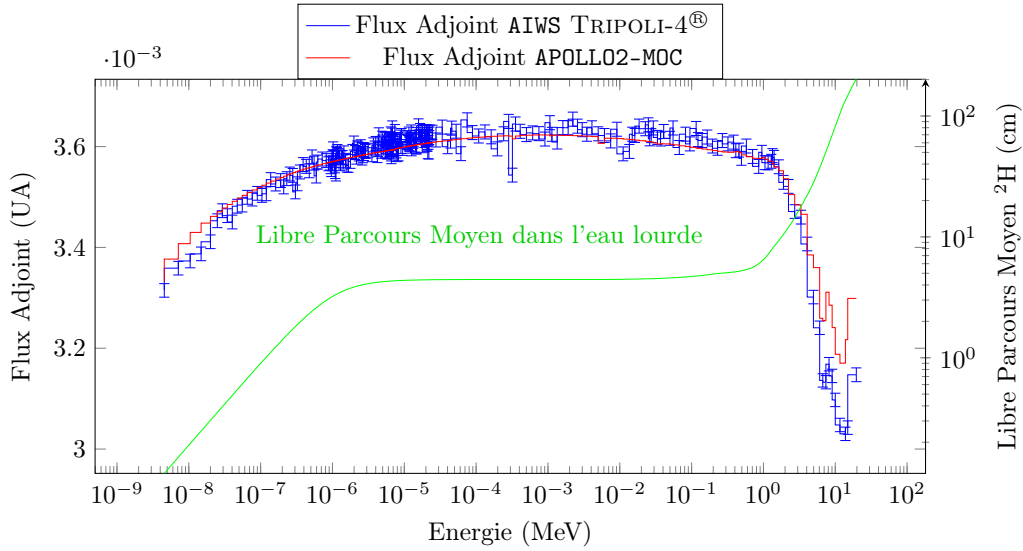
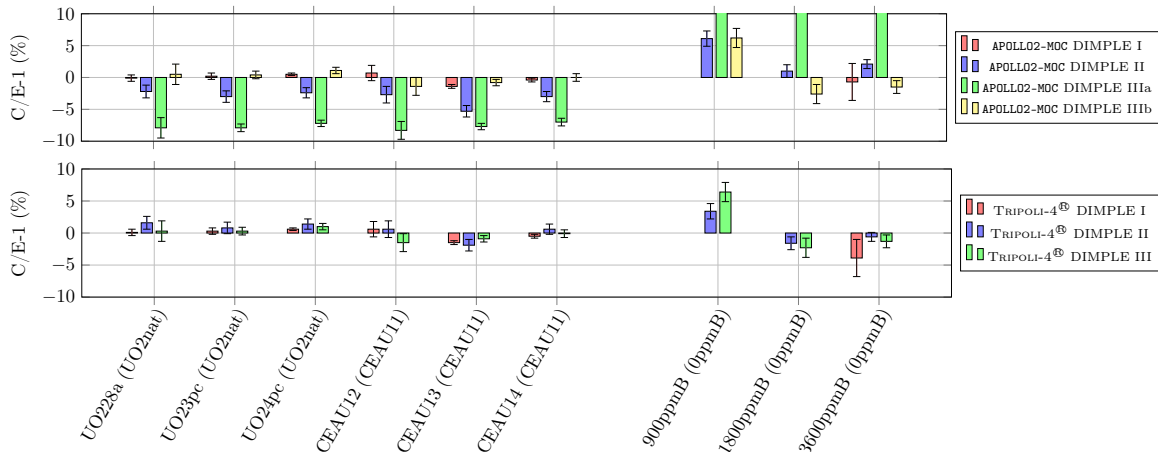


FIGURE II.23 – Flux Adjoints TRIPOLI-4[®] AIWS et APOLLO2-MOC, Configuration DIMPLE IIIb, UOX + EAU LOURDE. La modélisation APOLLO2 2D considère que la dimension axiale est infinie. Est aussi représenté le libre parcours moyen des neutrons dans l'eau lourde.

mauvais accord entre le flux adjoint de la méthode AIWS de TRIPOLI-4[®] et le flux adjoint APOLLO2-MOC. Cette mauvaise balance du ratio de flux adjoint « rapide » sur « thermique » auquel nous sommes forts sensibles, avait pu être en partie corrigée en supprimant les fuites (cf. Configuration IIIb). Les ratios calculés dans la configuration IIIb présentent donc sans surprise un meilleur accord avec les mesures.

TABEAU II.3 – Calibrage des isotopes de référence du programme CERES.

Échantillon	Calibrage DIMPLE : APOLLO2-MOC								Échantillon	Calibrage DIMPLE : TRIPOLI-4 [®]					
	I		II		IIIa		IIIb			I		II		III	
	$\frac{C}{E} - 1$	σ	$\frac{C}{E} - 1$	σ	$\frac{C}{E} - 1$	σ	$\frac{C}{E} - 1$	σ		$\frac{C}{E} - 1$	σ	$\frac{C}{E} - 1$	σ	$\frac{C}{E} - 1$	σ
UO228a (UO2nat)	-0.1	0.5	-2.2	1.0	-7.9	1.6	0.5	1.6	UO228a (UO2nat)	0.1	0.5	1.6	1.0	0.3	1.6
UO23pc (UO2nat)	0.2	0.5	-3.0	0.9	-7.9	0.6	0.4	0.6	UO23pc (UO2nat)	0.3	0.5	0.8	0.9	0.3	0.6
UO24pc (UO2nat)	0.5	0.2	-2.4	0.8	-7.2	0.5	1.1	0.5	UO24pc (UO2nat)	0.6	0.2	1.4	0.8	1.0	0.5
CEAU12 (CEAU11)	0.7	1.2	-2.7	1.3	-8.3	1.4	-1.4	1.4	CEAU12 (CEAU11)	0.6	1.2	0.6	1.3	-1.5	1.4
CEAU13 (CEAU11)	-1.4	0.3	-5.3	0.9	-7.7	0.5	-0.8	0.5	CEAU13 (CEAU11)	-1.4	0.3	-1.9	0.9	-0.9	0.5
CEAU14 (CEAU11)	-0.4	0.3	-3.0	0.8	-7.0	0.6	0.0	0.6	CEAU14 (CEAU11)	-0.5	0.3	-0.6	0.8	-0.1	0.6
Moyenne ²³⁵ U	-0.1	0.3	-3.1	0.5	-7.5	0.2	0.1	0.4	Moyenne ²³⁵ U	-0.1	0.3	0.5	0.5	0.0	0.4
900ppmB (0ppmB)	-	-	6.1	1.2	24.5	1.5	6.2	1.5	900ppmB (0ppmB)	-	-	3.4	1.2	6.4	1.5
1800ppmB (0ppmB)	-	-	1.0	1.0	14.2	1.5	-2.6	1.5	1800ppmB (0ppmB)	-	-	-1.6	1.0	-2.3	1.5
3600ppmB (0ppmB)	-0.7	2.9	2.1	0.7	15.6	1.0	-1.5	1.0	3600ppmB (0ppmB)	-3.9	2.9	-0.6	0.7	-1.3	1.0
Moyenne ^{nat} B	-0.7	2.9	2.5	1.5	17.4	3.2	0.1	2.8	Moyenne ^{nat} B	-3.9	2.9	-0.1	1.5	0.3	2.7



En Perspective : Méthode de Réduction de la Variance

Nous présentons ici certains résultats obtenus par C. Bayol lors de son stage intitulé « Accélération de la Convergence d'un calcul Monte Carlo Critique à partir du Flux Adjoint IFP ».

Une simulation Monte Carlo critique (*i.e.* qui utilise le procédé des itérations de la puissance pour calculer le mode fondamental et sa valeur propre) se décompose en deux phases :

1. Une phase de convergence des sources de fission.
2. Une phase plus ou moins stationnaire où les réponses du code accumulent de la statistique.

Dans certaines études, et en particulier lors de l'étude de gros cœurs, le temps passé dans la première phase du calcul peut être extrêmement long. L'estimateur du k_{eff} classiquement employé,

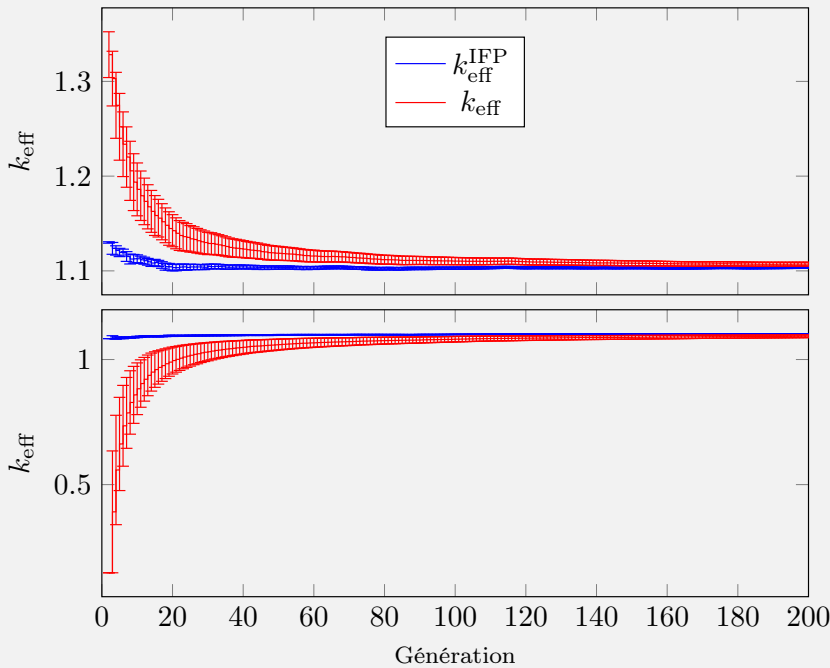
$$k_{\text{eff}} = \frac{\langle \mathcal{P}\Phi \rangle}{\langle S \rangle} = \frac{\sum_i w_{f,i}}{\sum_j w_{0,j}} = \frac{\mathcal{N}_f}{\mathcal{N}} \quad (\text{II.62})$$

où $\mathcal{N} = \sum_i w_{0,i}$ correspond au poids total des neutrons sources, et $\mathcal{N}_f = \sum_j w_{f,j}$ au poids total des fissions générées dans la génération. Le

k_{eff} est entaché d'un biais numérique (qui s'estompe lentement avec les générations) lorsque sa détermination a débuté avant la fin de la première phase. Les résultats de ce stage montrent que la pondération de l'estimateur du k_{eff} par l'importance moyenne des fissions (*cf.* encadré sur l'importance moyenne des fissions p. 74),

$$k_{\text{eff}}^{\text{IFP}} = \frac{\langle \Phi^\dagger \mathcal{P}\Phi \rangle}{\langle \Phi^\dagger S \rangle} = \frac{\sum_i \mathcal{I}(\epsilon) w_{f,i}(\epsilon)}{\sum_j \mathcal{I}(\epsilon) w_{0,j}(\epsilon)} \quad (\text{II.63})$$

présente une convergence bien plus rapide. La figure II.24 présente la convergence de ces deux estimateurs du k_{eff} (*i.e.* obtenus avec les équations (II.62) ou (II.63)) calculés pour un réseau de 49×49 cellules REL/UOX. La première phase de convergence a été volontairement supprimée afin d'accentuer les effets parasites sur la convergence. Deux types de sources sont utilisées pour initialiser le calcul : une source ponctuelle au centre du réseau et une source ponctuelle en périphérie du réseau. Dans les deux cas, l'estimateur associé à l'équation (II.63), noté $k_{\text{eff}}^{\text{IFP}}$, converge de manière plus rapide vers la solution asymptotique.



(a) Source ponctuelle au centre du réseau 49×49 .

(b) Source ponctuelle en périphérie du réseau 49×49 .

FIGURE II.24 – Figure de convergence du k_{eff} en fonction du nombre de générations effectuées. Deux types de sources sont utilisées pour initialiser les itérations de la puissance.

Bilan du Chapitre

Théorie : Calculs du Flux Adjoint « Monte Carlo » de Référence

Probabilité Itérée de Fission - IFP : résolution ponctuelle de l'équation adjointe du transport via un transport direct et la détermination de l'importance asymptotique d'un neutron dans le procédé des itérations de la puissance.

Transport Inversé : l'obtention des sections efficaces adjointes est un dur labeur proche de l'évaluation des données nucléaires. Ces sections peuvent permettre un calcul adjoint dans un code Monte Carlo avec un minimum de modifications internes. Ce traitement des sections n'a pas été mené jusqu'au bout dans cette thèse.

Nouvelle Méthode dans TRIPOLI-4[®]

Méthode *Arbitrary IFP-Weighted Source AIWS*, basée sur le principe des IFP, cette méthode permet l'évaluation d'intégrales pondérées par le flux adjoint Φ^\dagger du type $\langle \Phi^\dagger S \rangle$, où S est une source pouvant être définie par l'utilisateur ou déterminée par un autre calcul.

La vérification (cas analytiques), validation (calculs APOLLO2-MOC) voire qualification (calcul de perturbations) de la méthode AIWS en font un outil puissant d'estimation du flux adjoint. Les points noirs pour un utilisateur non-averti sont la définition des sources de la simulation en fonction de la grandeur recherchée ainsi que la définition du cycle IFP. Afin de faciliter la détermination de la longueur du cycle IFP optimal, une méthode basée sur les entropies relatives a été mise en place.

Apports de la Méthode AIWS

Estimation du flux adjoint de référence Monte Carlo.

Mise en évidence d'hypothèses trop fortes dans les codes déterministes (approximations géométriques ou maillage multigroupe trop grossiers).

Calculs d'intégrales du type $\langle \Phi^\dagger S \rangle_m$, où Φ^\dagger est le flux adjoint, S une source définie par l'utilisateur (manuellement ou par le stockage d'évènements en provenance d'une autre simulation) et m une maille de l'espace des phases également définie par l'utilisateur.

Perspectives

Poursuivre la réalisation d'une bibliothèque adjointe des sections efficaces pour résoudre le problème du transport adjoint et éventuellement pouvoir calculer un flux direct ponctuel par « IFP inversée ».

Bibliographie

- [1] E. BRUN et al. “Overview of TRIPOLI-4 version 7, Continuous-energy Monte Carlo Transport Code”. In : *ICAPP 2011*. 2011 (cf. p. 23).
- [2] G. KEEPIN. *Physics of nuclear kinetics*. Addison-Wesley series in nuclear science and engineering. Addison-Wesley Pub. Co., 1965 (cf. p. 23).
- [3] K. OTT et R. NEUHOLD. *Introductory nuclear reactor dynamics*. American Nuclear Society, 1985 (cf. p. 23).
- [4] G. BELL et S. GLASSTONE. *Nuclear reactor theory*. Van Nostrand Reinhold Co., 1970 (cf. p. 23, 25).
- [5] W. M. STACEY. *Variational methods in nuclear reactor physics*. Nuclear science and technology. New York : Academic Press, 1974 (cf. p. 23).
- [6] P. REUSS. *Précis de neutronique*. EDP Sciences, 2012 (cf. p. 23, 31).
- [7] A. HENRY. *Nuclear-reactor analysis*. MIT Press, 1975 (cf. p. 23).
- [8] D. CACUCI. *Handbook of Nuclear Engineering : Vol. 1 : Nuclear Engineering Fundamentals ; Vol. 2 : Reactor Design ; Vol. 3 : Reactor Analysis ; Vol. 4 : Reactors of Generations III and IV ; Vol. 5 : Fuel Cycles, Decommissioning, Waste Disposal and Safeguards*. Handbook of Nuclear Engineering. Springer, 2010 (cf. p. 24, 25).
- [9] Y. SAAD. *Numerical methods for large eigenvalue problems*. SIAM, 2011 (cf. p. 24).
- [10] G. TRUCHET et al. “Application of the modified neutron source multiplication method to the prototype FBR Monju”. In : *Annals of Nuclear Energy* 51 (2013), p. 94–106 (cf. p. 24).
- [11] T. KLINC. “On completeness of eigenfunctions of the one-speed transport equation”. In : *Communications in Mathematical Physics* 41.3 (1975), p. 273–279 (cf. p. 24).
- [12] S. CARNEY et al. “Theory and applications of the fission matrix method for continuous-energy Monte Carlo”. In : *Annals of Nuclear Energy* 73 (2014), p. 423–431 (cf. p. 25, 31, 45).
- [13] A. M. WEINBERG. “Current Status of Nuclear Reactor Theory”. In : *American Journal of Physics* 20 (1952), p. 401–412 (cf. p. 26, 27).
- [14] L. N. USSACHOFF. “Equation for the importance of neutrons, reactor kinetics and the theory of perturbations”. In : *Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva, Switzerland*. 1956 (cf. p. 26).
- [15] A. e. RADKOWSKY. *Naval Reactors Physics Handbook*. 1964 (cf. p. 26).
- [16] Y. NAUCHI et T. KAMEYAMA. “Development of Calculation Technique for Iterated Fission Probability and Reactor Kinetic Parameters Using Continuous-Energy Monte Carlo Method”. In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 47.11 (2010), p. 977–990 (cf. p. 26, 27, 34).
- [17] OCDE/NEA. *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. NEA/NSC/DOC(95)03. 2012 (cf. p. 28).
- [18] J. HOOGENBOOM. *Adjoint Monte Carlo methods in neutron transport calculations*. Technische Hogeschool, 1977 (cf. p. 28, 29).

- [19] D. IRVING. “The adjoint Boltzmann equation and its simulation by Monte Carlo”. In : *Nuclear Engineering and Design* 15 (1971), p. 273–293 (cf. p. 28).
- [20] L. DESORGER, F. LEI et G. SANTIN. “Implementation of the reverse/adjoint Monte Carlo method into Geant4”. In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 621.1–3 (2010), p. 247–257 (cf. p. 28).
- [21] R. BRISSENDEN. “Continuous energy adjoint Monte Carlo”. In : *Progress in Nuclear Energy* 24.1–3 (1990). Monte Carlo Methods for Neutrons and Photon Transport Calculations, p. 129–139 (cf. p. 28).
- [22] C. M. DIOP et al. “Adjoint Monte Carlo neutron transport using cross-section probability table representation”. In : *Annals of Nuclear Energy* 37.9 (2010), p. 1186–1196 (cf. p. 28, 30).
- [23] I. LUX et L. KOBLINGER. *Monte Carlo particle transport methods : neutron and photon calculations*. CRC Press, 1991 (cf. p. 29).
- [24] L. L. CARTER et E. D. CASHWELL. *Particle Transport Simulation with the Monte Carlo Method; Prepared for the Division of Military Application, U.S. Energy Research and Development Administration*. U. S. Department of Energy, 1975 (cf. p. 29).
- [25] J. HOOGENBOOM. “Continuous Energy Adjoint Monte Carlo for Coupled Neutron-Photon Transport”. English. In : *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications*. Sous la dir. d’A. KLING et al. Springer Berlin Heidelberg, 2001, p. 613–618 (cf. p. 29).
- [26] G. PALMIOTTI. “The ‘FRENCH’ (flux reconstructed explicitly by neutronic calculated harmonics) method in multidimensional and multigroup theory”. In : *Annals of Nuclear Energy* 14.4 (1987), p. 167–176 (cf. p. 31).
- [27] B. DEHAYE. “Accélération de la convergence dans le code de transport de particules Monte-Carlo TRIPOLI-4® en criticité”. Thèse de doct. Université Paris 11, 2010 (cf. p. 32, 33).
- [28] B. KIEDROWSKI. *Adjoint Weighting for Continuous- Energy Monte Carlo Radiation Transport*. University of Wisconsin–Madison, 2009 (cf. p. 36, 37).
- [29] T. COVER et J. THOMAS. *Elements of Information Theory*. A Wiley-Interscience publication. Wiley, 2006 (cf. p. 39).
- [30] F. B. B. TARO UEKI. “Stationarity Modeling and Informatics-Based Diagnostics in Monte Carlo Criticality Calculations”. In : *Nuclear Science and Engineering* 149.1 (2005) (cf. p. 41).
- [31] A. SANTAMARINA et al. “Validation of the new code package APOLLO2.8 for accurate PWR neutronics calculations”. In : *MC 2013, Sun Valley, USA*. 2013 (cf. p. 43).
- [32] J. W. EATON, D. BATEMAN et S. HAUBERG. *GNU Octave version 3.0.1 manual : a high-level interactive language for numerical computations*. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2009 (cf. p. 44).
- [33] G. RIMPAULT. “Algorithmic Features of the ECCO Cell Code for Treating Heterogeneous Fast Reactor Subassemblies”. In : *International Topical Meeting on Reactor Physics and Computations*. 2012 (cf. p. 45).
- [34] G. RIMPAULT. “The ERANOS Code and Date System for Fast Reactor Neutronic Analyses”. In : *PHYSOR 2002, Séoul, Corée du Sud*. 2002 (cf. p. 45).
- [35] E. GREENSPAN et K. CADY. “The measurement of neutron importance functions”. In : *Journal of Nuclear Energy* 24.11 (1970), p. 529–550 (cf. p. 48).
- [36] H. HFAIEDH et A. SANTAMARINA. “Determination of the optimized SHEM mesh for neutron transport calculations”. In : *MC 2005, Avignon, France*. 2005 (cf. p. 49).

- [37] A. HEBERT et A. SANTAMARINA. “Refinement of the Santamarina-Hfaiedh energy mesh between 225 eV and 114 keV”. In : *PHYSOR 2008, Interlaken, Suisse*. 2008 (cf. p. 49).
- [38] D. WADE et R. BUCHER. “Conservation of the adjoint neutron spectrum by use of bilinear-weighted cross sections and its effect on fast reactor calculations”. In : *Nuclear Science and Engineering* 64.2 (1977), p. 517–538 (cf. p. 49).
- [39] P. LECONTE et al. “Feedback on PU239 and PU240 nuclear data and associated covariances through the CERES integral experiments”. In : *PHYSOR 2014, Kyoto, Japon*. 2014 (cf. p. 52).
- [40] J. MARSHALL, G. INGRAM et N. GULLIFORD. “Irradiated fuel measurements in DIMPLE”. In : *PHYSOR 90, Marseille, France*. 1990 (cf. p. 53).
- [41] W. K. FOELL. *Small-Sample Reactivity Measurements in Nuclear Reactors*. American Nuclear Society, 1972 (cf. p. 53).

Chapitre III

Méthodes de Perturbations Stochastiques

Sommaire

III.A Les Perturbations de Réactivité	67
III.A.1 Différence des Valeurs Propres	68
III.A.2 Méthodes « Perturbatives »	68
III.B État de l'Art Monte Carlo	71
III.B.1 Méthode IFP	71
III.B.2 Méthode CLUTCH	72
III.B.3 Méthode des <i>Échantillons Corrélés</i>	73
III.B.4 Synthèse	75
III.C Approches Envisagées dans cette Thèse	76
III.C.1 Perturbations « Exactes » par Approche Ponctuel	77
III.C.2 Perturbations « Exactes » par Collision (CEP)	79
III.C.3 Perturbations « Exactes » par Corps Noir	79
III.C.4 Synthèse des Approches Envisagées	82
III.D Implémentation des Perturbations Exactes par Collision (CEP)	83
III.D.1 Méthode & Choix d'implémentation	83
III.D.2 Optimisations et Options de Calculs	89
III.D.3 Vérification & Validation	91
III.E Implémentation de la Méthode du Corps Noir (BBEP)	99
III.F Illustrations	100
III.F.1 Vidange d'un Plenum Sodium	100
III.F.2 Benchmark CHANDA / OCDE-BUC-Phase VIII	104
III.F.3 Interprétations EOLE	108

Le calcul des perturbations de réactivité est une étape majeure du schéma classique de propagation des incertitudes des paramètres d'entrée d'un code à la réactivité. Ces calculs permettent d'analyser, de comparer ou d'étudier avec précision les différentes sources d'incertitudes de la simulation d'un cœur nucléaire. Aussi, il est nécessaire que tout code neutronique puisse permettre ce type d'études. La première motivation de cette thèse a été de doter le code TRIPOLI-4[®] de méthodes à même de fournir un calcul de référence des perturbations de réactivité effectuées par oscillations d'un petit échantillon de matériau pur dans le réacteur MINERVE. Nous verrons également que nos développements s'appliquent à un panel d'applications beaucoup plus large. À cette fin, nous développerons le calcul Monte Carlo des perturbations de la façon suivante :

- Une définition des perturbations de réactivité (*cf.* Sec. III.A).
- Un état de l'art des méthodes disponibles (*cf.* Sec. III.B).
- Les voies envisagées (*cf.* Sec. III.C) quant au développement d'une nouvelle méthode exacte des perturbations, et non approchée comme les approches employées par le passé.
- La mise en place (*cf.* Sec. III.D) de la Méthode Exacte des Perturbations par Collision (*Collision-based Exact Perturbations*, CEP). La méthode CEP possède un spectre d'application très large comme en témoignent les différents cas d'applications ; mais elle peut aussi répondre à la spécificité des interprétations des mesures par oscillations.
- La mise en place (*cf.* Sec. III.E) de la Méthode Exacte des Perturbations vis-à-vis d'un Corps Noir (*Black Body Exact Perturbations*, BBEP). Cette méthode utilise le code TRIPOLI-4[®] en l'état (c'est-à-dire sans aucun développement), mais nécessite une manipulation agile de ces fonctionnalités.

III.A Les Perturbations de Réactivité

Considérons deux états d'un réacteur ① et ② qui diffèrent de par leur géométrie¹, leur composition, les données nucléaires qu'on leur associe, voire certains paramètres de simulation. L'ensemble de ces différences peut être traduit comme la variation des deux opérateurs intervenant dans le bilan neutronique (*cf.* opérateurs \mathcal{P} et \mathcal{K} définis dans la section II.A), de manière à associer à chacun des deux états une équation homogène :

$$\mathcal{K}_1\Phi_1 = \lambda_1\mathcal{P}_1\Phi_1 \quad (\text{III.1})$$

$$\mathcal{K}_2\Phi_2 = \lambda_2\mathcal{P}_2\Phi_2 \quad (\text{III.2})$$

définissant λ_1 et λ_2 comme les plus petites valeurs propres – non nulles – associées à chacune des équations. Ces valeurs propres sont directement liées aux facteurs moyens de multiplication des neutrons par fission, k_1 et k_2 :

$$k_1 = \frac{1}{\lambda_1} \quad (\text{III.3})$$

$$k_2 = \frac{1}{\lambda_2}$$

Ainsi qu'aux réactivités de chacun des états, ρ_1 et ρ_2 :

$$\rho_1 = \frac{k_1 - 1}{k_1} \quad (\text{III.4})$$

$$\rho_2 = \frac{k_2 - 1}{k_2} \quad (\text{III.5})$$

¹La géométrie enveloppe ne doit cependant pas être différente.

En règle générale, les codes neutroniques Monte Carlo calculent et affichent la moyenne sur les générations du coefficient de multiplication des neutrons par fission, k_{eff} , et son écart type $\sigma[k_{\text{eff}}]$. En excluant la phase de convergence des itérations de la puissance, l'écart type $\sigma[k_{\text{eff}}]$, diminue en fonction de la racine du nombre de tirages, donc également le plus souvent en fonction de la racine du temps de calcul.

III.A.1 Différence des Valeurs Propres

La perturbation de réactivité entre les états ① et ② provoquée par la modification des opérateurs \mathcal{K} et \mathcal{P} , n'est autre que sa différence et s'écrit :

$$\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1 = \lambda_1 - \lambda_2 = \frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_2}. \quad (\text{III.6})$$

Les deux calculs de k_{eff} étant a priori indépendants, on peut estimer la variance de $\Delta\rho$:

$$\sigma^2[\Delta\rho] = \sigma^2\left[\frac{1}{k_1}\right] + \sigma^2\left[\frac{1}{k_2}\right]. \quad (\text{III.7})$$

Afin d'exprimer ce résultat en fonction des quantités générées par les codes, k_1 , k_2 , $\sigma[k_1]$ et $\sigma[k_2]$, il est possible de réaliser un développement de Taylor au premier ordre de la variance. La variance d'une fonction $x \rightarrow g(x)$ appliquée à la population X est approchée autour de μ par :

$$\begin{aligned} \sigma^2[g(X)] &= \sigma^2 [g(\mu) + (X - \mu)g'(\mu) + \dots] \\ &\simeq g'^2(\mu)\sigma^2[X - \mu] = g'^2(\mu)\sigma^2[X] \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

d'où, si les valeurs de X sont suffisamment proches de leur moyenne μ , c'est-à-dire si $\sigma[k_1]/k_1 \ll 1$ et $\sigma[k_2]/k_2 \ll 1$, alors :

$$\sigma^2[\Delta\rho] \simeq \frac{\sigma^2[k_1]}{k_1^4} + \frac{\sigma^2[k_2]}{k_2^4} \quad (\text{III.9})$$

Remarque : Nous venons de propager l'incertitude des paramètres d'une équation au résultat de l'équation par la méthode des dérivées décrite en introduction (cf. Sec. I.A.2.ii). L'application d'une méthode Monte Carlo peut permettre de vérifier nos approximations ; ainsi, en utilisant des lois normales, avec $k_1 \sim k_2 \sim 1$, et pour que le biais soit inférieur à 1% sur la variance entre le résultat Monte Carlo et le résultat approché de l'équation (III.9), il nous fallait obtenir $\sigma[k_1] < 5000$ pcm et $\sigma[k_2] < 5000$ pcm pour toute perturbation réaliste. En pratique, un code Monte Carlo converge assez rapidement en dessous des 5000 pcm, même sur les géométries les plus complexes : cette dernière formule est donc toujours valide dans nos cas d'application.

Cette méthode, aussi appelée *eigenvalue difference method*, est une méthode de référence exacte. Cependant elle atteint ses limites dans le calcul des faibles variations de réactivité puisque sa variance relative diverge lorsque $\Delta\rho$ tend vers zéro [1]. Si nous voulions calculer l'effet d'un échantillon oscillé dans le réacteur MINERVE par le biais de cette méthode, il faudrait plus de 10000 années de calcul à un unique processeur afin d'atteindre les 0.01 pcm d'incertitude expérimentale. Nos moyens informatiques hautement parallèles nous permettent actuellement de simuler, au mieux, quelques années par tranche de 24 h (e.g. 1024 processeurs durant 24 h \sim 2.8 ans cpu).

III.A.2 Méthodes « Perturbatives »

L'impossibilité de faire converger la variance relative de la méthode de la différence des valeurs propres nous conduit à envisager l'application d'une méthode calculant directement la variation de réactivité. Ces méthodes dites perturbatives se répartissent selon deux approches :

- L'application de la théorie des perturbations.

- L'introduction de corrélations $\text{COR}[X, Y]$ entre les états ① (X) et ② (Y) qui réduisent mécaniquement la variance de la différence des valeurs propres $\sigma^2[X - Y]$,

$$\sigma^2[X - Y] = \sigma^2[X] + \sigma^2[Y] - 2\text{COR}[X, Y]\sigma[X]\sigma[Y] \quad (\text{III.10})$$

III.A.2.i Théorie « Exacte » des Perturbations et 1^{er} ordre

Introduisons tout d'abord les équations adjointes des équations (III.1) et (III.2) :

$$\mathcal{K}_1^\dagger \Phi_1^\dagger = \lambda_1 \mathcal{P}_1^\dagger \Phi_1^\dagger \quad (\text{III.11})$$

$$\mathcal{K}_2^\dagger \Phi_2^\dagger = \lambda_2 \mathcal{P}_2^\dagger \Phi_2^\dagger \quad (\text{III.12})$$

Après avoir fait la différence des équations (III.1) et (III.2), et regroupé certains termes [2],

$$(\lambda_2 - \lambda_1)\mathcal{P}_2\Phi_2 + (\lambda_1\mathcal{P}_1 - \mathcal{K}_1)(\Phi_2 - \Phi_1) + [\lambda_1(\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1) - (\mathcal{K}_2 - \mathcal{K}_1)]\Phi_2 = 0 \quad (\text{III.13})$$

la multiplication à gauche par le flux adjoint de la configuration ①, Φ_1^\dagger , permet d'annuler après intégration sur l'espace des phases le terme des différences de flux $\Phi_2 - \Phi_1$ et d'exprimer la variation de réactivité $\Delta\rho = \lambda_2 - \lambda_1$ en fonction de $\Delta\mathcal{P} = \mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$ et $\Delta\mathcal{K} = \mathcal{K}_2 - \mathcal{K}_1$:

$$\Delta\rho = \frac{\langle \Phi_1^\dagger, [\lambda_1\Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}]\Phi_2 \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_2\Phi_2 \rangle} \quad (\text{III.14})$$

Perturbations « Exacte »

Notons cependant qu'un autre ré-agencement des termes aurait pu donner une expression légèrement différente : quatre formulations sont possibles [3],

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \Delta\rho &= \frac{\langle \Phi_1^\dagger, [\lambda_1\Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}]\Phi_2 \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_2\Phi_2 \rangle} & \text{(a')} \quad \Delta\rho &= -\frac{\langle \Phi_2^\dagger, [\lambda_2\Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}]\Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_2^\dagger, \mathcal{P}_1\Phi_1 \rangle} \\ \text{(b)} \quad \Delta\rho &= \frac{\langle \Phi_1^\dagger, [\lambda_2\Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}]\Phi_2 \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_1\Phi_2 \rangle} & \text{(b')} \quad \Delta\rho &= -\frac{\langle \Phi_2^\dagger, [\lambda_1\Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}]\Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_2^\dagger, \mathcal{P}_2\Phi_1 \rangle} \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

Chacune de ces expressions donne accès à la même différence de réactivité globale ; cependant, elle ne donne pas accès à la même projection des effets. Par exemple, les effets de production de chacune des expressions s'expriment :

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \Delta\rho|_{\text{fission}} &= \frac{\langle \Phi_1^\dagger, \lambda_1\Delta\mathcal{P}\Phi_2 \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_2\Phi_2 \rangle} & \text{(a')} \quad \Delta\rho|_{\text{fission}} &= -\frac{\langle \Phi_2^\dagger, \lambda_2\Delta\mathcal{P}\Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_2^\dagger, \mathcal{P}_1\Phi_1 \rangle} \\ \text{(b)} \quad \Delta\rho|_{\text{fission}} &= \frac{\langle \Phi_1^\dagger, \lambda_2\Delta\mathcal{P}\Phi_2 \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_1\Phi_2 \rangle} & \text{(b')} \quad \Delta\rho|_{\text{fission}} &= -\frac{\langle \Phi_2^\dagger, \lambda_1\Delta\mathcal{P}\Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_2^\dagger, \mathcal{P}_2\Phi_1 \rangle} \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

Toute comparaison inter-codes devra alors être établie en prenant garde à la projection utilisée par le code. La plupart des codes déterministes [3, 4] utilisent la formulation (b) – ou (b') selon le sens que l'utilisateur donne à la perturbation. Pour des raisons pratiques nous verrons que les méthodes Monte Carlo appliquent plus facilement les expressions (a) ou (a').

Dans le cadre de perturbations de faibles amplitudes [5], il peut être considéré que les flux restent constants et que seuls les opérateurs varient au premier ordre ; ainsi, si une perturbation élémentaire $\delta\rho$ s'exprime rigoureusement par,

$$\delta\rho = \frac{\langle \Phi^\dagger, [\lambda\delta\mathcal{P} - \delta\mathcal{K}]\Phi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle} \quad (\text{III.17})$$

une perturbation légèrement plus grande sera approchée par :

$$\Delta\rho \sim \frac{\langle \Phi^\dagger, [\lambda\Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}]\Phi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle} \quad (\text{III.18})$$

Perturbations « 1er ordre »

Le terme « perturbation exacte » fera souvent référence, par abus de langage, à la méthode exacte des perturbations de la réactivité, par opposition à sa formulation premier ordre. Nous emploierons également les termes « état de référence » pour désigner l'état ② et « état perturbé » pour désigner l'état ①. L'usage, qui aurait plutôt tendance à inverser ces deux termes, peut prêter à confusion lors de l'application de la méthode CEP (cf. Sec. III.C.2).

III.A.2.ii Introduire des Corrélations

Les méthodes d'échantillonnage Monte Carlo permettent d'introduire des corrélations assez naturellement. L'objectif est de maximiser le nombre d'histoires de neutrons communes entre les états ① et ② de manière à faire la différence des deux valeurs propres corrélées (cf. Eq. III.10). Deux approches ont été jusqu'alors employées :

- La corrélation rigoureuse de toutes les traces. Les méthodes des *échantillons corrélés* [1, 6–8] et de l'*échantillonnage des dérivées* [9] sont des méthodes très répandues parmi les codes neutroniques Monte Carlo. La méthode des échantillons corrélés, par exemple, se place dans un état de référence, soit l'état ①, soit l'état ② – ou tout autre état intermédiaire aux états ① et ②. Le transport des neutrons est ensuite effectué dans cet état de référence uniquement. À partir des histoires générées, il est possible de se ramener mathématiquement à l'état perturbé, dans lequel chaque histoire est contrainte à suivre les chemins pris par les neutrons de l'état de référence. Statistiquement, cela se traduit par une correction de poids, W , à appliquer aux poids des neutrons de référence :

$$W = \frac{p^*}{p} \quad (\text{III.19})$$

où p est la densité de probabilité d'un évènement dans l'état de référence et p^* est sa densité de probabilité de ce même évènement dans l'état perturbé. La perturbation de réactivité s'obtient alors facilement par différence des k_{eff} du cas référence k_{ref} ,

$$k_{\text{ref}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i w_{fi} \quad (\text{III.20})$$

(où w_{fi} est le poids attribué à chaque fission i et \mathcal{N} le poids total des sources au début de chaque génération²), et du k_{eff} du cas perturbé k^* ,

$$k^* = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i w_{fi}^* = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i W_i w_{fi} \quad (\text{III.21})$$

où W_i est la correction de poids des fissions i . Il vient alors :

$$\Delta k = k^* - k_{\text{ref}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i (1 - W_i) w_{fi} \quad (\text{III.22})$$

- Dans le cas de perturbations à caractère local, un autre principe consiste à dédoubler tout neutron susceptible d'avoir une histoire différente de manière à simuler son histoire à la fois pour l'état ① et pour l'état ②. En pratique, le neutron est rarement dédoublé [10] : on préfère plutôt simuler l'histoire tantôt dans l'état ①, tantôt dans l'état ②. Cette méthode a été récemment revisitée [11] dans le but de calculer des sensibilités.

²On suppose également ici que $\mathcal{N} = \mathcal{N}^*$, c'est-à-dire que les poids perturbés sont aussi renormalisés par la somme des poids de référence.

III.B État de l'Art Monte Carlo

Dans cette section nous passerons en revue un ensemble de méthodes Monte Carlo qui permettent le calcul de perturbations de réactivité. De nombreuses méthodes de type « premier ordre » sont actuellement développées dans le monde. Il s'agit d'un sujet de travail fortement concurrentiel puisque que l'application d'une formulation au premier ordre suffit à calculer des sensibilités (et donc par voie de conséquence les incertitudes essentielles à la démonstration de sûreté). Il semble que peu d'organismes, mis à part le CEA, soient intéressés par la formulation exacte du principe des perturbations de réactivité. La seule méthode *réellement* exacte à ce jour est la méthode de la différence des valeurs propres, qui permet une évaluation exacte, par le biais de deux calculs indépendants. Cette méthode ne convient pas entièrement aux besoins, car il est fastidieux pour l'utilisateur de déterminer la contribution de chaque réaction et isotope à la différence de réactivités ; de plus, cette méthode converge mal pour de petites perturbations.

Trace d'un Neutron et Estimateurs Cordes

La *trace* d'un neutron correspond aux chemins que celui-ci a empruntés de sa naissance à sa mort au cours d'une « génération ». En Monte Carlo cette trace est une ligne brisée joignant l'ensemble des points de collision. On note l , la distance parcourue par le neutron indicé p . Les estimateurs « corde » utilisent les traces pour déterminer de nombreuses grandeurs. Le

flux dans un volume V est par exemple estimé comme la somme des chemins passant par le volume V :

$$\sum_p \int_{l \in V} w_p(l) dl \quad (\text{III.23})$$

où $w_p(l)$ est le poids du neutron p ayant parcouru une distance l sur la trace p .

III.B.1 Méthode IFP

L'un des travaux initiateur de cette thèse, a été réalisé à l'université Wisconsin-Madison par B. C. Kiedrowski dans le code MCNP [12]. Reprenant une idée remise au goût du jour par Y. Nauchi [13], il a été possible de calculer des sensibilités du k_{eff} aux données nucléaires ainsi que des perturbations de réactivité en utilisant le principe de la **Méthode IFP** originellement formulé dans [14]. Ces perturbations restent cependant limitées à leur expression au premier ordre (*cf.* Eq. (III.18)). Cette méthode sera appliquée plus loin dans ce manuscrit (*cf.* Chap. V) afin de calculer les paramètres cinétiques effectifs. Plus généralement, on calcule des intégrales du type,

$$X = \langle \Phi^\dagger, A\Phi \rangle \quad (\text{III.24})$$

B. C. Kiedrowski indique que le score $T = A\Phi$, où A est un opérateur quelconque, peut être pondéré par l'adjoint pourvu que l'on puisse accéder à l'importance de ce score R . Ce score d'importance peut être choisi comme la probabilité de fission itérée (IFP) lorsque l'on souhaite pondérer le score par le flux adjoint fondamental. Pour chaque trace p d'une génération g , il faut mémoriser la quantité T_p calculée sur la trace, afin de la multiplier par le nombre de fissions induites par la trace p , R_p , lors de la génération $g + L$, où L est la longueur du cycle IFP. Soit :

$$X = \sum_p R_p T_p \quad (\text{III.25})$$

Selon la définition de T , on accède à différentes quantités X :

- Pour accéder au produit intégré des flux direct et adjoint, $\langle \Phi^\dagger, \Phi \rangle$, $T = l$, où l est la distance parcourue par le neutron.

- Pour accéder à la somme des temps de vie des neutrons $\langle \Phi^\dagger, \frac{1}{v} \Phi \rangle$, $T = \frac{l}{v} = t$, où v est la vitesse du neutron et t le temps calculé depuis la naissance du neutron.
- Pour accéder à la somme des variations d'absorptions, au premier ordre, $\langle \Phi^\dagger, \Delta \Sigma_a \Phi \rangle$, $T = \Delta \Sigma_a l$, où $\Delta \Sigma_a$ est la perturbation de la section d'absorption.
- Pour accéder à la somme des variations induites par les diffusions, $\langle \Phi^\dagger, \Delta S_s \Phi \rangle$, $T = \frac{\Delta \Sigma_s}{\Sigma_s}$, où $\Delta \Sigma_s$ est la perturbation de la section de diffusion.
- Etc.

Ces différentes quantités permettent de calculer directement les sensibilités, ou bien d'estimer des perturbations au premier ordre de manière très simple. Cette méthode applique scrupuleusement la théorie des perturbations au premier ordre. On dénote cependant une unique approximation très raisonnable, engendrée par le fait de propager un unique neutron durant L générations afin d'évaluer le flux adjoint. L'importance n'est alors pas évaluée « exactement » comme le principe des IFP le stipule, c'est-à-dire comme l'importance « moyenne » du neutron. Cette approximation statistique est susceptible de créer une sous-estimation de certaines quantités, comme par exemple la négligence systématique des traces de neutrons qui n'occasionnent pas, ou peu, de fissions (*e.g.* comme les neutrons fuyant la géométrie). Aucun comportement de ce type n'a cependant été identifié clairement³ dans les étapes de validation et de qualification de la méthode.

III.B.2 Méthode CLUTCH

Dans la lignée de la Méthode IFP, la méthode CLUTCH [15] pour *Contribution Linked eigenvalue sensitivity/Uncertainty estimation via Tracklength importance Characterization*, implémentée par C. M. Perfetti dans le code SCALE, permet un gain d'efficacité substantiel du calcul des perturbations premier ordre, notamment par le biais d'hypothèses relativement limitées. Elle est basée sur le principe des contributions [16]. Formellement, ce principe consiste à lier le flux adjoint en un point ϵ , au flux adjoint moyen des neutrons qui induisent une fission dans le reste du cœur lors de la même génération,

$$\Phi^\dagger(\epsilon) = \underbrace{\lambda}_{\text{Valeur Propre}} \left\langle \underbrace{\mathcal{G}(\epsilon \rightarrow \epsilon')}_{\text{Transport}} \underbrace{\nu(\epsilon') \Sigma_f(\epsilon')}_{\text{Production}} \underbrace{\chi(\epsilon' \rightarrow \epsilon'') \Phi^\dagger(\epsilon'')}_{\text{Importance des Productions}} \right\rangle \quad (\text{III.26})$$

où la fonction \mathcal{G} est la fonction de Green [2, 5] qui indique la probabilité pour un neutron en ϵ de voyager jusqu'à ϵ' . Cette équation s'obtient en faisant le bilan des importances (ou de la puissance asymptotique générée). Dans la méthode CLUTCH, lors du suivi des neutrons dans une génération, les scores à pondérer par l'adjoint aux points ϵ d'une histoire sont gardés en mémoire jusqu'à la fin complète de l'histoire. De cette façon, il est possible de relier chaque score en ϵ aux différents événements de fissions aux points ϵ' . La fonction $\mathcal{G}(\epsilon \rightarrow \epsilon')$ est donc implicitement simulée et il ne reste plus qu'à pondérer les scores par la section de production $\nu(\epsilon') \Sigma_f(\epsilon')$ par l'importance moyenne des neutrons issus des fissions en chaque point ϵ' ,

$$\mathcal{I}_{\epsilon'} = \lambda \int_{\epsilon''} \chi(\epsilon' \rightarrow \epsilon'') \Phi^\dagger(\epsilon'') d\epsilon'' \quad (\text{III.27})$$

et par la probabilité de fission en ϵ' . Reste à déterminer l'importance moyenne des neutrons issus de fission $\mathcal{I}_{\epsilon'}$ au cours du transport. Pour cela trois hypothèses sont avancées par la méthode :

- $\mathcal{I}_{\epsilon'} = \mathcal{I}_{\vec{r}', E', \hat{\Omega}'}$ ne dépend pas de l'angle incident, en effet, les sections efficaces ne dépendent pas de l'angle incident : cette hypothèse est strictement vérifiée.

³Nous verrons cependant qu'il existe bien une tendance à sous-estimer l'intégrale $\langle \Phi^\dagger, \frac{1}{v} \Phi \rangle$ lors du calcul du temps de vie effectif des neutrons que nous mettrons en place dans le chapitre V.

- $\mathcal{I}_{e'}$ = $\mathcal{I}_{\vec{r}', E'}$ dépend peu de l'énergie incidente du neutron E' . Ce qui est vrai, en partie, et selon les cas, puisque les spectres d'émission des neutrons varient peu, si ce n'est en fonction des concentrations des différents isotopes. Cette même variation de concentration est cependant prise en compte par la variation de position \vec{r}' . C. M. Perfetti n'évoque pas clairement cette hypothèse, mais aboutit à de bons résultats dans la pratique.
- $\mathcal{I}_{e'}$ = $\mathcal{I}_{\vec{r}'}$ peut être calculée préalablement sur un maillage spatial et utilisée par la suite pour pondérer l'importance des fissions (*cf.* encadré sur le sujet).

La difficulté de cette méthode consiste donc à évaluer l'importance moyenne des neutrons issus des sources de fission sur un maillage spatial suffisamment discrétisé ; à cette fin, les premières générations de la simulation sont utilisées afin de calculer l'adjoint par une méthode IFP. Ce flux adjoint moyen est effectivement rigoureusement accessible contrairement au flux adjoint ponctuel (*cf.* Eq. (II.41) page 36). Il est aussi possible de faire le lien entre $\mathcal{I}_{e'}$ et la source adjointe de fission évoquée dans le chapitre précédent qui peut être calculée en recherchant le premier vecteur propre de l'inverse de la matrice de fission.

III.B.3 Méthode des *Échantillons Corrélés*

La méthode des échantillons corrélés (*cf.* Sec. III.A.2.ii) évalue la perturbation de réactivité entre deux estimations du k_{eff} fortement corrélées. Cependant, cette méthode exacte sur le papier est confrontée à deux inconvénients techniques lors d'un calcul par itération de la puissance :

- Le premier inconvénient concerne un phénomène de sauts de variances (*cf.* encadré sur les limites des échantillons corrélés p. 75). Ces sauts de variances peuvent être limités, par le choix d'une configuration intermédiaire entre les états ① et ②, ou par l'introduction de pseudo-collisions⁴.
- Le second inconvénient concerne la normalisation des sources du problème perturbé. En effet, les sources du problème de référence et du problème perturbé sont liées par les traces des neutrons. Les poids des neutrons perturbés sont donc amenés à diverger lors de chaque renormalisation par l'état de référence. Pour limiter ce phénomène, des fenêtres de poids sont généralement utilisées afin de diminuer la variance des poids des neutrons perturbés. La source de fission du problème perturbé n'est donc pas propagée de manière exacte.

Ces deux inconvénients, qui limitent la convergence et la justesse, viennent restreindre l'application de cette méthode dans l'évaluation exacte des perturbations localement importantes. L'application de cette méthode (ou de la méthode de l'*échantillonnage des dérivées*) pour l'interprétation des mesures d'oscillations réalisées dans MINERVE fournit des résultats hétéroclites, qui montrent souvent un très bon accord avec la méthode de différence des valeurs propres, mais qui, parfois, sont victimes de sauts de variance très importants [17]. Nous serons amenés à présenter des comparaisons entre nos méthodes et la méthode des échantillons corrélés (*cf.* Sec. III.F.2).

⁴Une pseudo collision consiste à forcer certains événements dans le but de créer des traces complémentaires, qui viennent rétablir l'équivalence des domaines couverts par les lois de probabilités tirées dans les états ① et ②.

Illustrations de l'Importance Moyenne des Sources de Fission

Le travail de stage de C. BAYOL, encadrée dans cette thèse, a eu pour objectif de développer le calcul de l'importance de manière à accélérer la convergence de la valeur propre. Les importances calculées correspondent aux importances qui doivent être préalablement calculées avant un calcul par la méthode CLUTCH.

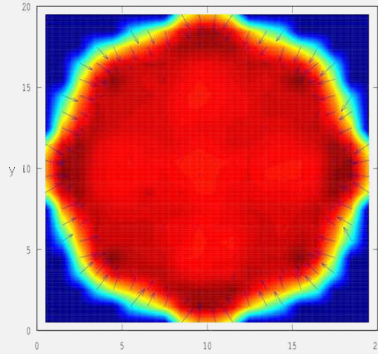


FIGURE III.1 – Importance moyenne des neutrons issus de fission dans un cœur de palier N_4 (Réacteur à Eau Pressurisée de 1450 MWe - coupe horizontale). Les flèches représentent la somme vectorielle des flux angulaires.

Afin de se faire une idée des variations spatiales des importances moyennes utilisées dans la méthode CLUTCH, nous en présentons quelques illustrations. Si sur les cœurs de très grande taille, l'importance spatiale varie très peu (cf. Fig. III.1), elle peut montrer de fortes variations en fonction de l'hétérogénéité du cœur comme sur le Cœur à Faible Vidange du futur prototype ASTRID (cf. Fig. III.2), ou dans des géométries avec des fuites impor-

tales (cf. Fig. III.3).

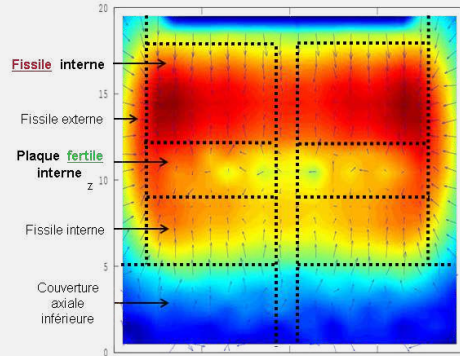


FIGURE III.2 – Importance moyenne des neutrons issus de fission dans le cœur CFV (coupe verticale). Les flèches représentent la somme vectorielle des flux angulaires.

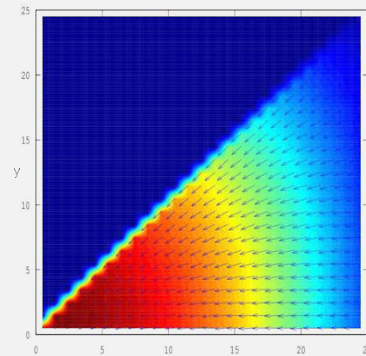


FIGURE III.3 – Importance moyenne des neutrons issus de fission dans réseau fini de 49×49 cellules UOX (coupe horizontale d' $1/8$ de la géométrie). Les flèches représentent la somme vectorielle des flux angulaires.

Des développements récents [11], réalisés en parallèle de cette thèse dans le code Monte Carlo SERPENT [18], montrent de très bons résultats du calcul des sensibilités de la réactivité, et même d'autres paramètres, aux données nucléaires. Ces développements combinent la méthode des échantillons corrélés et celle de la division des neutrons de manière à toujours simuler un état intermédiaire entre les configurations ① et ②. Dans le cas d'un calcul de sensibilité, cette expression est valable puisque les états ① et ② sont extrêmement proches. Il est fort probable que ce type de technique redonne un nouveau souffle aux échantillons corrélés. Nous pensons qu'il s'agit là de la méthode la plus prometteuse pour le calcul des sensibilités généralisées [19] mais qu'elle ne peut constituer une référence absolue pour le calcul exact des perturbations.

Limites des Échantillons Corrélés

Afin de mieux comprendre le fonctionnement et les limites de la méthode des *échantillons corrélés*, nous proposons d'intégrer, en Monte Carlo, une simple fonction linéaire à une variable.

Pour calculer l'intégrale \mathcal{A} de la fonction,

$$x \rightarrow f(x) = ax + b \quad (\text{III.28})$$

sur $x \in [0, 1]$, il est possible de tirer des nombres aléatoires x_i selon une loi uniforme (soit la loi de référence), $p(x) = 1$ et de sommer leur contribution $f(x_i)$ (où f s'apparente à une loi perturbée p^*). D'où :

$$\mathcal{A} \sim \frac{1}{N} \sum_i \frac{f(x_i)}{p(x_i)} \quad (\text{III.29})$$

pourvu que le nombre de tirages N soit assez grand. Pour $a = 2$, $b = 1$ et $N = 10000$, on trouve par exemple :

$$\mathcal{A} = 1.9969 \pm 0.0057 \quad (\text{III.30})$$

Analytiquement $\mathcal{A} = 2$. Mais il est aussi possible de tirer les points suivant une loi normale de moyenne μ et d'écart type σ (normalisée sur le segment $[0, 1]$, et obtenue dans la pratique via des méthodes de réjection),

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} / \int_0^1 p(x) dx \quad (\text{III.31})$$

Pour $\mu = 0.5$ et $\sigma = 0.5$, toujours avec $N = 10000$,

$$\mathcal{A} = 2.0145 \pm 0.0071 \quad (\text{III.32})$$

qui est très proche de notre calcul avec une loi uniforme. Cependant avec $\mu = 0.5$ et $\sigma = 0.1$, il est possible d'obtenir, toujours avec $N = 10000$, une fois,

$$\mathcal{A} = 1.6776 \pm 0.2004 \quad (\text{III.33})$$

et une autre fois,

$$\mathcal{A} = 2.6411 \pm 1.1540 \quad (\text{III.34})$$

On appelle cela des sauts de variance. L'origine de ces sauts provient des quelques rares événements qui peuvent être tirés sur des parties peu probables de la loi $p(x)$ de référence, et qui viennent, par moment, introduire une variance significative sur l'estimation de la loi perturbée. Ces sauts sont sources d'erreur lorsque le nombre de points tirés n'est pas assez grand ; pire encore, si le domaine en x des lois $p(x)$ et $f(x)$ est différent, l'intégration n'est plus mathématiquement correcte. Pour que la méthode des échantillons corrélés reste numériquement exacte il faut que les fonctions $p(x)$ et $f(x)$ soient « proches ».

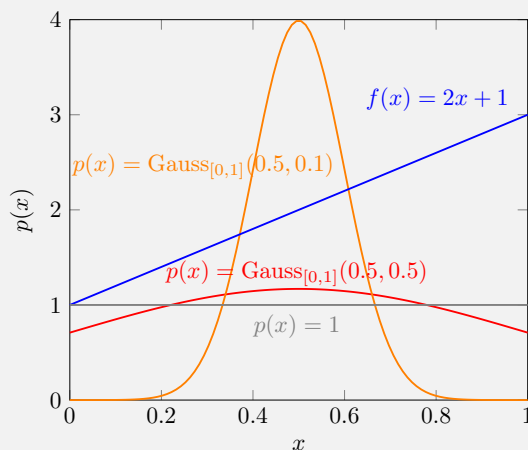


FIGURE III.4 – Distributions de probabilités $p(x)$ pour intégrer $f(x)$. $\text{Gauss}_{[0,1]}(\mu, \sigma)$ est la gaussienne de moyenne μ et d'écart type σ renormalisée à l'unité sur l'intervalle $[0, 1]$.

III.B.4 Synthèse

En appui de notre réflexion, le lecteur pourra se référer au tableau III.1. La Méthode des IFP implémentée dans le code MCNP, ou la méthode CLUTCH du code SCALE, ne sont pas en mesure de calculer une perturbation exacte de réactivité car elles appliquent une formulation premier ordre. En effet, rappelons le, chaque trace de neutron évolue dans un état du cœur (disons l'état ②), ce qui implique que l'importance de chaque événement sur la trace est calculée via l'ensemble des fissions ultérieures en lien avec cet événement. Certaines de ces fissions ultérieures supposent que le neutron a continué son chemin dans l'état ②, ce qui ne permet pas non plus de relancer les fissions de la génération dans

TABLEAU III.1 – Synthèse des différentes méthodes du calcul de perturbation de réactivités Monte Carlo

Méthode	Exacte	1 ^{er} ordre	Hypothèses	Projection des effets	Evolutions vers Exacte	Technicité
Différence des Valeurs Propres	✓	✗	✗	✗	-	Très Simple
Méthode IFP 1er ordre	✗	✓	✗	✓	Difficile	Simple
Méthode CLUTCH	✗	✓	Maillage $\mathcal{I}(\vec{r})$	✓	Difficile	Simple
Échantillons corrélés	✗	✓	✗	✓	Envisageable	Envisageable

l'état ① pour en obtenir le flux adjoint. Le principe de *contribution*, évoqué dans la description de la méthode CLUTCH n'est donc, *a priori*, pas applicable en l'état. Dans le but d'évaluer, malgré tout, une perturbation exacte de réactivité, ces méthodes doivent être améliorées. Trois voies sont envisageables :

- Calculer des perturbations à des ordres supérieurs pour corriger la formule premier ordre. De tels travaux sont en cours dans le code MCNP via l'utilisation de la matrice de fission [20]. Il nous semble peu probable que ces méthodes puissent fournir des résultats probants sur tout type de perturbation. Néanmoins cette approche peut représenter un bon compromis pourvu que l'on reste dans le domaine de validation/qualification de la méthode. Notons également que les aspects polyénergétiques peuvent être mal traités par les méthodes de reconstruction par harmoniques du flux [21].
- Il serait aussi possible d'utiliser les échantillons corrélés au travers de l'implémentation, voire d'une revisite des travaux récents menés dans SERPENT (*cf.* Sec. III.B.3). Une perturbation quasi-exacte est envisageable puisqu'ayant accès sur chaque trace aux poids du neutron perturbé et du neutron de référence, il est possible de stocker les sources de fission (perturbées et de référence) dans l'état ② du cœur. Ces sources peuvent ensuite être relancées dans l'état ① afin d'en déterminer l'importance (*i.e.* l'IFP). Une telle méthode présenterait une efficacité bien supérieure aux développements réalisés dans cette thèse mais conserverait, en partie, les désavantages et approximations des simulations par échantillons corrélés. Le caractère très récent de ces avancées n'a pas permis leur implémentation dans le code TRIPOLI-4[®] au cours de cette thèse.
- La méthode du dédoublement appliquée aux perturbations très localisées dédouble les neutrons dont les traces interceptent la zone perturbée, pour simuler un parcours dans le milieu perturbé et un autre dans le milieu de référence. Nous proposons une évolution de cette méthode sous le nom de Méthode du Corps Noir (*cf.* Black Body Exact Perturbation (BBEP), section III.C.3).

III.C Approches Envisagées dans cette Thèse

L'un des objectifs principaux de cette thèse était d'implémenter dans le code TRIPOLI-4[®] une méthode à même de réaliser un calcul sans approximation de la théorie exacte des perturbations ainsi que de réaliser la projection des effets sur les différents opérateurs. L'application d'une des formules (*cf.* Eq. (III.15)), par exemple,

$$\Delta\rho = \frac{\langle \Phi_1^\dagger, [\lambda_1 \Delta\mathcal{P} - \Delta\mathcal{K}] \Phi_2 \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_2 \Phi_2 \rangle} \quad (\text{III.35})$$

nécessite le calcul du flux direct et adjoint fondamental de l'équation homogène (critique), ainsi que de la différence des opérateurs neutroniques. Le flux direct doit être calculé dans l'état ② du réacteur, et le

flux adjoint dans l'état ①. Aucune méthode présentée dans notre état de l'art ne permet l'application en l'état de la formulation exacte des perturbations ainsi qu'une décomposition des effets sur les isotopes et réactions. De manière à réaliser cette intégration exacte, trois principes de calcul ont été envisagés :

- Par intégration Monte Carlo « classique » : tirage de points sur l'espace des phases et calcul des différentes grandeurs.
- Par l'enchaînement d'un calcul de flux direct puis de flux adjoint.
- Par le calcul de la perturbation induite par un corps noir.

III.C.1 Perturbations « Exactes » par Approche Ponctuel

Calculer l'intégrale d'une fonction $\epsilon \rightarrow f$ de $\mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ en Monte Carlo consiste à échantillonner un ensemble de N points ϵ_i de l'espace des phases \mathcal{E} de manière uniforme (ou biaisé utilement) et à sommer leur contribution $f(\epsilon_i)$. La loi des grands nombres assure que :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \underbrace{\left[\int_{\mathcal{E}} d\epsilon \right]}_{\text{Volume}} \frac{\sum_i f(\epsilon_i)}{N} = \int_{\mathcal{E}} f(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{III.36})$$

et procure un intervalle de confiance de l'intégrale obtenue :

$$\begin{aligned} \sigma^2 \left[\left[\int_{\mathcal{E}} d\epsilon \right] \frac{\sum_i f(\epsilon_i)}{N} \right] &= \frac{\left[\int_{\mathcal{E}} d\epsilon \right]^2}{N^2} \sum_i \sigma^2[f(\epsilon_i)] \\ &= \left[\int_{\mathcal{E}} d\epsilon \right]^2 \frac{\sigma^2[f(\epsilon_i)]}{N} \end{aligned} \quad (\text{III.37})$$

Pour calculer (III.35), il faut définir deux fonctions f , une correspondant au numérateur et l'autre au dénominateur ; ces deux fonctions peuvent utiliser ou non les mêmes points d'intégration. En chaque point tiré, il faut chercher à estimer le flux direct $\Phi_2(\epsilon_i)$ et adjoint $\Phi_1^\dagger(\epsilon_i)$, ainsi que les différences des opérateurs $\Delta\mathcal{K}(\epsilon_i)$ et $\Delta\mathcal{P}(\epsilon_i)$ (*i.e.* la différence des sections efficaces⁵). Par exemple, la partie de l'intégrale du numérateur de (III.35) attribuée à une section d'absorption macroscopique Σ_a peut être calculée de la façon suivante :

$$\langle \Phi_1^\dagger, \Delta\Sigma_a \Phi_2 \rangle = \sum_i \Phi_1^\dagger(\epsilon_i) [\Sigma_{a,2}(\epsilon_i) - \Sigma_{a,1}(\epsilon_i)] \Phi_2(\epsilon_i) \quad (\text{III.38})$$

Le calcul du flux adjoint peut être réalisé, comme nous l'avons vu, en un point ϵ en calculant l'importance d'un neutron placé en ϵ , tandis que le calcul du flux direct en un point, lui, est beaucoup plus complexe. Afin d'estimer un flux direct Monte Carlo en un point ϵ de l'espace des phases, nous avons envisagé quatre méthodes :

1. Une première méthode consiste à forcer les neutrons évoluant autour de ϵ à occasionner un score en ϵ . Les lois du transport sont alors modifiées (*i.e.* biaisées) de manière à diriger le neutron vers le score voulu. Cette méthode est implémentée dans le code TRIPOLI-4[®] [22] mais se limite à l'estimation de scores intégrés en angle et en énergie. Elle n'est donc pas utilisable dans l'état pour estimer un flux direct en un point. S'il semble parfois envisageable de biaiser les sections doublement différentielles de manière à obtenir un flux ponctuel également en énergie, aucune solution ne semble exister en ce qui concerne le biaisage de la dimension angulaire.

⁵Nous verrons par la suite que cette affirmation est en fait légèrement plus complexe en ce qui concerne les sections de fission ou les sections différentielles.

2. Une seconde méthode décrite par K. Banerjee [23], est basée sur une reconstruction du score par noyau statistique et semble donner de bons résultats. Nous avons d'ailleurs pu tester cette méthode en préambule de notre travail de thèse dans une maquette de code Monte Carlo, analogue, à une dimension et à un seul groupe d'énergie, construite en C++ afin de valider le calcul des IFP. La figure III.5, représente une image directement générée par ce code où le flux direct (violet), calculé aux points exacts où ont été lancées les sources adjointes qui ont permis le calcul du flux adjoint (vert). Le flux direct a donc été reconstruit en chaque point source ϵ^6 via l'estimation du noyau statistique :

$$f_h(\epsilon) = \frac{1}{Nh} \sum_{i=1}^N \frac{e^{-\frac{1}{2}\epsilon^2}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\epsilon - \epsilon_i}{h} \right) \quad (\text{III.39})$$

La variance de l'intégrale n'avait pas été calculée dans notre travail, mais K. Banerjee montre [23] qu'il est aussi possible de l'estimer à partir de l'ensemble des N collisions ϵ_i . La valeur du paramètre h , obtenue ici via l'analyse *a posteriori* de l'ensemble des collisions peut aussi être obtenue *au vol*. Quelques doutes subsistent quant à l'estimation via cette méthode de scores angulaires, puisqu'il existe des cas pour lesquels les flux en transport ne sont pas continus, notamment selon les variables angulaires (*cf.* Sec. II.C.1.ii).

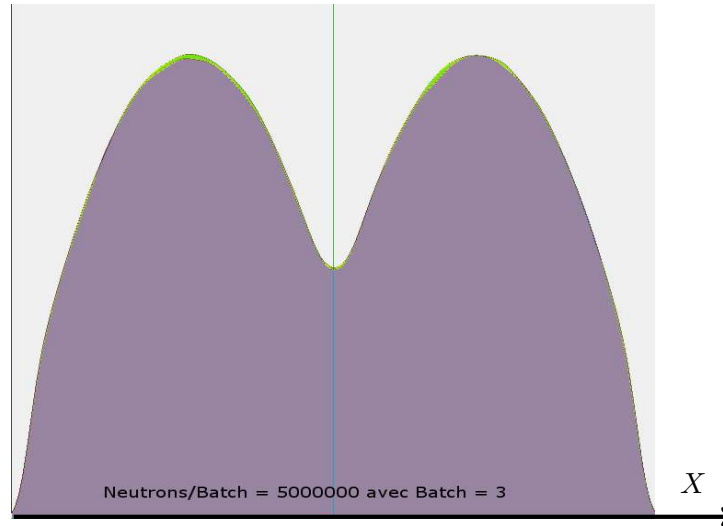


FIGURE III.5 – Image générée par une maquette de code Monte Carlo 1D (Axe X) créée au début de cette thèse afin de vérifier le principe des IFP. On y voit le flux direct et le flux adjoint (obtenu par méthode IFP et un cycle de trois générations), reconstruits à partir de l'ensemble des collisions générées via une méthode d'estimation du noyau statistique, qui se recourent. La géométrie traitée était constituée d'un milieu combustible au centre duquel était placé un milieu plus absorbant.

3. Une troisième méthode, testée dans cette thèse sans donner hélas de résultats très probants, consistait à rassembler l'ensemble des collisions ayant eu lieu autour d'un point de l'espace de phase ϵ , et à faire la régression à 6 dimensions (espace, énergie, angle) du flux à partir de l'ensemble des collisions sur cet espace restreint. Les résultats obtenus se sont avérés forts décevants, se heurtant notamment à la définition de l'espace des phases restreint, variable selon le point de l'espace des phases à interpoler, mais aussi et surtout selon les types de cellule traités. Un autre problème de taille concernait la rareté des événements autour du point à interpoler. Il est fort probable que la méthode précédente d'estimation du flux par estimation du noyau statistique soit elle aussi confrontée à une rareté des événements dans la détermination du flux et des paramètres h de chaque dimension, notamment d'un point de vue angulaire (le travail de K. Banerjee se limitait à l'estimation de flux scalaires [23]).

⁶En transport 1D à un groupe d'énergie un point ϵ est identifié par une unique valeur numérique liée à l'unique dimension spatiale.

4. Enfin une quatrième et dernière méthode consisterait à réaliser un calcul IFP similaire à celui que nous réalisons pour le calcul du flux adjoint, mais utilisant un transport inversé des particules (cf. Sec. II.A.2.ii). Les sections adjointes continues n'ont hélas pas pu être obtenues dans cette thèse.

De toutes ces méthodes, il semblerait que seule la méthode « IFP inversée », (*i.e.* un calcul IFP réalisé dans le cadre d'un transport adjoint utilisant des sections efficaces adjointes), soit en mesure d'estimer correctement un flux direct ponctuel. Parce que le flux direct ne pouvait être estimé ponctuellement selon une méthode de référence, nous avons choisi d'implémenter les méthodes des perturbations décrites dans les parties suivantes.

III.C.2 Perturbations « Exactes » par Collision (CEP)

Au lieu de tirer les points dans l'espace des phases, considérons qu'un calcul Monte Carlo de transport direct des neutrons génère une liste d'évènements « collision » aux points ϵ_i , de poids w_i , et d'indice i , dans un volume V de l'espace des phases. Alors la somme de ces poids dans ce volume correspond au taux de réaction \mathcal{R}_v , total du volume V ,

$$\mathcal{R}_v = \sum_i w_i \quad (\text{III.40})$$

et le flux direct Φ_v dans ce volume est défini comme :

$$\Phi_v = \frac{1}{V} \sum_i \frac{w_i}{\Sigma_t(\epsilon_i)} \quad (\text{III.41})$$

où Σ_t est la section totale du milieu. Cette dernière équation est l'expression de l'estimateur « collision » du volume, il en existe d'autres comme l'estimateur « corde » ou l'estimateur « point » que nous avons déjà évoqués. Les termes du numérateur de (III.35) correspondant à l'effet de la section d'absorption macroscopique Σ_a peuvent donc être calculés de la façon suivante :

$$\langle \Phi_1^\dagger, \Delta \Sigma_a \Phi_2 \rangle = \sum_i \Phi_1^\dagger(\epsilon_i) [\Sigma_{a,2}(\epsilon_i) - \Sigma_{a,1}(\epsilon_i)] \frac{w_i}{\Sigma_t(\epsilon_i)} \quad (\text{III.42})$$

Il suffit alors que les collisions aient été réalisées dans l'état ② du réacteur, et que pour chaque point de collision ϵ_i , on soit en mesure d'évaluer un flux adjoint ponctuel dans l'état ①. Le calcul de l'IFP répond à ces critères puisqu'elle permet d'évaluer une importance en chaque point ϵ_i . La méthode que nous implémenterons (cf. Sec. III.D) en suivant ce principe sera appelée Méthode CEP pour *Collision-based Exact Perturbations*.

III.C.3 Perturbations « Exactes » par Corps Noir

La théorie associée à cette méthode a été développée dans les derniers mois de cette thèse. Pour cette raison, hélas, peu d'applications seront proposées bien qu'il s'agisse d'une avancée certaine pour le calcul exact des perturbations très localisées, voire des perturbations généralisées induites par une perturbation locale.

III.C.3.i Perturbations de Réactivité (BBEP)

Cette méthode, que nous introduisons sous le nom de BBEP pour *Black Body Exact Perturbation*, est restreinte à la perturbation d'un volume local V_{Pert} . Définissons un état ② où le volume V_{Pert} est remplacé par un corps noir. C'est-à-dire un milieu purement capturant, sans source (donc $\mathcal{P}_2|_{\vec{r} \in V_{\text{Pert}}} = 0$) et un état ① caractérisé par les opérateurs \mathcal{K}_1 et \mathcal{P}_1 . Alors, le terme du numérateur de l'expression des perturbations qui s'intègre sur le volume V_{Pert} ,

$$\langle \Phi_1^\dagger, [\lambda_1 \Delta \mathcal{P} - \Delta \mathcal{K}] \Phi_2 \rangle_{V_{\text{Pert}}} \quad (\text{III.43})$$

peut être transformé en une intégrale de la surface du volume S_{Pert} . En effet, le flux Φ_2 dans le volume est nul : le corps noir arrête tout neutron qui tente de pénétrer. Il est donc possible d'écrire que le taux de réaction $\langle \mathcal{K}_2 \Phi_2 \rangle_{V_{\text{Pert}}}$ intégré sur le volume perturbé est égal au courant entrant sur la surface perturbée :

$$\langle \mathcal{K}_2 \Phi_2 \rangle_{V_{\text{Pert}}} = \Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \quad (\text{III.44})$$

tandis que $\Phi_2|_{\vec{r} \in V_{\text{Pert}}} = 0$ implique :

$$\langle [\lambda_1 \mathcal{P}_1 - \mathcal{K}_1] \Phi_2 \rangle_{V_{\text{Pert}}} = 0 \quad (\text{III.45})$$

Au final, il vient :

$$\langle \Phi_1^\dagger, [\lambda_1 \Delta \mathcal{P} - \Delta \mathcal{K}] \Phi_2 \rangle_{V_{\text{Pert}}} = \langle \Phi_1^\dagger, \Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \rangle \quad (\text{III.46})$$

L'estimation d'une telle quantité nous ramène au chapitre second de cette thèse (*cf.* Sec. II.B.2.i) et implique un stockage du courant sur la surface S_{Pert} dans la configuration ② (*i.e.* le stockage de chaque neutron traversant la surface S_{Pert}), puis un calcul d'adjoint IFP initialisé à partir des neutrons de ce courant. Afin d'estimer la quantité au dénominateur,

$$\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_2 \Phi_2 \rangle \quad (\text{III.47})$$

il est possible de réaliser le stockage des sources de fission $S_2 = \mathcal{P}_2 \Phi_2$ dans la configuration ② pour les relancer dans une simulation ① d'importance IFP. La perturbation s'obtient alors comme :

$$\Delta \rho_{\text{CN}} = \frac{\langle \Phi_1^\dagger, \Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, S_2 \rangle} \quad (\text{III.48})$$

Dans l'état, cette méthode ne permet hélas pas la décomposition des effets sur les réactions et isotopes, mais autorise néanmoins le calcul de la variation globale de réactivité de manière exacte. Notons aussi que l'estimation d'une intégrale du type $\langle \Phi_1^\dagger, S \rangle$ ne demande pas de développement spécifique dans un code Monte Carlo, puisqu'il est généralement possible d'accéder à la suite des k_g des premières générations g afin d'en calculer leur importance pour un cycle IFP de longueur L ($\prod_{g=1}^L k_g$), ainsi que de stocker les neutrons traversant certaines surfaces pour obtenir $\Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+}$. Les variances associées à chaque intégrale peuvent se calculer aisément en répétant le calcul avec des graines de générateurs aléatoires différentes.

L'expression (III.48) avait déjà été obtenue par Smith [24], mais elle était alors lourdement simplifiée avant d'être appliquée. Cependant, elle n'impliquait pas une perturbation vis-à-vis d'un corps noir, et dérivait d'une expression plus générale,

$$\Delta \rho = \frac{\langle \Phi_1^\dagger, \Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \rangle - \langle \Phi_1^\dagger, \Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^-} \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, S_2 \rangle} \quad (\text{III.49})$$

qui implique la détermination du flux angulaire sortant et entrant du volume perturbé. De plus, à l'époque, il n'était pas envisagé d'utiliser le principe des IFP pour obtenir le flux adjoint en Monte Carlo.

III.C.3.ii Extension aux Perturbations Généralisées « Exacte » (BBEGPT)

Bien que nous ne l'ayons pas introduit dans cette thèse, la théorie « exacte » des perturbations généralisées [19] permet de calculer de manière exacte les perturbations d'une grandeur neutronique quelconque engendrées par la variation d'autres paramètres. Aussi, la variation d'un ratio de deux quantités dépendantes du flux,

$$R = \frac{N}{D} = \frac{\langle n \Phi \rangle}{\langle d \Phi \rangle} \quad (\text{III.50})$$

induite par une perturbation d'un état ② à ①, peut s'écrire :

$$\delta R = \frac{D_2}{N_1} \left[\frac{\langle \Delta n \Phi_2 \rangle}{N_1} - \frac{\langle \Delta d \Phi_2 \rangle}{D_1} - \left\langle \Psi_1^\dagger, \left[\Delta \mathcal{K} - \frac{\Delta \mathcal{P}}{k_2} \right] \Phi_2 \right\rangle \right] \quad (\text{III.51})$$

Où Ψ_1^\dagger est la solution du problème à source adjoint :

$$\left(\mathcal{K}_1^\dagger - \frac{\mathcal{P}_1^\dagger}{k_1} \right) \Psi_1^\dagger = \frac{n_1^\dagger v}{N_1} - \frac{d_1^\dagger v}{D_1} \quad (\text{III.52})$$

et v la fonction unité. Si la perturbation est effectuée vis-à-vis d'un corps noir, il est possible de simplifier ces expressions, (III.51) devient :

$$\Delta R = \frac{D_2}{N_1} \left[\frac{\langle \Delta n \Phi_2 \rangle}{N_1} - \frac{\langle \Delta d \Phi_2 \rangle}{D_1} - \left\langle \Psi_1^\dagger, \Phi_2 |_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \right\rangle \right] \quad (\text{III.53})$$

Pour appliquer cette formule dans un code Monte Carlo suite à une perturbation locale de \mathcal{P} et \mathcal{K} , il suffit :

- De remplacer la zone perturbée par un corps noir.
- De réaliser un calcul critique dans les états ② et ① de manière à encaisser les taux N_1 , D_1 , N_2 , D_2 .
- Dans l'hypothèse où :

$$\Delta n \Phi_2 = N_2 - \frac{n_1}{n_2} N_2 = N_2 \left(1 - \frac{n_1}{n_2} \right) \quad (\text{III.54})$$

$$\Delta d \Phi_2 = D_2 - \frac{d_1}{d_2} D_2 = D_2 \left(1 - \frac{d_1}{d_2} \right) \quad (\text{III.55})$$

il est possible de calculer les termes $\frac{\langle \Delta n \Phi_2 \rangle}{N_1}$ et $\frac{\langle \Delta d \Phi_2 \rangle}{D_1}$, ce qui est le cas lorsque n et d sont des sections efficaces macroscopiques dont on a fait varier la concentration. Ces sections peuvent aussi être constantes, ce qui annule ces deux termes. Si cette hypothèse n'est pas vérifiée, il faut calculer deux scores dont l'un doit être déterminé sur un milieu fictif (TRIPOLI-4[®] autorise la définition de ce genre de score).

- Il ne reste plus que l'intégrale,

$$\left\langle \Psi_1^\dagger, \Phi_2 |_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \right\rangle \quad (\text{III.56})$$

pouvant être calculée via le stockage des neutrons entrant dans le corps noir (de manière similaire à la perturbation de réactivité), suivi d'une relance dans un calcul de l'importance. Attention, il s'agit d'une importance ne pouvant pas être obtenue via les IFP puisqu'il s'agit d'une équation adjointe hétérogène. On se propose de résoudre l'équation adjointe (III.52) en créant deux scores,

$$\langle n_1 \Psi_1 \rangle \quad (\text{III.57})$$

$$\langle d_1 \Psi_2 \rangle \quad (\text{III.58})$$

évalués dans une simulation directe de l'équation à sources :

$$\left(\mathcal{K}_1 - \frac{\mathcal{P}_1}{k_1} \right) \Psi_1 = \Phi_2 |_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \quad (\text{III.59})$$

L'importance Ψ_1^\dagger globale de la source $\Phi_2 |_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+}$ est alors égale à :

$$\frac{\langle n_1 \Psi_1 \rangle}{N_1} - \frac{\langle d_1 \Psi_1 \rangle}{D_1} \quad (\text{III.60})$$

Rigoureusement, il sera impossible de résoudre directement l'équation (III.59) déjà rendue critique par la division de l'opérateur de fission \mathcal{P}_1 par k_1 . En première approximation, le code Monte Carlo peut résoudre :

$$(\mathcal{K}_1 - \mathcal{P}_1) \Psi_1 = \Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \quad (\text{III.61})$$

pourvu que $k_1 < 1$. Une méthode récemment proposée par C. Perfetti [25] peut néanmoins permettre une résolution rigoureuse et pratique de cette équation très proche du principe des IFP.

- Pour synthétiser, un calcul exact de perturbation généralisée doit être effectué sur plusieurs processeurs, chacun ayant pour tâche d'enchaîner trois simulations (deux directes et une suivant le principe introduit par C. Perfetti), de manière à calculer une série de ΔR ,

$$\Delta R = \frac{D_2}{N_1} \left[\frac{N_2(1 - \frac{n_1}{n_2})}{N_1} - \frac{D_2(1 - \frac{d_1}{d_2})}{D_1} - \frac{\langle n_1 \Psi \rangle}{N_1} + \frac{\langle d_1 \Psi \rangle}{D_1} \right] \quad (\text{III.62})$$

Dans le cas où $\Delta n = 0$ et $\Delta d = 0$, il n'y a plus que deux calculs nécessaires et :

$$\Delta R = -\frac{D_2}{N_1} \left[\frac{\langle n_1 \Psi \rangle}{N_1} + \frac{\langle d_1 \Psi \rangle}{D_1} \right] \quad (\text{III.63})$$

Cette série permet d'obtenir la perturbation moyenne et son écart type.

III.C.4 Synthèse des Approches Envisagées

Sur les trois méthodes que nous avons envisagées, deux seront développées et appliquées dans cette thèse :

- La Méthode Exacte des Perturbations par Collision CEP.
- La Méthode Exacte des Perturbations par Corps Noir BBEP.

Afin d'aider à la compréhension et de bien cerner les différences entre les deux méthodes, les figures III.6 et III.7 présentent de façon schématique les différents calculs devant être réalisés afin de calculer un effet $\Delta\rho_{2,1}$ entre une configuration ① à ②. Les indications nécessaires à la compréhension sont présentes dans les légendes des figures.

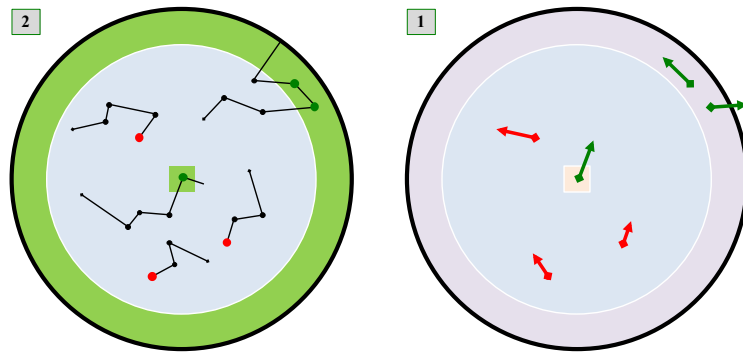


FIGURE III.6 – *Méthode CEP*. Géométries de calcul de la perturbation globale de réactivité entre les états ① et ②, par la méthode des collisions. Dans la méthode des collisions, l'état ② est l'état de référence dans lequel les collisions ayant lieu dans les volumes perturbés (en vert) sont stockées, puis relancées dans la configuration ①. De la même manière on stocke aussi les fissions de la configuration ② (en rouge). On accède alors directement à la différence de réactivité $\Delta\rho_{2,1}$.

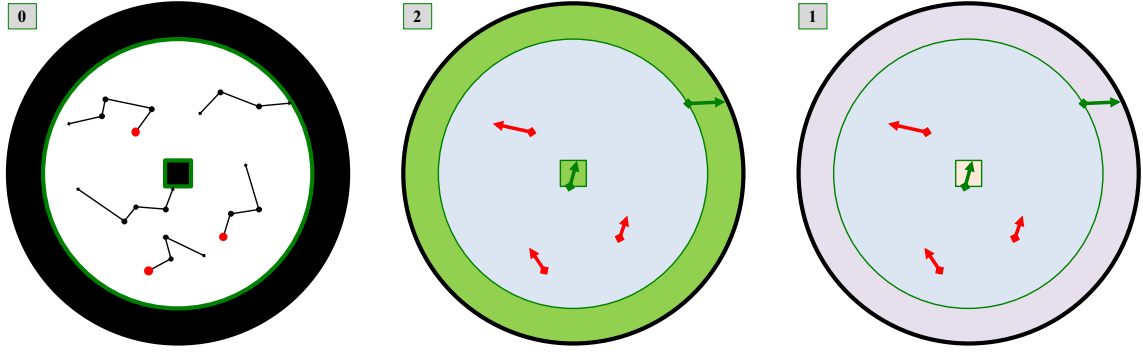


FIGURE III.7 – *Méthode BBEP*. Géométries de calcul de la perturbation globale de réactivité entre les états ① et ②, par la méthode du corps noir. Le premier calcul est réalisé dans une configuration de référence où tous les volumes perturbés sont remplacés par un corps noir (en noir). Ici le centre et la périphérie du réacteur sont perturbés. Les neutrons traversant les surfaces des volumes perturbés (en vert) sont stockés, tout comme les sources de fission (en rouge). Ce calcul permet d’initialiser deux autres calculs dans des configurations ① et ② de manière à calculer les perturbations de réactivité $\Delta\rho_1 = \rho_1 - \rho_{CN}$ et $\Delta\rho_2 = \rho_2 - \rho_{CN}$, et in fine $\Delta\rho_{2,1} = \rho_2 - \rho_1$.

III.D Implémentation des Perturbations Exactes par Collision (CEP)

III.D.1 Méthode & Choix d’implémentation

III.D.1.i Théorie Appliquée

Le principe de la Méthode Exacte des Perturbations par Collision (*Collision-based Exact Perturbation*, CEP) est très proche du principe de Contribution dont s’inspire la méthode CLUTCH. Cependant, il fallait introduire les modifications nécessaires afin d’appliquer scrupuleusement les expressions de la théorie exacte des perturbations. Cela ne peut être fait que par le biais de deux calculs : un calcul direct dans l’état ②, un calcul IFP adjoint (de type AIWS) dans l’état ①. La méthode consiste à évaluer en chaque point de collision, la différence d’importance dans l’état ① qu’engendre un évènement sur le parcours du neutron dans l’état ②.

Afin de préciser les grandeurs à calculer, reprenons l’expression exacte des perturbations, et en particulier le terme du numérateur,

$$\left\langle \Phi_1^\dagger, \left[\Delta\mathcal{K} - \frac{\Delta\mathcal{P}}{k_1} \right] \Phi_2 \right\rangle \quad (\text{III.64})$$

dans lequel \mathcal{K} est l’opérateur de disparition,

$$\begin{aligned} \mathcal{K}\Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) &= -\text{div}[\hat{\Omega} \cdot \Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})] + \Sigma_t(\vec{r}, E)\Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) \\ &\quad - \int_{E', \hat{\Omega}'} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})\Phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')dE'd^2\hat{\Omega}' \end{aligned} \quad (\text{III.65})$$

et \mathcal{P} ⁷ est l’opérateur de production,

$$\mathcal{P}\Phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_{E', \hat{\Omega}'} \nu(\vec{r}, E)\Sigma_f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}')\Phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')dE'd^2\hat{\Omega}' \quad (\text{III.66})$$

⁷Nous avons inclus la probabilité de transfert du neutron directement dans les opérateurs, l’implication du spectre de fission χ_f est implicite : $\Sigma_f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = \chi_f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}')\Sigma_f(\vec{r}, E)$. Il en va de même pour le terme de diffusion $\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})$.

En différenciant l'opérateur \mathcal{K} , tel que $\Delta\mathcal{K} = \mathcal{K}_2 - \mathcal{K}_1$, on obtient :

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{K}\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) &= \Delta\Sigma_t(\vec{r}, E)\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) \\ &\quad - \int_{E', \hat{\Omega}'} \Delta\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})\Phi_2(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')dE'd^2\hat{\Omega}' \end{aligned} \quad (\text{III.67})$$

En différenciant l'opérateur \mathcal{P} , tel que $\Delta\mathcal{P} = \mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$, on obtient :

$$\Delta\mathcal{P}\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_{E', \hat{\Omega}'} \Delta \left[\nu(\vec{r}, E)\Sigma_f(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \right] \Phi_2(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')dE'd^2\hat{\Omega}' \quad (\text{III.68})$$

En multipliant (III.67) et (III.68) à droite, par le flux adjoint $\Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ et en intégrant en angle et en énergie, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{E, \hat{\Omega}} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})\Delta\mathcal{K}\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega} &= \\ &+ \int_{E, \hat{\Omega}} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})\Delta\Sigma_t(\vec{r}, E)\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega} \\ &- \int_{E, \hat{\Omega}} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) \int_{E', \hat{\Omega}'} \Delta\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})\Phi_2(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')dE'd^2\hat{\Omega}'dEd^2\hat{\Omega} \end{aligned} \quad (\text{III.69})$$

qui est équivalent à,

$$\begin{aligned} \int_{E, \hat{\Omega}} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})\Delta\mathcal{K}\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega} &= \\ &+ \int_{E, \hat{\Omega}} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})\Delta\Sigma_t(\vec{r}, E)\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega} \\ &- \int_{E', \hat{\Omega}'} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') \int_{E, \hat{\Omega}} \Delta\Sigma_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}')\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega}dE'd^2\hat{\Omega}' \end{aligned} \quad (\text{III.70})$$

puisque les bornes d'intégration sont identiques ; de même pour le terme de production :

$$\begin{aligned} \int_{E, \hat{\Omega}} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E, \hat{\Omega})\Delta\mathcal{P}\Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega} &= \\ \int_{E', \hat{\Omega}'} \Phi_1^\dagger(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') \int_{E, \hat{\Omega}} \Delta \left[\nu(\vec{r}, E)\Sigma_f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \right] \Phi_2(\vec{r}, E, \hat{\Omega})dEd^2\hat{\Omega}dE'd^2\hat{\Omega}' \end{aligned} \quad (\text{III.71})$$

Afin de calculer (III.70) et (III.71) de manière exacte, nous rassemblons les sections efficaces en six groupes de macro-réactions, de manière similaire aux différentes sections efficaces utilisées par le code ERANOS :

- Le groupe des captures. Constitué par l'ensemble des sections qui ne ré-émettent pas de neutrons, $(n, \gamma) + (n, p) + \dots + (n, \alpha)$.
- Le groupe des diffusions élastiques, qui inclut :
 - Les sections de diffusion élastique.
 - Les sections de diffusion thermique élastique cohérente.
 - Les sections de diffusion thermique élastique incohérente.
 - Les sections de diffusion thermique inélastique incohérente.
- Le groupe des diffusions inélastiques, soit des réactions qui renvoient un neutron ainsi que d'autres particules :
 - Les sections de diffusion inélastique discrète.

- Les sections de diffusion inélastique continue.
- Les sections de diffusion $(n, n\alpha)$.
- Les sections de diffusion (n, np) .
- Le groupe des (n, xn) , qui inclut :
 - Les sections $(n, 2n)$.
 - Les sections $(n, 3n)$.
 - Les sections $(n, 4n)$.
 - Les sections $(n, 2n\alpha)$.
- Le groupe des neutrons prompts.
- Le groupe des neutrons retardés.

À titre d'exemple, dérivons maintenant les expressions des effets de capture, de diffusion et de fission. Considérons pour cela la figure III.8. Un neutron incident (en rouge) appartenant à l'état ② du réacteur provoque une collision en ϵ avec le milieu. Au point de cette collision, le code réalisera le tirage de chaque réaction possible pour chaque isotope i . Soit dans notre exemple, le tirage d'un point de l'espace des phases, $\epsilon_{s,i}$, correspondant à l'état du neutron après diffusion, et le tirage d'un point $\epsilon_{f,i}$ correspondant à l'état du neutron après fission. Une simulation adjointe IFP dans l'état ① du réacteur sera initialisée par des sources en $\epsilon_{s,i}$, $\epsilon_{f,i}$ et ϵ , (en vert) de manière à calculer les valeurs des flux adjoints en ces différents points, soit, respectivement : $w_{s,i}^\dagger(\epsilon_{s,i})$, $w_{f,i}^\dagger(\epsilon_{f,i})$ et $w_{a,i}^\dagger(\epsilon)$.

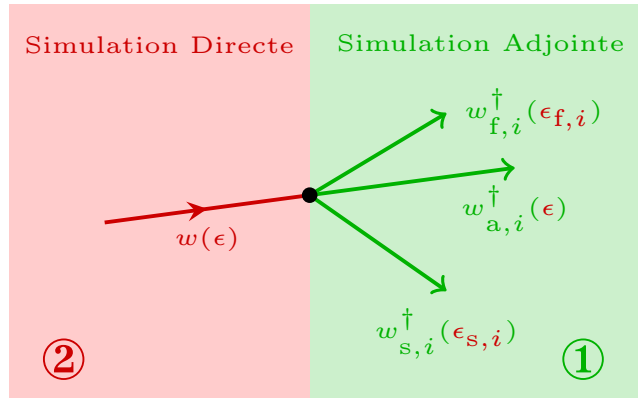


FIGURE III.8 – Principe de la méthode des perturbations par collision : évaluation de chaque contribution lors d'une collision.

L'intégrale (III.70) contient intrinsèquement le terme de capture (par la section totale). La contribution de l'évènement de capture de la figure III.8 à cette intégrale correspond à :

$$\delta\rho_C = -w_{a,i}^\dagger(\epsilon)\Delta\Sigma_c(\epsilon)\frac{w}{\Sigma_t(\epsilon)} \quad (\text{III.72})$$

il devient possible d'évaluer l'expression exacte des effets induits par chaque isotope. De même, pour la réaction de diffusion, on a :

$$\delta\rho_s = \underbrace{[-w_{a,i}^\dagger(\epsilon)]}_{\text{Absorption}} + \underbrace{w_{s,i}^\dagger(\epsilon_{s,i})}_{\text{Émission}} \Delta\Sigma_s(\epsilon \rightarrow \epsilon_{s,i}) \frac{w}{\Sigma_t(\epsilon)} \quad (\text{III.73})$$

et pour une réaction de fission,

$$\delta\rho_f = \left[\underbrace{-w_{a,i}^\dagger(\epsilon)\Delta\Sigma_f(\epsilon)}_{\text{Absorption}} + \underbrace{w_{f,i}^\dagger(\epsilon_{f,i})\Delta[\nu(\epsilon)\Sigma_f(\epsilon \rightarrow \epsilon_{f,i})]}_{\text{Émission}} \right] \frac{w}{\Sigma_t(\epsilon)} \quad (\text{III.74})$$

La sommation de la totalité des effets de chaque collision, donne accès à l'intégrale du numérateur de la formule des perturbations. Quant au terme d'importance des productions, placé au dénominateur de la formule des perturbations,

$$\langle \Phi_1^\dagger, \mathcal{P}_2 \Phi_2 \rangle \quad (\text{III.75})$$

il est constitué du terme de production dans l'état ②, $\mathcal{P}_2 \Phi_2$, qui, par définition, est égal à la source de fission avant renormalisation. Ce terme peut être calculé en suivant la Méthode AIWS décrite dans notre chapitre sur l'adjoint (*cf.* Sec. II.B.2.i). L'effet en réactivité étant estimé par le ratio de deux variables aléatoires, il est nécessaire de prendre garde à la définition statistique de ce ratio et des biais qui peuvent lui être associés (*cf.* encadré sur le sujet p. III.D.1.ii).

Afin de calculer l'ensemble des termes nécessaires à l'application de la méthode CEP, plusieurs approches sont possibles. Notre approche a été la plus complète, mais aussi la plus laborieuse, puisque nous avons décidé de stocker l'ensemble des informations nécessaires en chaque point de collision. Rappelons que cette méthode a d'abord eu pour vocation d'être utilisée sur des perturbations locales, ce qui limite grandement le nombre d'évènements à mémoriser.

III.D.1.ii Définir une Perturbation

Il est parfois fastidieux de définir une perturbation dans un code Monte Carlo. Le module des perturbations par échantillons corrélés, dans l'actuelle version de TRIPOLI-4[®] (V4.9), nécessite de devoir définir chaque perturbation une par une par variation des concentrations. Afin de prendre en compte tout type de perturbation, l'utilisateur définit pour la méthode CEP :

- Un jeu de données TRIPOLI-4[®] pour l'état de référence ② ainsi qu'un lien vers la bibliothèque nucléaire utilisée dans la simulation directe.
- Un jeu de données TRIPOLI-4[®] pour l'état perturbé ① ainsi qu'un lien vers la bibliothèque nucléaire utilisée dans la simulation adjointe IFP.
- Les volumes et les isotopes perturbés en les désignant respectivement par leur numéro et leur nom. Dans une future version du code, la perturbation pourra également être définie sur une zone de l'espace (cartésienne, cylindrique ou sphérique) accompagnée d'une liste d'isotopes. Dans le cas où les isotopes perturbés ne sont pas tous présents dans les volumes du cas de référence, ils doivent aussi être indiqués par l'utilisateur ; de même, les volumes du cas de référence (ou la zone) indiqués par l'utilisateur doivent contenir l'ensemble des volumes perturbés du cas perturbé.

Définir une perturbation de la sorte confère une grande souplesse d'utilisation, puisque les sections peuvent être perturbées directement par le changement de la bibliothèque, ou de la température des isotopes. La géométrie peut aussi devenir déstructurée dans l'état ①, tant que la zone perturbée par l'utilisateur inclut la zone perturbée réelle. En cas de doutes réels sur la perturbation à définir, l'utilisateur peut également sélectionner la zone perturbée égale à l'ensemble de la géométrie : le code sera plus lent, mais se chargera de faire la différence. Cette grande souplesse vient également au prix d'un risque d'erreurs plus important : pour que la perturbation soit valide, il faut que les domaines des collisions de l'état de référence ② incluent ceux de la perturbation (*cf.* Fig. III.9). Lorsque cela n'est pas le cas, il faut avoir recours à des pseudo-collisions afin de rétablir l'inclusion du domaine perturbé dans celui de référence.

Statistiques : Estimation d'un Ratio de Variables Aléatoires

L'estimation de la perturbation $\Delta\rho$ des méthodes CEP et BBEP fait appel au ratio de deux populations statistiques :

$$r = \frac{X}{Y} \quad (\text{III.76})$$

Dans notre application, chaque simulation i aboutit à une estimation x_i et y_i des populations X et Y . Nous sommes alors confrontés à un dilemme :

- Estimer \bar{r} comme la Moyenne des Ratios des r_i ,

$$\bar{r}_{\text{MR}} = \mathbb{E} \left[\frac{X}{Y} \right] \quad (\text{III.77})$$

- Estimer \bar{r} comme le Ratio des Moyennes de x_i et y_i ,

$$\bar{r}_{\text{RM}} = \frac{\mathbb{E}[X]}{\mathbb{E}[Y]} \quad (\text{III.78})$$

La seconde formulation est plus respectueuse des estimateurs que nous devons calculer. Cependant, l'estimation de son incertitude pose un problème de taille car les formules classiques d'estimation de la variance ne peuvent s'appliquer. Dans la première version de nos développements, nous avons donc choisi d'utiliser la première formulation dont la variance s'estime très simplement. Or il existe un biais (*i.e.* $\bar{r}_{\text{RM}} - \bar{r}_{\text{MR}}$), entre ces deux formulations [26] :

$$\mathbb{E}[X]/\mathbb{E}[Y] - \mathbb{E} \left[\frac{X}{Y} \right] = \sigma^2 \left[\frac{X}{Y}, Y \right] / \mathbb{E}[Y] \quad (\text{III.79})$$

Le biais est donc d'autant plus important que $\frac{X}{Y}$ est corrélé à Y . Illustrons ceci par un exemple simple : X et Y sont échantillonnées sur des lois uniformes sur $[0; 1]$. En tirant 1 million d'évaluations de chaque estimateur, on obtient :

$$\bar{r}_{\text{MR}} = 7.48 \pm 0.70 \quad (\text{III.80})$$

Une architecture basée sur des templates C++ a été élaborée afin de permettre la création de tenseurs de scores pour la future version de nos développements. Ces tenseurs de scores sont aussi efficaces que les estimateurs actuels de TRIPOLI-4[®], mais permettent également le calcul de moments supérieurs à la variance (Skewness, Kurtosis) ainsi que les trois estimateurs de la variance d'un ratio de moyennes présentés dans cet encart.

$$\bar{r}_{\text{RM}} = 0.999123 \quad (\text{III.81})$$

On comprend alors mieux les erreurs qu'une telle approximation peut engendrer. Afin d'estimer l'erreur sur \bar{r}_{RM} , nous avons comparé plusieurs méthodes :

- L'application d'une méthode de type Jackknife [27] :

$$\bar{r}_{\text{RM}} = 0.999123 \pm 0.000818 \quad (\text{III.82})$$

qui constitue notre référence. Elle présente le lourd désavantage de devoir stocker l'ensemble des tirages en mémoire ce qui ne nous permet pas de l'utiliser dans un code Monte Carlo de production où le nombre de score demandés peut aisément dépasser le million (sauf pour quelques estimateurs globaux comme, par exemple, le k_{eff}).

- Une approximation par formule de Taylor à l'ordre 1 :

$$\bar{r}_{\text{RM}} = 0.999123 \pm 0.001153 \quad (\text{III.83})$$

L'écart type est surestimé dans notre cas d'application, mais cet estimateur ne nécessite que le stockage des moyennes et des variances de chaque population.

- Une approximation par formule de Taylor à l'ordre 2 [28] :

$$\bar{r}_{\text{RM}} = 0.999123 \pm 0.000816 \quad (\text{III.84})$$

qui représente le compromis que nous choisirons dans la prochaine version de nos développements, car elle est accessible en ne mémorisant que les moyennes et les covariances des deux séries.

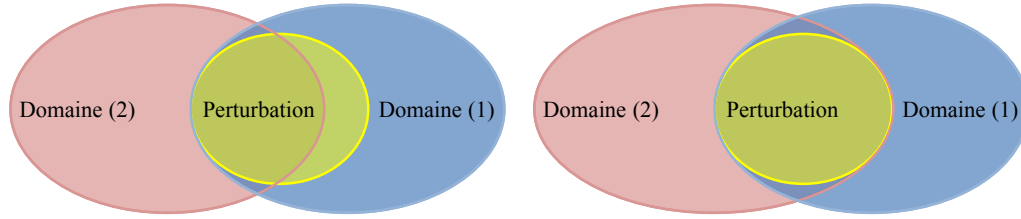


FIGURE III.9 – Les collisions du domaine perturbé (en jaune) doivent être incluses dans l'espace couvert par les collisions des états ② et ①. Lorsque ce n'est pas le cas, il est nécessaire d'étendre le domaine ②. Typiquement, un milieu vide dans l'état ②, qui serait rempli dans l'état ①, ne peut pas comptabiliser de collisions et la perturbation sera alors mal calculée. Afin d'agrandir le domaine des collisions de l'état ②, il faut ajouter un pseudo-isotope dans le milieu vide de l'état ② afin de provoquer des collisions qui ne modifieront pas la trajectoire des neutrons. Un tel cas d'application sera traité dans les exemples de vérification.

III.D.1.iii Stockage des Collisions

Lors de l'exécution de la simulation directe, dans l'état ② du cœur, un certain nombre de collisions appartenant au volume perturbé doivent être stockées. Le stockage des collisions doit respecter les critères suivants :

- Couvrir le domaine perturbé, aussi bien spatial qu'énergétique. S'il est facile de vérifier la superposition des domaines spatiaux, la superposition des domaines énergétiques doit, elle, être estimée par un avis d'expert. L'utilisateur devra aussi, le cas échéant, prendre garde aux modifications de seuils des sections efficaces.
- Présenter une distribution convergée. Dans le procédé des itérations de la puissance, il est nécessaire que la distribution des collisions dans le cœur ait atteint sa convergence de manière à être représentative du taux de collision fondamental.
- Les collisions doivent être en nombre suffisant pour offrir une statistique représentative. Pour cela, il est souvent nécessaire d'intégrer les collisions issues de plusieurs générations. Ce nombre de générations devra être d'autant plus important que les volumes perturbés seront petits. Les stockages servant à l'estimation du terme source pondéré par l'adjoint sont, eux, toujours générés dans la dernière génération du calcul.

Notons au passage qu'un tel stockage de l'ensemble des collisions suscite un grand intérêt dans le cadre de la vérification et validation des codes déterministes [29]. En effet, la relecture des points de collision et des sections permet d'aller projeter l'ensemble des flux et taux de réaction microscopiques directement sur le maillage utilisé par les différents solveurs déterministes. Les comparaisons sont donc plus fines et la détection d'erreurs ou d'hypothèses trop fortes plus rapide et rigoureuse.

III.D.1.iv Conversion de l'état d'un neutron dans l'état ② du réacteur vers l'état ①

Notre méthode fait l'hypothèse qu'un neutron dans l'état ② du réacteur au point de l'espace des phases ϵ , peut être relancé dans l'état ① au même point. Ceci n'est pas toujours possible puisque certains formalismes de résolution de l'équation du transport impliquent ponctuellement que l'état du neutron ϵ est lié à la description des sections efficaces. C'est le cas du principe des tables de probabilités [30] (ou des sous-groupes), qui dans le domaine des résonances non résolues suppose que le neutron appartient, de manière ponctuelle, à un sous groupe déterminant la magnitude de la section. Le tirage des sous-groupes est réalisé tel que :

$$\overline{\sigma_{r,i}(\epsilon)} = \sum_{n=0}^N p_{r,i,n}(\epsilon) \sigma_{r,i,n}(\epsilon) \quad (\text{III.85})$$

où $\overline{\sigma_{r,i}(\epsilon)}$ est la section moyenne de la réaction r , de l'isotope i au point ϵ ; $p_{r,i,n}(\epsilon)$ est la probabilité de se trouver sur le sous-groupe n de la section efficace de magnitude $\sigma_{r,i,n}(\epsilon)$. Or, nous avons besoin de déterminer la différence des sections efficaces, $\Delta\sigma_{r,i}(\epsilon)$ en chaque point ϵ . De notre point de vue, la détermination de la différence $\Delta\sigma_{r,i}(\epsilon)$ doit être corrélée par le sous-groupe tiré. Or il peut arriver que la structure des sous groupes change d'une évaluation à une autre⁸ et devienne :

$$\overline{\sigma_{r,i}^*(\epsilon)} = \sum_{n=0}^{N^*} p_{r,i,n}^*(\epsilon) \sigma_{r,i,n}^*(\epsilon) \quad (\text{III.86})$$

La seule possibilité est donc de corrélérer la détermination de sous groupe perturbé n^* par le nombre aléatoire ξ , utilisé par le code pour tirer le premier niveau n . Strictement, il faut aussi s'assurer que le premier transport réalisé dans l'état ① soit réalisé avec une section totale calculée à partir d'une section de niveau n^* corrélée au niveau n tiré dans l'état ②.

Dans la première version de nos développements, l'option `TABPROB` permettant au code `TRIPOLI-4`[®] d'utiliser les tables de probabilités dans le domaine des résonances non résolues n'était pas prise en compte. Nous espérons pouvoir mettre en place une telle procédure dans la version définitive de nos développements. L'implémentation rigoureuse de ce point particulier permettrait de pouvoir aussi calculer l'effet de l'option `TABPROB` sur un calcul, ce qui peut être déterminant dans le calcul des effets Doppler ou des paramètres neutroniques des cœurs à neutrons rapides.

III.D.1.v Perturbation des Fonctions de Renvoi

Les sections doublement différentielles (dont font partie les sections de fission couplées à leur spectre) font appel à des fonctions de renvoi permettant de donner la distribution des énergies des neutrons après réaction. L'énergie après réaction y est décrite en fonction de l'énergie incidente et de l'angle de déviation. Selon le type de section ou selon l'évaluation, le formalisme de description peut être différent (*e.g.* spectre de fission, $S(\alpha, \beta)$, format de la `FILE 4, 5` ou `6` du format `ENDF...`), mais il est toujours possible d'évaluer la probabilité $p_{r,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon')$ de la réaction r et de l'isotope i . Nous faisons l'hypothèse que jamais l'utilisateur ne viendra perturber le domaine de renvoi des sections, ou qu'il le fera en connaissance de cause, puisque nous décidons de corrélérer l'angle de sortie de la section dans l'état ① et celui déjà tiré dans l'état ②. Soit alors, les expressions exactes des termes présents dans les équations (III.74) et (III.73),

$$\Delta\Sigma_{r,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon') = \Sigma_{r,i}^{(2)}(\epsilon) - \frac{p_{r,i}^{(1)}(\epsilon \rightarrow \epsilon')}{p_{r,i}^{(2)}(\epsilon \rightarrow \epsilon')} \Sigma_{r,i}^{(1)}(\epsilon) \quad (\text{III.87})$$

Pour des raisons techniques, ce terme n'est pas calculé dans notre version actuelle du code. Cependant, nous avons bon espoir d'introduire ce formalisme dans la version définitive. Pour la fission, le spectre de fission $\chi_{f,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon')$ s'identifie à la probabilité $p_{f,i}(\epsilon \rightarrow \epsilon')$, qui est généralement accessible dans `TRIPOLI-4`[®] sous forme tabulée. Pour les autres sections de renvoi, le problème est généralement plus complexe puisque de manière à pouvoir échantillonner une énergie et un angle de sortie, ces fonctions sont généralement projetées sur des tables de cosinus équiprobables qui sont créées une fois pour toutes par le code et relues par la suite : la probabilité p n'est donc plus directement accessible et doit être reconstruite.

III.D.2 Optimisations et Options de Calculs

III.D.2.i Gestion des Architectures Parallèles

Les simulations multiprocesseurs dans `TRIPOLI-4`[®] sont constituées principalement de simulations indépendantes. Chaque processeur disponible est en charge d'une simulation initialisée avec une graine

⁸Il se peut aussi qu'il n'y ait plus de sous-groupes du tout !

différente et envoie à un processeur dit *collecteur* les résultats des scores de chaque génération. La version actuelle de la méthode CEP utilise un script⁹ bash – adapté à une station de travail ou à un cluster de calcul – afin de lancer et de gérer les différentes simulations indépendantes. Les scores de l’ensemble des simulations sont collectés par un dernier appel à TRIPOLI-4[®]. Cette ultime simulation va relire les scores produits par chaque processeur pour les combiner. L’ensemble des informations ponctuelles peut aussi être gardé en mémoire de manière à être relu par un logiciel codé en C++ permettant le calcul de scores plus complexes. Des exemples précis seront donnés dans le chapitre IV.

L’approche par script est une approche beaucoup plus souple que l’approche classique, elle permet l’enchaînement simple du calcul direct puis adjoint et donne carte blanche à l’utilisateur pour calculer une unique simulation de référence associée à un ensemble de configurations perturbées. Dans le cas où le calcul ne serait pas assez convergé, elle offre aussi la possibilité de lancer d’autres simulations avec d’autres graines afin de compléter le calcul.

III.D.2.ii Biaisage

Parlons encore des domaines de collisions. Imaginons que, comme sur la figure III.9, le domaine de collision de l’état ② soit beaucoup plus large que le domaine de la perturbation. Le code va stocker inutilement un grand nombre de collisions puisque, lors de la simulation directe, il ne présume en rien de la perturbation à subir. C’est à la fois une force et une faiblesse :

- En stockant toutes les collisions, on permet la relance de plusieurs cas perturbés très différents à partir de la même simulation de référence.
- Une partie des importances calculées est superflue puisque les collisions ont été stockées sans présomption de la perturbation. Or il se peut que la perturbation soit très faible, voir nulle, en certains points de collision.

De manière à ne pas lancer de calcul d’importance pour des points inutiles, il est nécessaire d’évaluer les différences des opérateurs $\Delta\mathcal{P}$ et $\Delta\mathcal{K}$ en chaque point source avant de débiter le calcul adjoint IFP. Afin d’évaluer la nécessité de lancer ou non une source, nous faisons encore une fois appel au principe de la *roulette russe*. Le poids *a priori*, $w_{n,r,i}$, de chaque évènement est alors déterminé par la formule suivante pour chaque réaction r , pour chaque isotope i et en chaque point de collision n ,

$$w_{n,r,i} = \mathcal{N} \frac{|\delta\rho_{n,r,i}|}{\sum_{n,r,i} |\delta\rho_{n,r,i}|} \quad (\text{III.88})$$

où \mathcal{N} correspond au nombre souhaité de particules par génération dans la simulation adjointe IFP. Les valeurs absolues sont importantes car elles garantissent de conserver des poids positifs. Afin d’estimer les $\delta\rho_{n,r,i}$ *a priori* des réactions de capture, (n, xn) , ou bien de fission, il est possible de remplacer le flux adjoint par une constante. Cette procédure est équivalente au raisonnement suivant : plus les différences des taux de collisions,

$$\left\langle 1, \left[\Delta\mathcal{K} - \frac{\Delta\mathcal{P}}{k_1} \right] \Phi_2 \right\rangle \quad (\text{III.89})$$

seront grandes, plus les perturbations,

$$\left\langle \Phi_1^\dagger, \left[\Delta\mathcal{K} - \frac{\Delta\mathcal{P}}{k_1} \right] \Phi_2 \right\rangle \quad (\text{III.90})$$

auront de chance d’être grandes et mériteront d’être relancées. La fonction constante ne présume en rien de l’importance à donner aux évènements et couvre l’ensemble du domaine énergétique et spatial des collisions. L’utilisateur est en charge de fixer le seuil de la roulette. Lorsque le seuil est fixé à zéro, tous les évènements sont relancés sauf ceux dont la variation d’opérateur est strictement nulle.

⁹Les scripts sont des programmes non-compilés. Leur objectif consiste souvent à enchaîner des opérations élémentaires en appelant d’autres programmes.

Le biaisage des réactions de diffusion élastique et inélastique est effectué séparément. En effet, le remplacement du flux adjoint par une fonction constante dans l'équation (III.73),

$$\delta\rho_s = [1 - 1]\Delta\Sigma_s(\epsilon \rightarrow \epsilon_{s,i}) \frac{w}{\Sigma_t(\epsilon)} = 0 \quad (\text{III.91})$$

conduit à un effet de diffusion nul. Il est donc nécessaire de choisir une autre fonction afin de biaiser le calcul des diffusions. Nous postulons que plus le gain en léthargie provoqué par une diffusion est important, plus la probabilité que le flux adjoint soit différent est importante. Ceci est en général vrai excepté autour des grandes résonances, ou lorsque les déviations angulaires dirigent les neutrons hors de la géométrie. Le $\delta\rho_s$ *a priori* est donc calculé en remplaçant le flux adjoint Φ_1^\dagger par la léthargie (*i.e.* le logarithme de l'énergie) dans l'expression précédente.

Dans l'immense majorité des cas, le biaisage présenté ici a contribué à une augmentation nette de la figure de mérite et une diminution importante de l'emprunte mémoire des calculs. Il a aussi, hélas, parfois mené à de légères différences sans que nous ayons pu en déterminer l'origine (*e.g.* induite par le biaisage ? erreur de programmation ?).

III.D.2.iii Multiplicités

Le calcul d'importance se déroule selon un algorithme analogue à celui de la méthode AIWS (*cf.* Sec. II.B.1.i). À la fin de chaque cycle IFP, les sources du départ sont initialisées de nouveau afin de fournir une estimation plus précise de l'importance. Un nouveau paramètre a cependant été introduit de manière à fournir une estimation plus juste des effets de diffusion qui nécessitent l'évaluation d'une différence d'importance (*cf.* Eq. (III.73)). La *multiplicité* va ainsi influencer le nombre de sources relancées pour calculer l'importance en un même point ϵ .

III.D.2.iv Approximation Semi-Multigroupe

Pour certaines applications où le flux adjoint pourra être supposé isotrope, le code pourra également fournir une approximation Semi-Multigroupe (notée T4_SMG) de la perturbation. Brièvement, cette approximation consiste à évaluer dans un premier temps un flux adjoint multigroupe sur un maillage très fin par le biais de l'ensemble des importances calculées dans l'état ①. Puis, lorsque vient le moment d'évaluer les intégrales de perturbations, l'importance multigroupe est substituée à l'importance ponctuelle dans les équations (III.72), (III.73) et (III.74).

III.D.3 Vérification & Validation

Afin de s'assurer de la bonne implémentation de la méthode CEP dans le code TRIPOLI-4[®], il est nécessaire de passer en revue les différentes utilisations que l'on pourra faire du code. Notre vérification se bornera à vérifier la différence de réactivité calculée par la méthode CEP et celle obtenue par la méthode de la différence des valeurs propres. La vérification de l'effet global obtenu comme la somme de tous les autres effets valide également la projection des effets par isotopes, réactions, volumes, etc.

III.D.3.i Perturbation de Concentrations

Afin de mettre en valeur les capacités novatrices de notre application de la théorie exacte des perturbations dans un code Monte Carlo, nous présentons ici un cas extrême dans lequel les fuites de neutrons sont perturbées par la modification brutale du réflecteur (*i.e.* une très forte variation de concentration). Nous choisissons de nous intéresser au benchmark *Flattop* [31]. Ce benchmark est constitué d'un cœur sphérique fortement enrichi en ²³⁵U et d'un réflecteur en ²³⁸U (*cf.* Fig. III.10). La configuration de référence correspond au cœur original non modifié, tandis que la configuration perturbée correspond au cœur sans couverture d'²³⁸U. On s'attend à une forte perturbation des fuites et donc de la réactivité. Les perturbations seront calculées :

- Par différence des valeurs propres (méthode de référence).

- Par la méthode CEP, dans le sens, système de référence (*i.e.* simulation direct dans flattop) → système perturbé (*i.e.* simulation adjointe dans flattop sans couverture).
- Par la méthode CEP, dans le sens, système perturbé (*i.e.* simulation direct dans flattop sans couverture) → système de référence (*i.e.* simulation adjointe dans flattop).

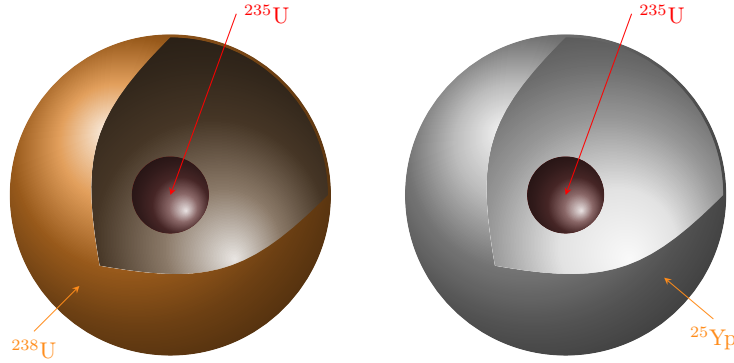


FIGURE III.10 – Géométries pour la perturbation des « Fuites » : Flattop original à gauche, Flattop sans couverture ^{238}U à droite (le vide est simulé par l'ajout d'un pseudo-isotope appelé ^{25}Yp)

Remarquons que le sens Perturbé → Référence pose un problème de taille : la méthode CEP a besoin d'estimer un flux à l'endroit de la perturbation par le biais des collisions dans un milieu vide. Il est donc nécessaire d'ajouter dans le milieu vide un pseudo-élément qui viendra remplacer la couverture d' ^{238}U de manière à provoquer les pseudo-collisions nécessaires à l'évaluation d'un score collision. En pratique, cela revient à ajouter un élément (appelé ici ^{25}Yp), purement diffusant, et ne modifiant ni la direction, ni l'énergie des neutrons. Sa section efficace totale est arbitrairement prise égale à 1 barn sur l'ensemble du domaine énergétique (aucune hypothèse sur le domaine énergétique perturbé n'est alors faite) et la densité de probabilité de sa fonction de renvoi est définie par :

$$p(\mu) = \delta_1(\mu) \quad (\text{III.92})$$

où $x \rightarrow \delta_y(x)$ est la fonction de Dirac, dont l'intégrale sur un intervalle quelconque contenant y vaut 1. Ainsi tout neutron diffusant sur l'isotope ^{25}Yp produira une collision sans que sa trajectoire ne soit modifiée. Le ^{25}Yp est donc bien équivalent à du vide, puisque qu'aucune trajectoire n'est modifiée et tout neutron fuyant reste perdu pour le système. Nous obtenons les résultats suivants :

- Par différence des valeurs propres :

$$\Delta\rho_{\text{Ref-Pert}}^{\text{T4}} = 36730 \pm 3 \text{ pcm} \quad (\text{III.93})$$

- Dans le sens système de référence → système perturbé :

$$\Delta\rho_{\text{Ref-Pert}}^{\text{T4 IFP}} = 36754 \pm 72 \text{ pcm} \quad (\text{III.94})$$

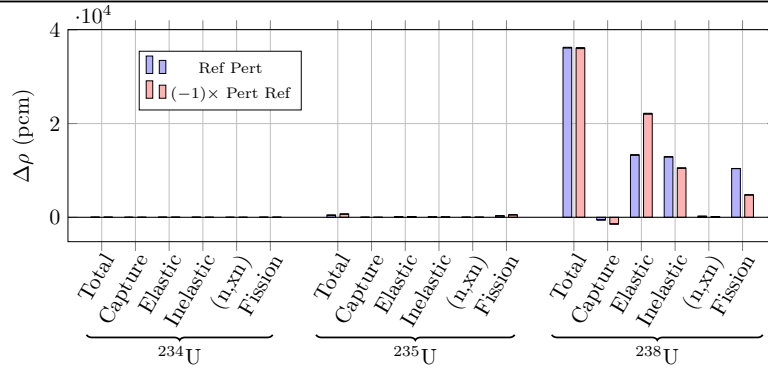
- Dans le sens système perturbé → système de référence :

$$\Delta\rho_{\text{Pert-Ref}}^{\text{T4 IFP}} = -36699 \pm 44 \text{ pcm} \quad (\text{III.95})$$

Le bon accord des perturbations calculées avec une précision de l'ordre de 0.1 %, valide la bonne tenue de la méthode CEP en ce qui concerne le calcul des différences de réactivité provoquées par les modifications des concentrations, même brutales, des isotopes d'un milieu. À titre de curiosité, le tableau III.2 présente la projection des effets sur les deux états de départ : on observe bien que les projections sont différentes selon le sens de la perturbation, bien que l'effet global soit identique.

TABLEAU III.2 – Perturbations de la réactivité du cœur *Flattop* entre sa configuration de référence et sa configuration non-réfléchie.

Isotopes	Réaction	Ref → Pert		Pert → Ref	
		$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)	$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)
^{234}U	Total	$3.34 \times 10^{+00}$	5.40×10^{-03}	$-2.79 \times 10^{+00}$	1.95×10^{-01}
	Capture	-5.14×10^{-02}	7.77×10^{-05}	1.31×10^{-01}	1.84×10^{-04}
	Elastic	6.93×10^{-01}	2.85×10^{-03}	-8.88×10^{-01}	1.95×10^{-01}
	Inelastic	5.16×10^{-01}	1.16×10^{-03}	-4.04×10^{-01}	9.13×10^{-03}
	(n,xn)	2.34×10^{-03}	3.31×10^{-05}	-1.27×10^{-03}	1.26×10^{-04}
	Fission	$2.18 \times 10^{+00}$	3.08×10^{-03}	$-1.62 \times 10^{+00}$	3.80×10^{-03}
^{235}U	Total	$4.51 \times 10^{+02}$	7.29×10^{-01}	$-6.87 \times 10^{+02}$	$2.27 \times 10^{+00}$
	Capture	$-5.79 \times 10^{+00}$	9.48×10^{-03}	$1.89 \times 10^{+01}$	2.63×10^{-02}
	Elastic	$7.87 \times 10^{+01}$	3.38×10^{-01}	$-1.19 \times 10^{+02}$	$2.07 \times 10^{+00}$
	Inelastic	$6.95 \times 10^{+01}$	1.57×10^{-01}	$-5.77 \times 10^{+01}$	1.37×10^{-01}
	(n,xn)	$1.35 \times 10^{+00}$	1.10×10^{-02}	-6.57×10^{-01}	8.05×10^{-03}
	Fission	$3.07 \times 10^{+02}$	4.29×10^{-01}	$-5.28 \times 10^{+02}$	6.57×10^{-01}
^{238}U	Total	$3.62 \times 10^{+04}$	$7.79 \times 10^{+01}$	$-3.61 \times 10^{+04}$	$1.06 \times 10^{+02}$
	Capture	$-5.58 \times 10^{+02}$	8.69×10^{-01}	$1.43 \times 10^{+03}$	$1.96 \times 10^{+00}$
	Elastic	$1.33 \times 10^{+04}$	$5.27 \times 10^{+01}$	$-2.21 \times 10^{+04}$	$9.47 \times 10^{+01}$
	Inelastic	$1.29 \times 10^{+04}$	$2.90 \times 10^{+01}$	$-1.05 \times 10^{+04}$	$2.31 \times 10^{+01}$
	(n,xn)	$2.17 \times 10^{+02}$	$2.80 \times 10^{+00}$	$-1.17 \times 10^{+02}$	$2.05 \times 10^{+00}$
	Fission	$1.04 \times 10^{+04}$	$1.74 \times 10^{+01}$	$-4.78 \times 10^{+03}$	$1.28 \times 10^{+01}$



III.D.3.ii Perturbation d'une Section Efficace Microscopique

L'exemple précédent traitait une perturbation des concentrations. Or certaines perturbations peuvent avoir lieu sur les sections microscopiques elles-mêmes : c'est le cas de la modification arbitraire d'une section, ou bien, par exemple, d'un changement de température¹⁰ Dans cet exemple, la section inélastique de l' ^{238}U sera perturbée de +10 %¹¹. À cet effet, une nouvelle évaluation de l' ^{238}U a été construite à partir de la bibliothèque **JEFF-3.1.1**. Nous appliquerons cette perturbation à nouveau au cas *Flattop*. Les effets calculés sont les suivants :

- Par la méthode CEP :

$$\Delta\rho_{10\%}^{\text{T4 IFP}}(n, n') = 643.4 \pm 2.9 \text{ pcm} \quad (\text{III.96})$$

- Par la méthode CEP avec approximation Semi-Multigroupe :

$$\Delta\rho_{10\%}^{\text{T4 SMG}}(n, n') = 455.7 \pm 1.3 \text{ pcm} \quad (\text{III.97})$$

- Par différence des valeurs propres :

$$\Delta\rho_{10\%}^{\text{T4}}(n, n') = 640.2 \pm 3.2 \text{ pcm} \quad (\text{III.98})$$

¹⁰Les perturbations de réactivité engendrées par les variations de température sont induites par la modification locale des sections au niveau des résonances : celles-ci s'élargissent lorsque la température augmente.

¹¹La section inélastique est connue avec une incertitude d'environ 10 % et son niveau est un point de désaccord entre les bibliothèques **JEFF-3.1.1** et **ENDF/B7-R0**.

Le bon accord obtenu pour une précision relative de 0.5 % valide la perturbation « manuelle » des sections efficaces. Bien que l'approximation multigroupe mène à des résultats statistiquement plus précis, ils ne convergent pas toujours vers la valeur de référence, en cause le fort degré d'anisotropie des flux dans la boule *Flattop*.

III.D.3.iii Perturbation de Température

La perturbation microscopique que nous avons traitée précédemment était somme toute facile à calculer. Traitons maintenant un effet de température (sans prise en compte des effets de dilatation) obtenu en faisant varier la température du combustible de 2972 K à 300 K dans un réseau infini de cellules UOX modéré par l'eau légère, semblable à celui décrit dans le chapitre précédent (*cf.* Sec. II.C.1). Les effets suivants sont obtenus :

- Par la méthode CEP :

$$\Delta\rho_{300\rightarrow 2974\text{K}}^{\text{T4 IFP}} = 3740 \pm 42 \text{ pcm} \quad (\text{III.99})$$

- Par différence des valeurs propres :

$$\Delta\rho_{300\rightarrow 2974\text{K}}^{\text{T4}} = 3618 \pm 3 \text{ pcm} \quad (\text{III.100})$$

Les deux valeurs présentent un écart d'environ 3 %. Il s'agit en fait d'une des limitations de la méthode CEP qui, dans son implémentation actuelle, n'est pas en mesure d'évaluer les effets induits par la modification des lois de renvoi des neutrons. Lors d'une perturbation de température si importante, la modification des lois de renvoi angulaires de l' ^{16}O (*i.e.* la modification de la thermalisation des neutrons après une diffusion sur ^{16}O) n'est pas prise en compte.

À titre de curiosité, nous présentons sur le même graphique le profil de l'effet de capture et de la section de capture de l' ^{238}U (*cf.* Fig. III.11). Ces profils permettent d'analyser l'effet en réactivité dû à l'effet Doppler sur la section de capture de l' ^{238}U . Sur l'aile d'attaque de la résonance, la différence entre les sections à 300 K et à 2972 K est positive, ce qui se traduit par un effet de capture positif. Au centre de la résonance, la différence des sections devient négative : on s'attendrait donc à obtenir un effet très nettement négatif. Mais cela serait oublier la saturation (*i.e.* l'auto-protection) du flux au plus profond de la résonance : en pratique la différence de l'effet de capture au centre de la résonance est donc presque nul.

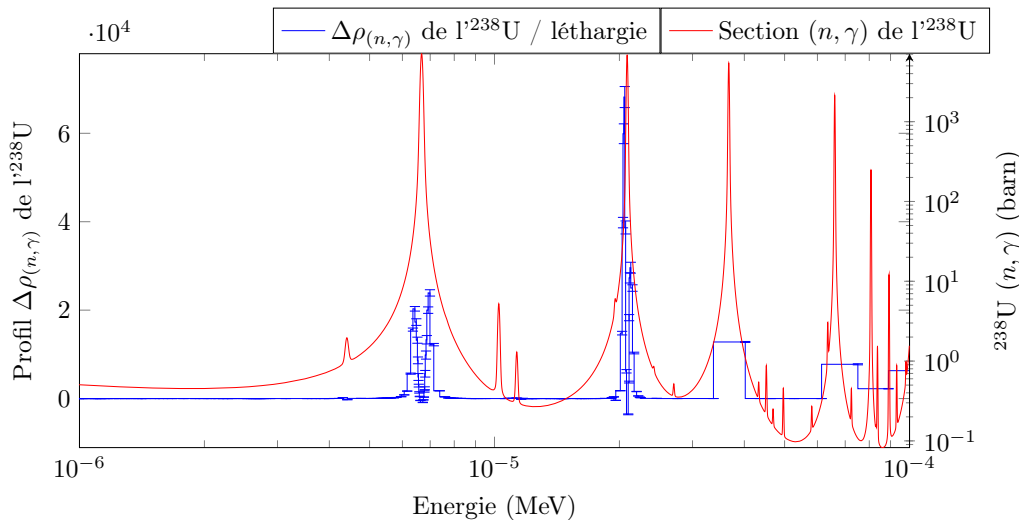


FIGURE III.11 – Tracé de la perturbation de réactivité attribuée à la capture de l' ^{238}U lors d'une perturbation importante de température, dans une cellule UOX en réseau infini.

III.D.3.iv Bibliothèques de Données Nucléaires

Dans l'objectif de comparer et d'analyser les perturbations de réactivité engendrées par les différentes évaluations des données nucléaires, une méthode de calcul capable de décomposer l'effet sur les différents isotopes est un atout considérable : en estimant les écarts, il devient possible de déterminer les valeurs qui ont un réel impact sur le calcul et qui sont potentiellement mal connues. La méthode CEP permet le calcul exact de tels effets. Nous avons choisi de reprendre la cellule UOX traitée dans le second chapitre (*cf.* Sec. II.C.1). Nous calculerons la différence de réactivité entre les évaluations JEFF-3.1.1 et ENDF/B7-R0.

Cellule UOX modérée par l'eau légère (réseau infini), JEFF-3.1.1 → ENDF/B7-R0 L'accord obtenu sur le calcul de l'effet global est le suivant :

- Par la méthode CEP :

$$\Delta\rho_{\text{JEFF-ENDF}}^{\text{T4 IFP}} = -57.2 \pm 6.5 \text{ pcm} \quad (\text{III.101})$$

- Par la méthode CEP avec approximation Semi-Multigroupe :

$$\Delta\rho_{\text{JEFF-ENDF}}^{\text{T4 SMG}} = -62.0 \pm 0.3 \text{ pcm} \quad (\text{III.102})$$

- Par différence des valeurs propres :

$$\Delta\rho_{\text{JEFF-ENDF}}^{\text{T4}} = -61.4 \pm 6.8 \text{ pcm} \quad (\text{III.103})$$

Les faibles écarts obtenus entre les méthodes valident l'application de la Méthode CEP pour ce type d'étude. L'intérêt réside dans la projection de l'effet sur les différentes réactions. Ainsi, la figure III.12 donne la projection de l'effet en réactivité par milieu et par isotope. On remarque que la majorité de l'effet trouve sa source dans le combustible, et dans une moindre mesure dans la gaine et dans l'eau. Le sens de l'effet est indiqué par un signe (+) ou (-) en accord avec le signe de la perturbation. La projection sur les isotopes fait apparaître une forte différence entre les sections des deux bibliothèques pour deux isotopes du zirconium, ^{90}Zr et ^{91}Zr . Cependant ces deux effets se compensent en grande majorité (l'un est positif et l'autre est négatif). Le phénomène est certainement dû à une forte corrélation des sections efficaces des deux isotopes : dans la pratique, il doit être difficile, voire impossible de séparer le ^{90}Zr du ^{91}Zr (d'abondance naturelle respective 51 % et 11 %) afin de procéder à une mesure microscopique indépendante. Il doit s'agir ici d'un choix d'expérimentateur et/ou d'évaluateur de faire porter la section mesurée à un isotope plutôt qu'un autre. L'important étant que la section totale du zirconium naturel soit cohérente (ce qui semble être le cas globalement puisque les effets de la gaine sont bien inférieurs aux effets dans le combustible). La figure III.13, qui montre les effets par isotope et par réaction, semble indiquer qu'il s'agit de la capture qui est ainsi balancée entre les deux isotopes. Le tracé de l'effet de capture du ^{91}Zr (*cf.* Fig. III.14) est comparé aux sections de capture du ^{91}Zr et du ^{90}Zr en provenance des bibliothèques JEFF-3.1.1 et ENDF/B7-R0 : la différence des deux sections y est clairement visible et est corrélée aux écarts de réactivités attribués par TRIPOLI-4[®] à chaque groupe.

La différence observée dans le combustible provient en majorité des sections de ^{238}U . La capture de cet isotope n'a pas donné lieu à une perturbation suffisante pour figurer sur ces figures¹², elle est donc, *a priori*, très bien connue. La plus grande différence se situe sur la section inélastique de ^{238}U qui est effectivement mal connue ($\pm 10\%$) [32] et pour laquelle des expériences spécifiques ont d'ailleurs été mises en place. L'oxygène semble également être un élément de discorde entre les deux évaluations, mais dans une moindre mesure. Le lecteur qui souhaiterait relire le détail des effets peut se reporter aux tableaux III.3 et III.4.

¹²Nous savons même que d'après le rapport JEFF-3.1.1, elle est quasi-identique, sauf à haute énergie [32]

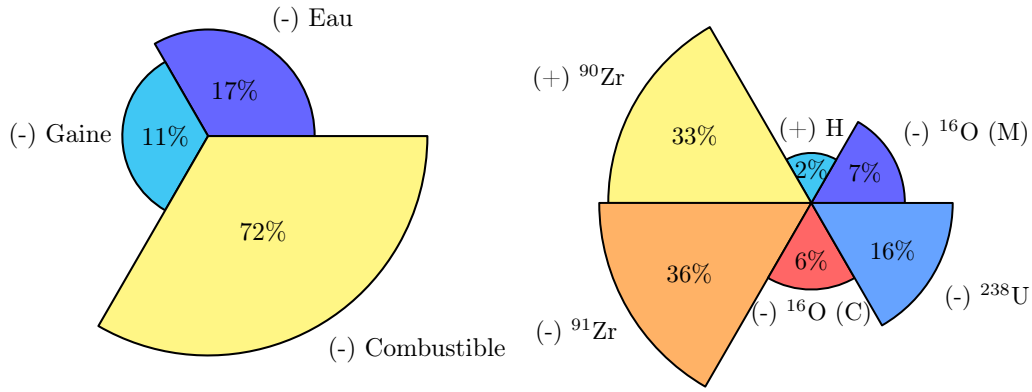


FIGURE III.12 – Origines des différences observées sur la réactivité entre ENDF/B7-R0 et JEFF-3.1.1 par milieu et par isotope de la cellule REL/UOX. Les pourcentages indiquent le ratio de la valeur absolue de l'effet sur la somme de la valeur absolue des effets complémentaires. Le signe des perturbations est indiqué dans la légende par le signe (+) ou (-).

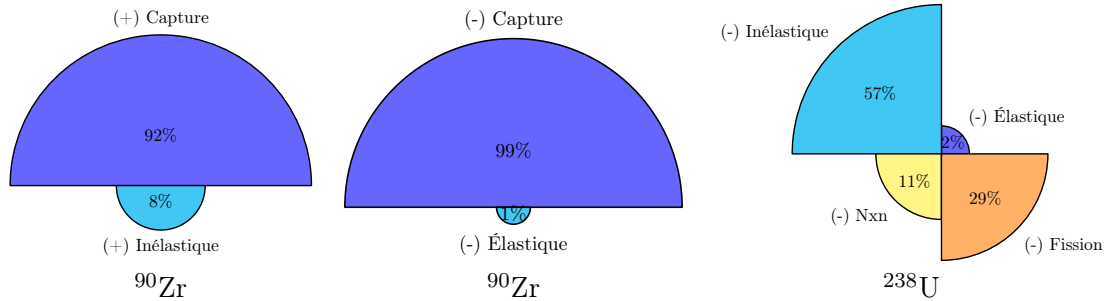


FIGURE III.13 – Origines des différences observées sur la réactivité entre ENDF/B7-R0 et JEFF-3.1.1 par réaction de chaque isotope de la cellule REL/UOX. Les pourcentages indiquent le ratio de la valeur absolue de l'effet sur la somme de la valeur absolue des effets complémentaires. Le signe des perturbations est indiqué dans la légende par le signe (+) ou (-).

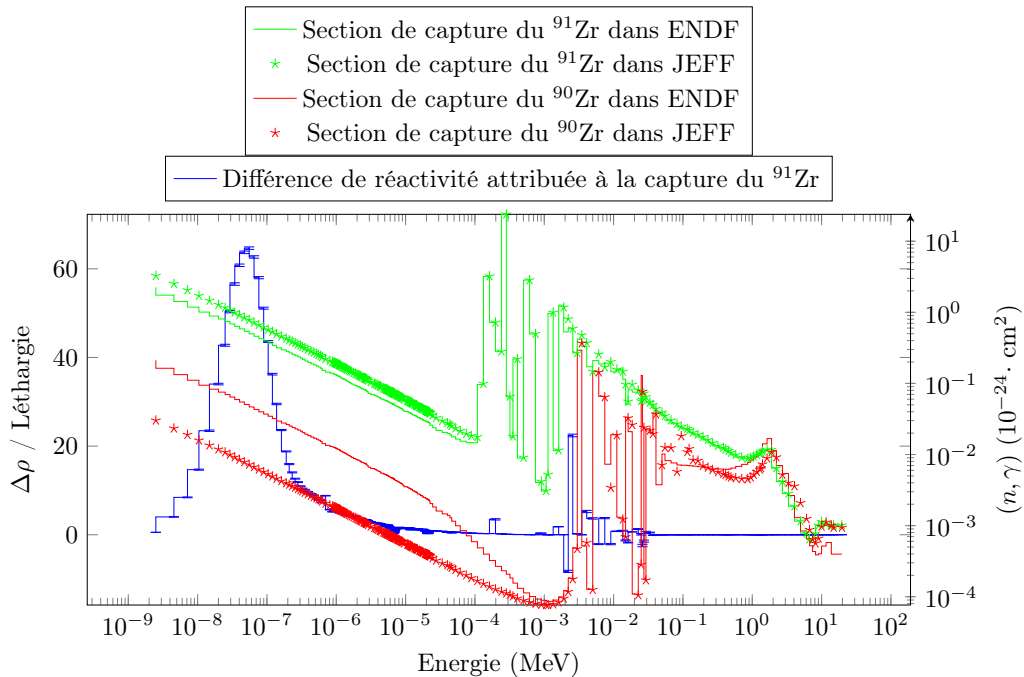


FIGURE III.14 – Origines des différences observées sur la réactivité entre ENDF/B7-R0 et JEFF-3.1.1 : sections efficaces de capture du ^{91}Zr et du ^{90}Zr sur le maillage SHEM281.

TABLEAU III.3 – *Détail des effets d'une perturbation de JEFF-3.1.1 → ENDF/B7-RO dans une cellule UOX en réseau infini. (Première Partie)*

Milieu	Isotopes	T4		T4 SMG	
		$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)	$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)
Eau	Total	-5.92000	8.79000	-10.50000	0.05620
	¹⁶ O Total	-13.30000	0.55800	-13.50000	0.05480
	Capture	-14.00000	0.08720	-13.90000	0.05560
	Elastic	0.69400	0.55300	0.34500	0.00426
	H Total	7.34000	8.81000	2.98000	0.01890
	Capture	0.61700	0.00272	0.61600	0.00182
	Elastic	6.73000	8.81000	2.37000	0.01860
Vide	Total	- 0.00012	0.00001	- 0.00012	0.00001
	¹⁶ O Total	- 0.00012	0.00001	- 0.00012	0.00001
	Capture	- 0.00012	0.00001	- 0.00012	0.00001
	Elastic	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	¹⁴ N Total	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	Capture	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Combustible	Total	-32.20000	13.00000	-44.50000	0.21200
	¹⁶ O Total	-11.30000	0.45800	-12.00000	0.05110
	Capture	-12.30000	0.08010	-12.30000	0.05190
	Elastic	1.04000	0.46000	0.35600	0.00280
	²³⁴ U Total	0.65500	0.40000	0.73100	0.01830
	Capture	0.71700	0.02620	0.70700	0.01720
	Elastic	- 0.06790	0.39800	0.03620	0.00570
	Inélastique	0.01340	0.01450	- 0.00470	0.00008
	(n,xn)	0.00048	0.00008	0.00062	0.00002
	Fission	- 0.00781	0.00098	- 0.00821	0.00025
	²³⁵ U Total	- 0.91400	1.75000	- 0.04200	0.00316
	Capture	- 0.60600	0.00218	- 0.60300	0.00137
	Elastic	- 0.82600	1.75000	- 0.00144	0.00201
	Inélastique	0.27900	0.07820	0.32800	0.00102
	(n,xn)	- 0.04470	0.00092	- 0.04370	0.00028
	Fission	0.28400	0.00745	0.27800	0.00257
	²³⁸ U Total	-20.60000	13.00000	-33.20000	0.18900
	Capture	0.27300	0.17900	0.33300	0.10900
Elastic	12.30000	12.90000	- 0.52300	0.07620	
Inélastique	-19.00000	1.27000	-19.40000	0.04490	
(n,xn)	- 3.83000	0.08550	- 3.77000	0.02520	
Fission	-10.30000	0.25700	- 9.90000	0.09740	

TABLEAU III.4 – Détail des effets d'une perturbation de JEFF-3.1.1 → ENDF/B7-R0 dans une cellule UOX en réseau infini. (Seconde Partie)

Milieu	Isotopes	T4		T4 SMG	
		$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)	$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)
Gaine	Total	-11.90000	10.20000	-7.00000	0.25200
	⁹⁰ Zr Total	63.70000	7.81000	66.30000	0.26300
	Capture	61.30000	0.39800	61.30000	0.25300
	Elastic	-3.04000	7.80000	-0.18700	0.06860
	Inélastique (n,xn)	5.42000	0.28900	5.12000	0.01570
	⁹¹ Zr Total	-70.60000	2.52000	-74.10000	0.17400
	Capture	-73.40000	0.25600	-73.10000	0.16700
	Elastic	2.81000	2.52000	-0.95200	0.03190
	⁹² Zr Total	-0.04530	0.03660	0.00016	0.00012
	Capture	0.00016	0.00001	0.00015	0.00001
	Elastic	-0.04550	0.01430	0.00000	0.00005
	⁹⁴ Zr Total	-5.89000	5.57000	0.82800	0.07420
	Capture	0.47100	0.04350	0.42300	0.02270
	Elastic	-6.36000	5.56000	0.40400	0.07070
	Inélastique	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	⁹⁶ Zr Total	1.75000	1.04000	-0.01660	0.05740
	Capture	0.06590	0.10100	-0.00609	0.05700
	Elastic	1.68000	1.03000	-0.01050	0.01480
	⁵⁴ Fe Total	0.01170	0.02150	0.00433	0.00016
	Capture	0.00564	0.00003	0.00558	0.00002
Elastic	0.00761	0.00722	-0.00010	0.00005	
Inélastique	-0.00155	0.00138	-0.00114	0.00004	

Milieu	Isotopes	T4		T4 SMG	
		$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)	$\Delta\rho_{i,r}$ (pcm)	σ (pcm)
⁵⁶ Fe	Total	-0.43700	0.22300	0.03880	0.00576
	Capture	0.02730	0.00961	0.03230	0.00547
	Elastic	-0.46400	0.22100	0.00187	0.00177
	Inélastique (n,xn)	-0.00056	0.00989	0.00470	0.00019
⁵⁷ Fe	Total	-0.03310	0.07850	-0.00271	0.00145
	Capture	-0.00318	0.00007	-0.00321	0.00004
	Elastic	-0.02570	0.07730	0.00114	0.00145
	Inélastique (n,xn)	-0.00428	0.01000	-0.00067	0.00012
⁵⁸ Fe	Total	0.07500	0.07860	-0.00129	0.00067
	Capture	-0.00168	0.00004	-0.00171	0.00003
	Elastic	0.07660	0.07400	0.00054	0.00063
	Inélastique (n,xn)	0.00008	0.00049	-0.00013	0.00001
⁵⁰ Cr	Total	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	Capture	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
⁵² Cr	Total	-0.41300	0.25600	-0.03540	0.00180
	Capture	-0.04010	0.00026	-0.04040	0.00015
	Elastic	-0.38100	0.25600	-0.00228	0.00180
	Inélastique (n,xn)	0.00876	0.00358	0.00722	0.00009
⁵³ Cr	Total	-0.00034	0.00034	-0.00001	0.00001
	Capture	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	Elastic	-0.00034	0.00034	-0.00001	0.00001
⁵⁴ Cr	Total	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	Capture	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

III.E Implémentation de la Méthode du Corps Noir (BBEP)

Comme nous l'avons évoqué dans notre état de l'art (*cf.* Sec. III.C.3), les perturbations de réactivité induites par un corps noir de manière locale, permettent une dérivation simplifiée de la théorie « exacte » des perturbations. Soit la configuration ② dans laquelle le volume perturbé a été remplacé par un corps noir, et la configuration ① qui contient le volume perturbé dont on souhaite mesurer la perturbation par rapport au corps noir. Alors, nous avons montré que,

$$\Delta\rho_{\text{CN}} = \frac{\langle \Phi_1^\dagger, \Phi_2 |_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+} \rangle}{\langle \Phi_1^\dagger, S_2 \rangle} \quad (\text{III.104})$$

où $\Phi_2|_{\vec{r} \in S_{\text{Pert}}^+}$ correspond au courant entrant dans le volume perturbé (*i.e.* à la surface du corps noir) dans la configuration ②, S_2 aux productions par fission dans la configuration ②, et Φ_1^\dagger au flux adjoint de la configuration ①. La perturbation peut alors être calculée par la formule suivante :

$$\Delta\rho_{\text{CN}}^L = \frac{W|_{S_{\text{Pert}}^+} \sum_{g=1}^L k_g^{(3)}}{\mathcal{N} k^{(1)} \sum_{g=1}^L k_g^{(2)}} \quad (\text{III.105})$$

dont les termes sont issus de trois calculs Monte Carlo distincts :

1. La réalisation d'une simulation critique de référence ② où les volumes perturbés sont remplacés par des corps noirs (implique la création d'un nouvel isotope, ^{27}Yp qui sera lu totalement noir par TRIPOLI-4[®], quelque soit l'énergie du neutron incident). Après convergence du flux par les itérations de la puissance, le stockage des neutrons sur les surfaces des volumes perturbés doit débiter et comporter un nombre suffisant de neutrons en fin de simulation. Pour parer la petitesse des volumes perturbés, il est possible d'augmenter le nombre de neutrons par génération \mathcal{N} ou de réaliser le stockage de ce flux sur n générations. La somme des poids des neutrons stockés donne accès à la valeur $W|_{S_{\text{Pert}}^+}$. Les sources de fission, plus nombreuses sont stockées sur l'ensemble du cœur lors de la dernière génération de la simulation. Elles possèdent un poids normalisé à \mathcal{N} à chaque génération. Afin d'accéder au poids des productions, il est nécessaire de multiplier ces sources par le k_{eff} moyen de la simulation ②, noté ici $k^{(1)}$, en référence à l'étape (1) du calcul.
2. Les sources de fission sont relancées dans une configuration ① où les volumes perturbés contiennent leur composition perturbée, et initialisent un calcul critique à faible nombre de générations (*i.e.* la longueur maximale du cycle IFP souhaité). En fin de simulation, nous devons avoir accès à chaque facteur $k_g^{(2)}$ de normalisation des sources de la génération g , de manière à calculer l'importance de la source (*cf.* Sec. II.A.2.i). Il est possible de multiplier l'ensemble des sources par un nombre entier de manière à estimer la population asymptotique en moyenne sans que cela ne rentre en compte dans le calcul de l'effet.
3. Les neutrons stockés sur les surfaces doivent être relancés dans la configuration ① où les volumes perturbés contiennent leur composition perturbée, et initialisent également un calcul à faible nombre de générations. Cette simulation donne accès à la suite des $k_g^{(3)}$. Il est aussi possible de multiplier l'ensemble des sources par un nombre entier de manière à estimer la population asymptotique avec plus de précision.

Afin de pouvoir estimer l'erreur associée au calcul, plusieurs enchaînements de ce type doivent être réalisés avec des graines différentes du générateur aléatoire. Les calculs peuvent avoir lieu de manière séquentielle ou par le biais d'une architecture parallèle. Dans le cas où l'intégrale de fission serait peu perturbée, il est possible de ne pas l'évaluer et de ne calculer que des effets relatifs entre isotopes. Pour l'application au code TRIPOLI-4[®], un script écrit en langage Python permet l'assignation de chaque calcul à un processeur, réalise leur enchaînement et rassemble les résultats en fin de simulation. Ce

script permet le lancement de la méthode sur cluster de calcul (*e.g.* le super-calculateur CURIE du CCRT) ou sur station de travail. Nous insistons sur le fait qu’aucune modification n’a été entreprise sur le code source de TRIPOLI-4[®], ce qui limite les besoins de vérification et de validation de la méthode qui est exacte par construction. Les pré-requis d’un code à l’utilisation transparente de ce script sont :

- Être en mesure de perturber la graine qui initialise le générateur de nombre aléatoire dans une simulation monoprocesseur.
- Être en mesure de remplacer un volume par un corps noir.
- Être en mesure de stocker les neutrons traversant la surface du volume perturbé sur un ensemble de générations.
- Être en mesure de stocker les sources de fissions.
- Être en mesure de définir des sources ponctuelles dans l’espace des phases.
- Avoir accès aux facteurs de normalisation de chaque génération g , k_g .

Nous appliquerons cette nouvelle méthode dans certains des cas d’application qui vont suivre (*cf.* Sec. III.F.1 et III.F.2).

III.F Illustrations

III.F.1 Vidange d’un Plenum Sodium

L’étude suivante a fait l’objet d’une publication et d’une présentation à la conférence PHYSOR2014 [33].

Le calcul de l’effet en réactivité associé à la vidange du sodium d’un réacteur rapide refroidi au sodium (Sodium-cooled Fast Reactor - SFR) est un défi pour les codes de transport des neutrons. Les codes déterministes sont limités par leur capacité à homogénéiser des régions sous-critiques telles que le plenum sodium¹³, tandis que les codes Monte Carlo peinent parfois à converger sur un effet généralement très faible tout en restant incapables d’en déterminer les différentes sensibilités.

Nous appliquerons les méthodes CEP et BBEP dans un benchmark 1D représentatif d’une coupe axiale d’un réacteur SFR dont la géométrie est présentée figure III.15. La configuration directe est constituée d’un plenum sodium rempli et la configuration perturbée adjointe correspond à une vidange du plenum.

Les effets sont tout d’abord calculés par différence des valeurs propres. La géométrie très simplifiée permet de mener un calcul avec le code ERANOS/BISTRO sur des maillages très fins avec 1968 ou 3586 groupes d’énergie, et en utilisant un ordre d’anisotropie P_1 ou P_3 . Le calcul TRIPOLI-4[®] est lui mené avec l’option TABPROB (*i.e.* les tables de probabilités dans le domaine des résonances non-résolues sont utilisées) et NJOY (*i.e.* la section efficace est ponctuelle quelque soit l’énergie). En effet, la méthode CEP ne permet pas encore un calcul de référence avec l’option TABPROB. Le premier constat est qu’il subsiste, sur cette géométrie simple, et malgré un calcul fin déterministe, un écart entre TRIPOLI-4[®] et ERANOS de l’ordre de 4 à 5 %.

Tout d’abord, vérifions et validons la méthode BBEP (qui, elle, peut appliquer l’option TABPROB). Pour se faire, on remplace le plenum par un corps noir et on calcul deux perturbations : la première entre le corps noir et la configuration vidangée, la seconde entre le corps noir et la configuration non vidangée. L’effet total s’obtient alors par différence des deux effets, soit,

$$\Delta\rho_{\text{CN}}^{\text{BBEP}} = -1502 \pm 7 \text{ pcm} \quad (\text{III.106})$$

ce qui est cohérent avec l’effet calculé par différence de valeurs propres par TRIPOLI-4[®]. La convergence de cet effet en fonction du cycle IFP L , peut être analysée (*cf.* Fig. III.16). On voit, qu’à partir de 8 ou 9 générations, l’effet a convergé vers une valeur stable.

¹³Le plenum sodium correspond à un espace rempli de sodium qui surplombe généralement un cœur SFR.

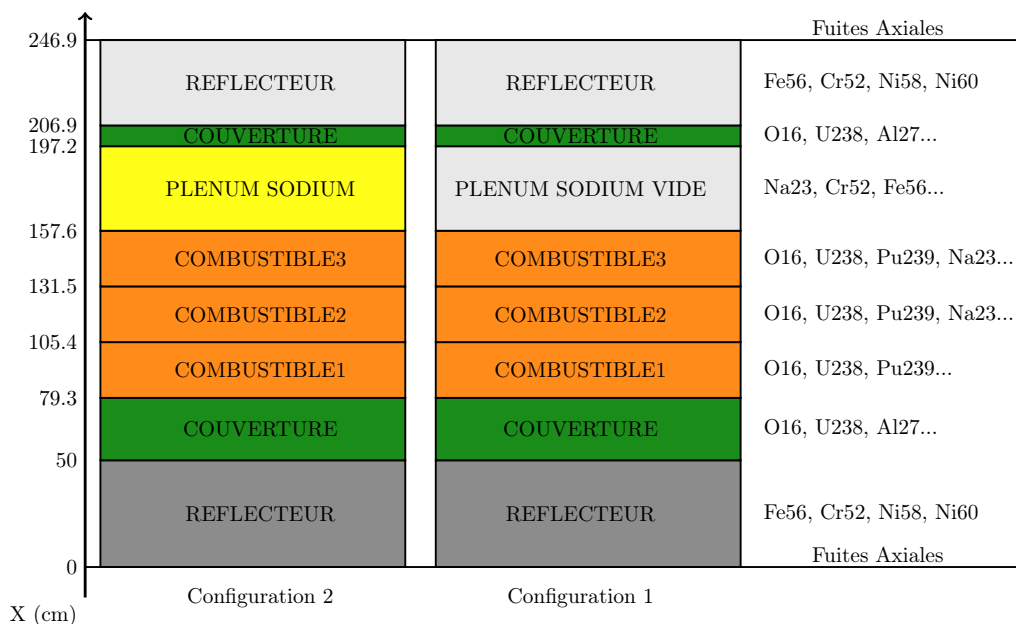
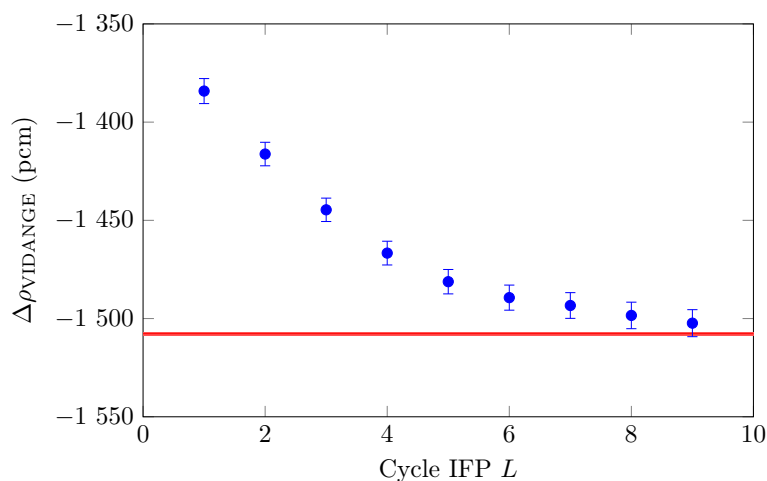


FIGURE III.15 – Géométries 1D du cœur plein et plenum vidangé.

 TABLEAU III.5 – Effet de vidange calculé par le code ERANOS et TRIPOLI-4[®]. En rouge la valeur de référence.

Reactivity (pcm)	ERANOS			TRIPOLI-4 [®]	
	1968g P1	1968g P3	3586g P1	TABPROB	NJOY
ρ_2	8785.9	8858.0	8684.1	8890.97	8432.4
ρ_1	7197.8	7274.5	7116.0	7383.3	6921.3
$\Delta\rho_{\text{VIDANGE}}$	-1588.1	-1583.5	-1568.1	-1507.7 ± 0.9	-1511.1 ± 0.9


 FIGURE III.16 – Convergence de la méthode BBEP en fonction de la longueur du cycle IFP L , dans le cas de la vidange du plenum sodium.

De manière à expliquer l'origine des différences entre le code ERANOS et le code TRIPOLI-4[®], la méthode CEP est utilisée afin de projeter l'effet sur les différentes réactions. Les résultats (cf. Tab. III.6) confirment tout d'abord un bon accord sur l'effet global entre la méthode CEP, BBEP et la différence des valeurs propres. Les différences entre les deux codes sont localisées sur les effets de diffusion (4 % d'écart

relative) et de capture (20 % d'écart relative). Si l'on peut concevoir que les effets de diffusion jouent un rôle prépondérant dans l'effet de vidange et qu'ils soient difficiles à calculer, il est très compliqué d'expliquer les 20 % d'écart entre les calculs stochastiques et déterministes sur l'effet de capture.

TABLEAU III.6 – *Projections de l'effet de vidange sodium par réaction. La dernière colonne compare l'écart de l'effet total vis-à-vis de la référence TRIPOLI-4[®].*

	CAPTURE	ELASTIQUE	INELASTIQUE	N,XN	TOTAL	C/C'-1
1968G-P1	95.3	-1653.9	-23.6	-0.003	-1583.3	5%
1968G-P3	95.0	-1648.6	-24.6	-0.003	-1578.2	4.7%
3586G-P1	90.4	-1630.3	-23.6	-0.003	-1564.4	3.8%
TRIPOLI-4 [®] CEP	76.3 ± 0.5	-1561.6 ± 20.7	-23.4 ± 0.8	-0.003	-1508.7 ± 20.8	0.0 ± 1.4%

En terme de temps de calcul, il faut noter que la méthode CEP est ici fortement limitée par le calcul des effets de diffusion (*i.e.* converger sur une différence de flux adjoints n'est pas toujours aisé en pratique) tandis que la méthode BBEP est nettement plus rapide (un facteur 10 environ). Bien que l'obtention de l'effet de vidange par la méthode de différence des valeurs propres soit encore plus rapide, il faut tenir compte de la taille de l'effet de vidange qui a été ici volontairement exagéré afin de vérifier notre implémentation. Certains effets de vidange sodium mesurés dans le réacteur expérimental MASURCA atteignent tout juste la centaine de pcm et peuvent justifier l'emploi d'une méthode exacte de perturbations.

Notre article [33] se poursuit par la vérification des flux direct et adjoint (*cf.* Fig. III.17) entre TRIPOLI-4[®] et ERANOS qui concordent parfaitement. Puis par la comparaison du profil de l'effet de capture (*cf.* Fig. III.17) montrant un très bon accord global mais aussi des différences significatives. Ces différences proviennent toutes du calcul des effets d'autoprotection (*i.e.* effet des sections microscopiques) induits par les isotopes restants dans la configuration vidangée tels que le chrome ou le fer. Cette étude a permis de mettre en place un nouveau schéma de calcul de l'effet de vidange dans le code ERANOS qui a permis de récupérer une grande partie du biais sur la vidange d'un cœur de type CFV. Ce schéma consiste à ne pas auto-protéger le sodium dans un milieu infini, mais plutôt dans une configuration 1D axiale telle que nous l'avons traitée ici. Cependant, à chaud, ce nouveau schéma de calcul ne répond toujours pas aux attentes.

Nos développements montrent néanmoins l'intérêt de disposer d'une méthode exacte pour la quantification des biais numériques associés aux schémas déterministes et leur amélioration.

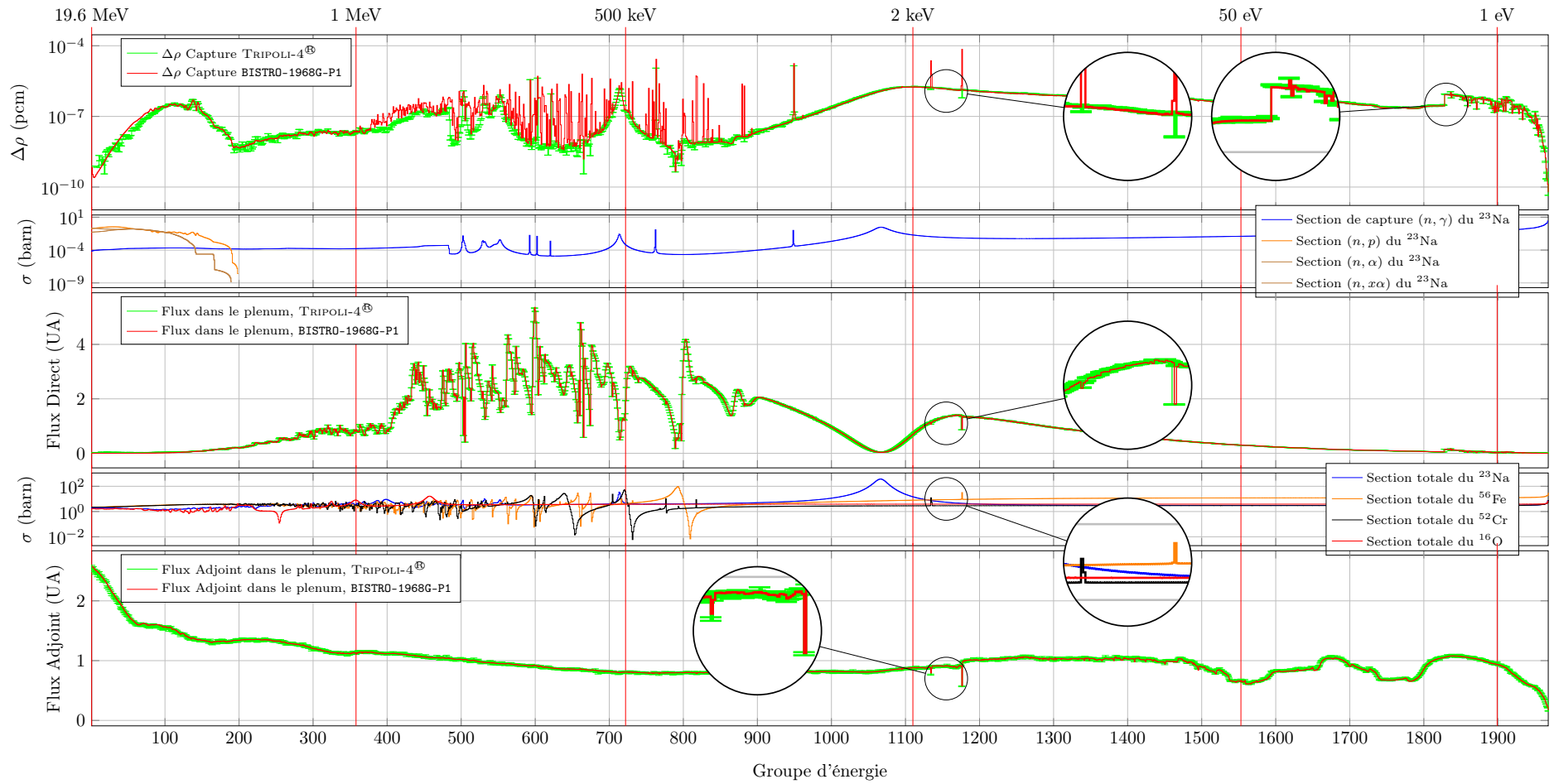


FIGURE III.17 – Haut : effet de vidange imputé à la capture du sodium en fonction du groupe d'énergie (calculé par la méthode CEP de TRIPOLI-4[®] et le code BISTRO). Cet effet est le produit du flux direct, de la somme « des sections » de capture du sodium et du flux adjoint (obtenu dans TRIPOLI-4[®] par la méthode AIWS). Nous indiquons également sur ces graphiques certaines zones d'intérêt, notamment au niveau de deux résonances du chrome et du fer qui sont à l'origine d'écart importants entre TRIPOLI-4[®] et BISTRO sur l'effet de capture du sodium. Une autre zone met en exergue une discontinuité de l'effet de capture induite par l'enclenchement de l'upscattering à basse énergie.

III.F.2 Benchmark CHANDA / OCDE-BUC-Phase VIII

Certains résultats de cette partie ont fait l'objet d'une publication et d'une présentation orale de l'auteur à la conférence SNA&MC, à Paris, en 2013 [34]. D'autres résultats ont été calculés lors du stage de Master de T. Gouriou.

Afin de valider les différentes méthodes qui seront utilisées pour interpréter les expériences d'oscillation dans MINERVE, le CEA est à l'origine de différents benchmarks internationaux dont font partie le benchmark CHANDA et le benchmark OCDE-BUC-Phase VIII [35]. Ces benchmarks « numériques » permettent la comparaison des différents codes ou schémas de calcul internationaux à données équivalentes (*i.e.* même géométrie, même données nucléaires, etc.). Les configurations traitées dans ces benchmarks se ressemblent et c'est pourquoi nous présentons les résultats de nos méthodes dans une unique section.

La première configuration étudiée correspond à un réseau de 7×7 cellules UOX modéré par l'eau légère et axialement infini (*cf.* Fig. III.18), où le crayon de la cellule centrale est dopé par différents isotopes. L'effet a été calculé par la méthode de différence des valeurs propres (T4_VP), par la méthode CEP (T4_CEP) et par la méthode des échantillons corrélés (T4_EC) en prenant alternativement l'une ou l'autre des configurations comme simulation de référence. La méthode CEP présente un très bon accord (*cf.* Fig. III.20) avec la méthode de la différence des valeurs propres. La méthode des échantillons corrélés présente parfois des différences très importantes selon le sens de la perturbation : lorsque la perturbation consiste à ajouter un isotope non présent dans le volume perturbé, les résultats ont tendance à ne pas être en accord avec la méthode de la différence des valeurs propres ; lorsque, au contraire on retire un isotope déjà présent, l'accord est bien meilleur (*i.e.* le domaine perturbé est inclus dans le domaine des configurations perturbées et de référence.), bien que la valeur obtenue diverge, par exemple, dans le cas d'un échantillon vide. Figure III.20 sont aussi présentés les résultats du code MCNP¹⁴ issus de la méthode de différence des valeurs propres (MCNP6_VP), de la méthode IFP des perturbations première ordre (MCNP6_IFP) et de la méthode de l'échantillonnage des dérivées au second ordre (MCNP6_ED). Bien que la méthode de différence des valeurs propres (MCNP6_VP) soit en accord avec (T4_VP), les méthodes MCNP6_IFP et MCNP6_ED fournissent des résultats qui ne sont pas en accord et démontrent la supériorité des méthodes implémentées dans TRIPOLI-4[®] pour ces applications spécifiques. Nous n'excluons pas non plus une erreur de calcul qui n'aurait pas été identifiée.

La seconde configuration correspond toujours à un réseau de 7×7 cellules UOX, mais axialement fini (*cf.* Fig. III.19). La zone perturbée correspond cette fois-ci à une portion de 10 cm de combustible centrée et maintenue axialement par de l'aluminium (de manière à reproduire le plus simplement possible le dispositif d'oscillation dans MINERVE). Nous comparons les effets calculés par la méthode BBEP et la méthode de différence des valeurs propres (*cf.* Fig. III.21, à gauche) lors du dopage du crayon central par différents isotopes. Les deux méthodes fournissent des résultats cohérents. Notons qu'à partir de cette taille de cœur, et pour une perturbation si faible, la méthode BBEP permet de n'analyser que l'intégrale de perturbation située au numérateur (*cf.* Eq. (III.104)), ce qui a pour effet de diminuer nettement les incertitudes (*cf.* Fig. III.21, à droite).

Enfin, une dernière configuration de 47×47 cellules UOX permet de calculer des effets représentatifs de ceux mesurés dans le réacteur MINERVE (environ 10 pcm). La méthode CEP est en accord avec la méthode de la différence des valeurs propres sur l'ensemble des perturbations testées (*cf.* Fig. III.22). Un écart plus accentué est visible pour le ²⁴⁰Pu, mais reste en dessous des 3σ . La méthode des échantillons corrélés montre les mêmes tendances que celles observées dans le réseau 7×7 axialement infini.

¹⁴Ces résultats représentent une partie de la contribution du CIEMAT au benchmark CHANDA. La version MCNP6 du code MCNP a été utilisée.

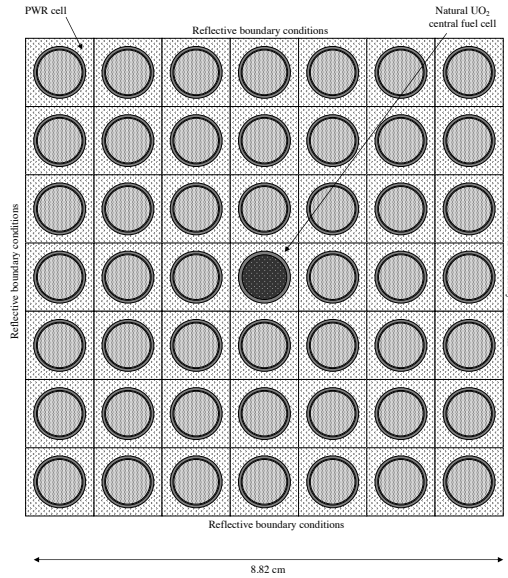


FIGURE III.18 – Coupe horizontale de la géométrie de calcul du benchmark CHANDA, réseau de 7×7 cellules REL/UOX.

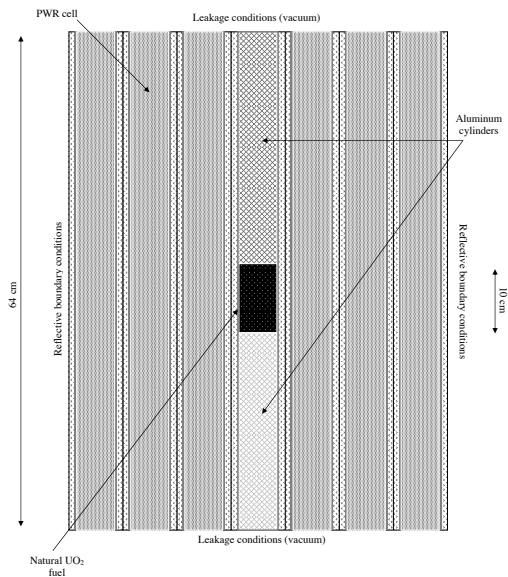


FIGURE III.19 – Coupe axiale de la géométrie de calcul du benchmark BUC-Phase VIII, réseau de 7×7 cellules REL/UOX axialement fini, comportant en son centre un échantillon combustible de hauteur 10 cm, centré entre 2 cylindres en aluminium.

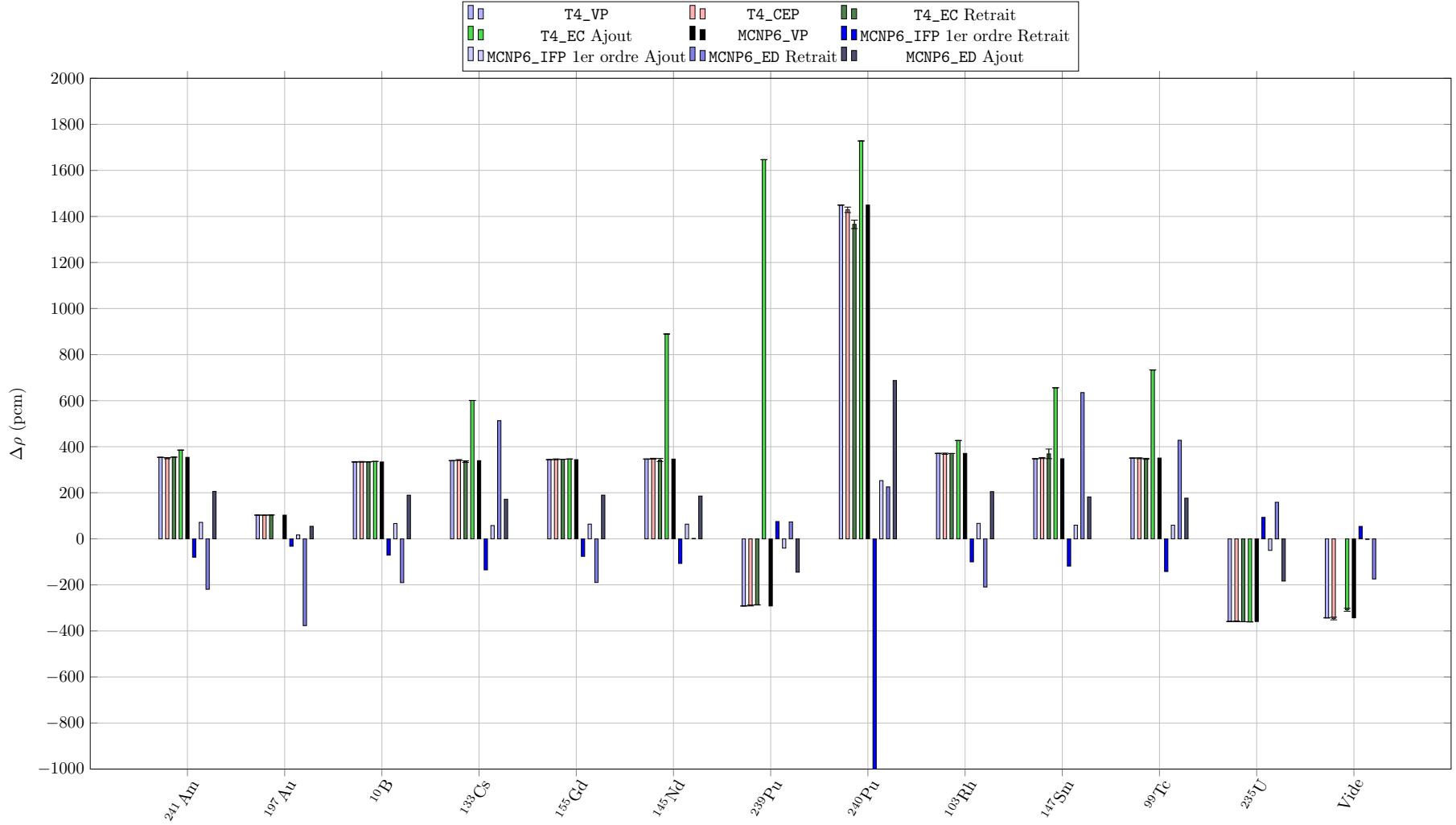
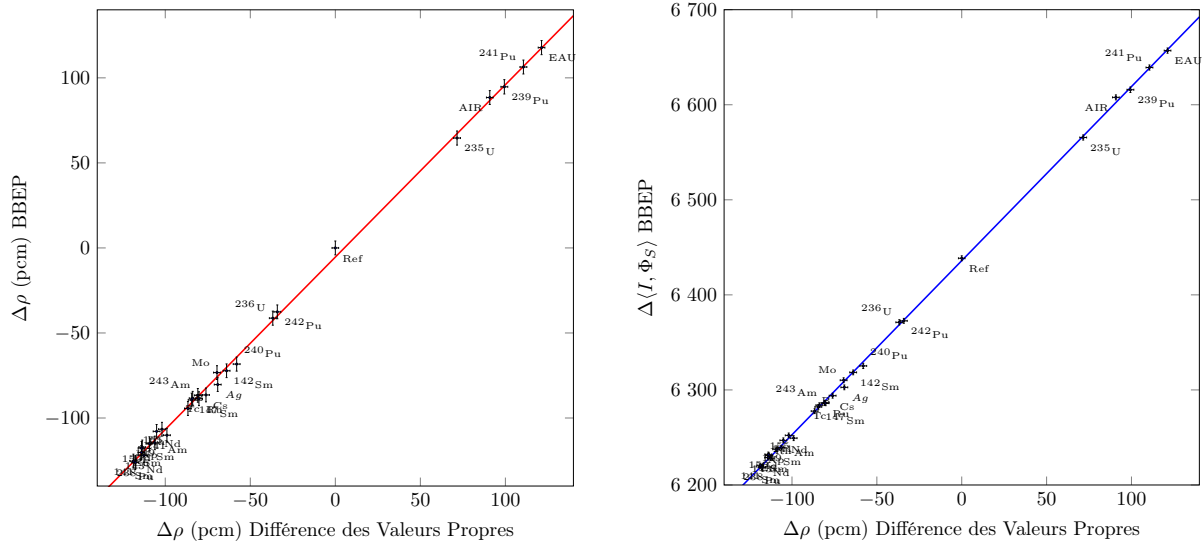


FIGURE III.20 – Perturbation en pcm induite par le dopage en différents isotopes du crayon central d'un réseau 7×7 cellules REL/UOX.



(a) Corrélations entre les différences de réactivités obtenues par la méthode BBEP et la méthode de différence des valeurs propres.

(b) Corrélations entre les importances moyennes du flux entrant dans le volume perturbé obtenues par la méthode BBEP et la différence de réactivité calculée par la méthode de différence des valeurs propres.

FIGURE III.21 – Méthode BBEP appliquée à un réseau de 7×7 cellules REL/UOX avec fuites axiales du benchmark de l'OCDE-BUC Phase VIII. Sur les deux figures, la probabilité pour qu'une croix d'incertitude ne touche pas la droite de régression est d'environ 10 % (les incertitudes de chaque dimension étant représentées à 1σ , il y a 67 % de chances qu'une dimension de la croix ne touche pas la droite, et $(33)^2/100 \sim 10$ % de chances que la croix ne touche pas la droite). Sur la trentaine de perturbations calculées, environ trois points doivent se trouver éloignés de la droite : c'est bien ce que nous comptons grossièrement.

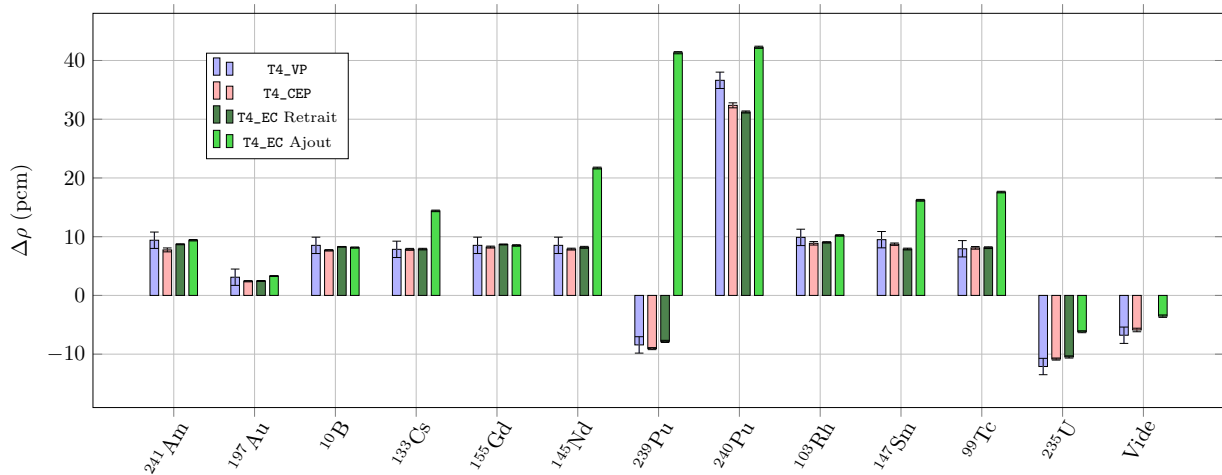
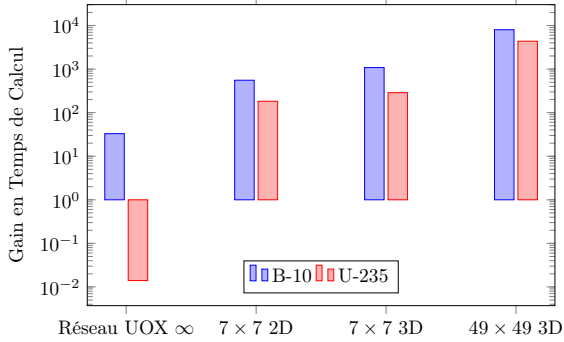


FIGURE III.22 – Perturbation en pcm induite par le dopage en différents isotopes du crayon central d'un réseau 47×47 cellules UOX.

En ce qui concerne les gains de temps obtenus avec méthode CEP par rapport à la méthode de la différence des valeurs propres (cf. Fig. III.24), ils sont de l'ordre d'un facteur 10000 pour la configuration la plus représentative du cœur de MINERVE (le réseau de 49×49 cellules UOX). Il devient alors possible d'atteindre par le calcul, la même précision que l'expérience. La méthode BBEP n'a pas encore été appliquée à une telle configuration mais présentait un gain de temps du même ordre que la méthode

CEP lors du calcul de la configuration 7×7 axialement finie (*cf.* résultats présentés dans la figure III.21).



(a) Gains sur la figure de mérite pour quatre configurations différentes. Un réseau REL/UOX infini, un réseau 7×7 axialement infini, un réseau 7×7 axialement fini et un réseau de 49×49 cellules REL/UOX.

$\Delta\rho$ (pcm) \rightarrow		^{10}B	^{235}U
Réseau ∞	VP	1264.4 ± 2.5	-32784 ± 4
	CEP	1261.8 ± 3.9	-32809 ± 154
7×7 2D	VP	283.5 ± 2.1	-221.3 ± 2.1
	CEP	282.3 ± 1.1	-221.7 ± 1.7
7×7 3D	VP	86.7 ± 2.0	-71.6 ± 2.0
	CEP	86.3 ± 0.5	-71.9 ± 0.8
49×49	VP	4.9 ± 3.3	-3.2 ± 3.3
	CEP	7.1 ± 0.1	-4.1 ± 0.1

(b) Effet en réactivité calculés par la méthode CEP et la méthode de différence des valeurs propres (VP), associés aux gains.

FIGURE III.23 – Gains sur la figure de mérite pour différentes perturbations et différents réseaux UOX.

III.F.3 Interprétations EOLE

Dans notre chapitre sur le flux adjoint (*cf.* Sec. II.C.2), nous avons déjà présenté de bons résultats de la méthode CEP face aux mesures dans une étude qui concernait la maquette DIMPLE. Des échantillons étaient alternativement extraits et insérés au centre du cœur de manière à en mesurer le poids en réactivité. Le calibrage entre le calcul et la mesure montrait un bien meilleur accord avec les valeurs Monte Carlo TRIPOLI-4[®] 3D qu'avec le code APOLLO2-MOC 2D. Les deux études qui vont suivre sont aussi des cas d'application de la méthode CEP et concernent respectivement :

- La comparaison calcul/mesure d'un *effet de bore*. Afin de maintenir un réacteur de puissance critique jusqu'au prochain rechargement du cœur, le combustible neuf possède une réserve de réactivité élevée. Ce « potentiel » neutronique doit être équilibré par l'ajout de poisons neutroniques afin de maintenir le réacteur exactement critique. La concentration de bore dans l'eau du réacteur, élevée au début d'un cycle diminue au fur et à mesure que le combustible se consume et cela jusqu'au prochain rechargement. Le poids en réactivité du bore en fonction de sa concentration doit être calculé avec précision.
- La comparaison calcul/mesure du poids en réactivité d'un échantillon d'erbium. Contrairement au bore, l'erbium n'est pas un poison neutronique soluble : il n'est pas contenu dans l'eau du réacteur, mais est introduit dans certains crayons de certains assemblages combustible. Lorsque la quantité est adéquate, ce poison solide se consume et vient compenser la sur-réactivité de l'assemblage.

III.F.3.i Coefficient de Bore MISTRAL1 et MISTRAL2

Les résultats de cette étude (*cf.* Tab. III.7) qualifient la méthode CEP et la bibliothèque JEFF-3.1.1 pour le calcul de l'effet de bore dans un spectre REP/UOX (correspondant au spectre de MISTRAL1) et REP/MOX (correspondant au spectre de MISTRAL2), bien qu'on observe une légère surestimation commune à tous les codes et méthodes.

TABLEAU III.7 – Comparaison calculs/expériences de l'effet de bore dans les cœurs MISTRAL1 et MISTRAL2. Les mesures sont comparées à des calculs TRIPOLI-4[®] par échantillons corrélés (notés EC), par la méthode CEP, par la méthode de la différence des valeurs propres (notés VP) et par utilisation d'un schéma SHEM-MOC dans le code APOLLO2.

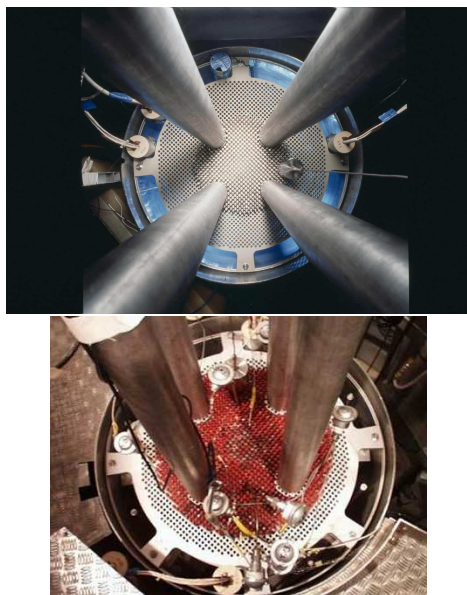
C/E-1	Mesures	TRIPOLI-4 [®] EC	TRIPOLI-4 [®] CEP	TRIPOLI-4 [®] VP	APOLLO2-MOC
MISTRAL1	$\pm 5.4 \%$	$3.1 \pm 5.4 \%$	$3.5 \pm 5.5 \%$	$3.7 \pm 5.5 \%$	$2.9 \pm 5.4 \%$
MISTRAL2	$\pm 2.9 \%$	$6.9 \pm 2.9 \%$	$5.7 \pm 3.0 \%$	$2.3 \pm 4.5 \%$	$3.7 \pm 3.0 \%$

III.F.3.ii Poids d'un Crayon UO₂ Empoisonné à l'Erbium

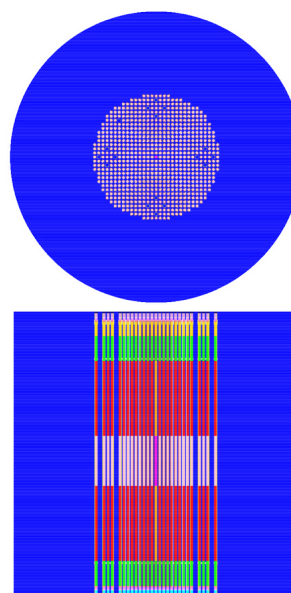
Le programme MIRTE consistait à mesurer le poids d'un crayon UOX empoisonné à l'erbium au centre du réacteur EOLE dans la configuration MISTRAL1. Le poids du crayon calculé par la méthode de la différence des valeurs propres atteint 1.5 pcm d'incertitude au bout de 24 heures \times 256 processeurs (6144 heures). L'effet calculé par la méthode CEP est cohérent avec la valeur de différence des valeurs propres (cf. Tab. III.8) mais atteint une précision de 0.4 pcm. Soit un facteur 14 de gain en temps de calcul.

TABLEAU III.8 – Comparaison calculs/expériences du poids d'un crayon UO₂ empoisonné à l'erbium dans une configuration MISTRAL1 du cœur d'EOLE. Les mesures sont comparées à des calculs TRIPOLI-4[®] par la méthode CEP, par la méthode de la différence des valeurs propres (notée VP) et par utilisation d'un schéma SHEM-MOC dans le code APOLLO2.

Méthode	C/E-1 (%)
TRIPOLI-4 [®] VP	-0.6 ± 3.0
TRIPOLI-4 [®] CEP	-0.9 ± 2.6
APOLLO2/SHEM-MOC	0.8 ± 2.6



(a) Photographies du réacteur EOLE dans ses configurations MISTRAL1 (en haut) et MISTRAL3 (en bas)



(b) Modélisation TRIPOLI-4[®] de la configuration MISTRAL1.

FIGURE III.24 – Illustrations du réacteur EOLE : configurations MISTRAL1 et MISTRAL3. Les configurations MISTRAL2 et MISTRAL3 sont très proches.

Bilan du Chapitre

Théorie : Calcul Exact des Perturbations de Réactivités

Différence des Valeurs Propres : simulation de deux systèmes indépendants, puis calcul de la différence des valeurs propres entre les deux systèmes.

Méthodes « Perturbatives » :

- Théorie exacte des perturbations (Méthodes CEP, BBEP).
- Théorie 1er ordre des perturbations (Méthodes CLUTCH, Méthode IFP). Les effets sont approchés par un développement au premier ordre de la perturbation, ce qui ne permet pas toujours de calculer l'effet sans un biais important.
- Introduire des corrélations (Méthodes de *échantillons corrélés* et ses variantes, Méthode du *dédoublément* des neutrons). Bien que mathématiquement exactes, certaines de ces méthodes n'arrivent pas à calculer des effets trop importants.

Nouvelles Méthodes dans TRIPOLI-4[®]

Méthode *Collision-based Exact Perturbation* CEP, basée sur le stockage des collisions de la simulation de référence, elle permet d'appliquer rigoureusement la théorie exacte des perturbations après avoir également réalisé un calcul de flux adjoint IFP dans un état de réacteur perturbé.

Méthode *Black Body Exact Perturbation* BBEP, basée sur le stockage du flux angulaire entrant dans le volume perturbé, elle permet de calculer la perturbation de réactivité entre un milieu « corps noir » de référence et un milieu quelconque perturbé.

Les vérification et validation de ces deux méthodes sur des perturbations simples mais complexes à calculer sont fort encourageantes et rendent possible le calcul d'effets locaux de grande magnitude, notamment dans le cadre des interprétations d'expérience d'oscillation réalisées dans le réacteur MINERVE.

Les points noirs de ces deux méthodes concernent principalement leur réglage par l'utilisateur (nombre de génération de référence à stocker, nombre de simulations indépendantes, longueur du cycle IFP, multiplicité des sources adjointes). Viennent ensuite les problèmes liés à l'espace de stockage et de convergence sur les réactions de diffusion élastique.

La méthode CEP présente deux limitations que nous aimerions corriger : la non-utilisation des tables de probabilités et l'impossibilité de calculer la perturbation liée à la variation des renvois angulaires des sections doublement différentielles. La méthode BBEP calcule uniquement l'effet total, mais présente l'avantage de pouvoir le faire sans approximation.

Bilan du Chapitre (suite)

Apports des Nouvelles Méthodes

Premiers calculs exacts de perturbations décomposés sur les isotopes et les réactions en Monte Carlo.

Calcul des effets de réactivités mesurés par oscillation d'un échantillon de matériau pur dans le réacteur MINERVE, dans une simulation 3D en Monte Carlo.

Perspectives

Évolution de la méthode CEP (prise en compte des tables de probabilité et de la perturbation des sections de renvoi).

Mise à jour de la méthode des échantillons corrélés implémentée dans TRIPOLI-4[®] au vue des nouvelles avancées dans le domaine.

Évolution de la méthode BBEP au calcul exact des perturbations généralisées.

Bibliographie

- [1] A. L. COCQ. “Contribution au développement des méthodes de Monte Carlo pour les études de criticité”. Thèse de doct. Université Paris XI, 1998 (cf. p. 68, 70).
- [2] P. REUSS. *Précis de neutronique*. EDP Sciences, 2012 (cf. p. 69, 72).
- [3] S. PERRUCHOT-TRIBOULET. “Validation et extensions du module d’autoprotection du code de transport neutronique multigroupe APOLLO 2”. Thèse de doct. Université Aix-Marseille I, 1996 (cf. p. 69).
- [4] D. HONDE et al. *ERANOS : Manuel des Méthodes - Les Calculs de Perturbations et les Analyses de Sensibilités*. NT/SPRC/LEPh 96-205. 1996 (cf. p. 69).
- [5] G. BELL et S. GLASSTONE. *Nuclear reactor theory*. Van Nostrand Reinhold Co., 1970 (cf. p. 69, 72).
- [6] J. SPANIER et E. GELBARD. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Dover Books on Mathematics Series. Dover Publications, 2008 (cf. p. 70).
- [7] A. DUBI et H. RIEF. *A Note on Some Aspect of Sensitivity Analysis in Monte Carlo*. NEACRP Specialists’ Meet on Nuclear Data and Benchmarks for Shielding, OECD Report. 1980 (cf. p. 70).
- [8] G. DEJONGHE, J. GONNORD et J. NIMAL. *Etude de perturbation utilisant la méthode de Monte-Carlo*. NEACRP Specialists’ Meet on Nuclear Data and Benchmarks for Shielding, OECD Report. 1980 (cf. p. 70).
- [9] J. E. OLHOEFT. “The Doppler Effect for a Non-Uniform Temperature Distribution in Reactor Fuel Elements”. Thèse de doct. Université du Michigan, 1963 (cf. p. 70).
- [10] H. RIEF. “Stochastic Perturbation Analysis Applied to Neutral Particle Transport”. English. In : *Advances in Nuclear Science and Technology*. T. 23. Springer US, 1996, p. 69–140 (cf. p. 70).
- [11] M. AUFIERO. “A collision history-based approach to sensitivity/perturbation calculations in the continuous energy Monte Carlo code SERPENT”. In : *Annals of Nuclear Energy* 85 (2015), p. 245–258 (cf. p. 70, 74).
- [12] B. KIEDROWSKI. *Adjoint Weighting for Continuous- Energy Monte Carlo Radiation Transport*. University of Wisconsin–Madison, 2009 (cf. p. 71).
- [13] Y. NAUCHI et T. KAMEYAMA. “Development of Calculation Technique for Iterated Fission Probability and Reactor Kinetic Parameters Using Continuous-Energy Monte Carlo Method”. In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 47.11 (2010), p. 977–990 (cf. p. 71).
- [14] L. N. USSACHOFF. “Equation for the importance of neutrons, reactor kinetics and the theory of perturbations”. In : *Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva, Switzerland*. 1956 (cf. p. 71).
- [15] C. M. PERFETTI. “Advanced Monte Carlo Methods for Eigenvalue Sensitivity Coefficient Calculations”. Thèse de doct. Université du Michigan, 2006 (cf. p. 72).
- [16] M. WILLIAMS. “The Relations Between Various Contributon Variables Used in Spatial Channel Theory Applied to Reactor Shielding Analysis”. In : *Nuclear Science and Engineering* 63 (1977) (cf. p. 72).

- [17] A. GRUEL. “Développement et Validation de schémas de calcul dédiés à l’interprétation des mesures par oscillation pour l’amélioration des données nucléaires”. Thèse de doct. Université de Grenoble, 2006 (cf. p. 73).
- [18] J. LEPPANEN. “The Serpent Monte Carlo code : Status, development and applications in 2013”. In : *Annals of Nuclear Energy* 82 (2015), p. 142–150 (cf. p. 74).
- [19] A. GANDINI. “Generalized Perturbation Theory (GPT) Methods. A Heuristic Approach”. English. In : *Advances in Nuclear Science and Technology*. Sous la dir. de J. LEWINS et M. BECKER. T. 19. Advances in Nuclear Science and Technology. Springer US, 1987, p. 205–380 (cf. p. 74, 80).
- [20] F. BROWN. *Communication privée avec F. Brown (LANL)*. 2014 (cf. p. 76).
- [21] G. PALMIOTTI. “The ‘FRENCH’ (flux reconstructed explicitly by neutronic calculated harmonics) method in multidimensional and multigroup theory”. In : *Annals of Nuclear Energy* 14.4 (1987), p. 167–176 (cf. p. 76).
- [22] E. BRUN et al. “Overview of TRIPOLI-4 version 7, Continuous-energy Monte Carlo Transport Code”. In : *ICAPP 2011*. 2011 (cf. p. 77).
- [23] B. DEHAYE. “Accélération de la convergence dans le code de transport de particules Monte-Carlo TRIPOLI-4® en criticité”. Thèse de doct. Université Paris 11, 2010 (cf. p. 78).
- [24] K. S. SMITH et R. W. SCHAEFER. “Recent Developments in the Small Sample reactivity Discrepancy”. In : *Nuclear Science and Technology* 87 (1984), p. 314 (cf. p. 80).
- [25] C. M. PERFETTI et B. T. REARDER. “Continuous-Energy Monte Carlo Methods for Calculating Generalized Response Sensitivities using Tsunami-3D”. In : *PHYSOR 2014, Kyoto, Japon*. 2014 (cf. p. 82).
- [26] H. O. HARTLEY et ROSS. “Unbiased ratio estimators”. In : *Nature* 174 (1954) (cf. p. 87).
- [27] B. EFRON. “Unbiased ratio estimators”. In : *Annals of Statistics* 7 (1979) (cf. p. 87).
- [28] G. van KEMPEN et L. van VLIET. “Mean and Variance of Ratio Estimators Used in Fluorescence Ratio Imaging”. In : *Cytometry* 39 (2000) (cf. p. 87).
- [29] J. M. PALAU, P. ARCHIER et J. F. VIDAL. “Recent advances in the V&V of the New French CEA APOLLO3 Neutron Transport Code : Benchmarks Analysis of the Flux Solvers”. In : *PHYSOR 2014, Kyoto, Japon*. 2014 (cf. p. 88).
- [30] L. B. LEVITT. “The Probability Table Method for Treating Unresolved Neutron Resonances in Monte Carlo Calculations”. In : *Nuclear Science and Engineering* 49.4 (1972) (cf. p. 88).
- [31] OCDE/NEA. *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. NEA/NSC/DOC(95)03. 2012 (cf. p. 91).
- [32] A. SANTAMARINA, D. BERNARD et Y. RUGAMA. *The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library*. https://www.oecd-nea.org/dbdata/nds_jefreports/jefreport-22/nea6807-jeff22.pdf. 2009 (cf. p. 95).
- [33] G. TRUCHET et al. “Sodium Void Reactivity Effect Analysis using the Newly Developed Exact Perturbation Theory in Monte Carlo Code TRIPOLI-4”. In : *PHYSOR 2014, Kyoto, Japon*. 2014 (cf. p. 100, 102).
- [34] G. TRUCHET et al. “Continuous-Energy Adjoint Flux and Perturbation Calculation using the Iterated Fission Probability Method in Monte Carlo Code TRIPOLI-4 and Underlying Applications”. In : *SNA + MC 2013, Paris, France*. 2013 (cf. p. 104).
- [35] P. LECONTE et A. SANTAMARINA. *Calculation benchmark for the analysis of Small-sample Reactivity Experiments*. https://www.oecd-nea.org/science/wpncs/buc/specifications/phase-VIII/BenchmarkSmallSampleReactivityExperiments_Dec2010.pdf. 2010 (cf. p. 104).

Chapitre IV

Profils et Coefficients de Sensibilité

Sommaire

IV.A Expressions Calculées par TRIPOLI-4®	117
IV.B Illustrations	118
IV.B.1 Solutions Critiques de Plutonium	118
IV.B.2 Benchmark OCDE, UACSA, Phase III	121
IV.B.3 Capacités de Post-Traitement	130
IV.C Vers l'Évaluation des Incertitudes	133

Dans l'objectif d'évaluer l'impact des incertitudes associées aux données nucléaires sur la valeur du facteur de multiplication moyen des neutrons par fission, k_{eff} , l'une des méthodes les plus employées nécessite le calcul des sensibilités de ce facteur aux données nucléaires. Un coefficient de sensibilité exprime la variation d'un paramètre neutronique induite par une variation infinitésimale d'un autre paramètre : c'est l'expression d'une dérivée au premier ordre. Le terme « coefficient » tend à indiquer une valeur intégrale par opposition au terme « profil » qui indique un ensemble de valeurs qui sont le plus généralement distribuées sur des groupes d'énergie, voire sur un maillage spatial. Dans la pratique, ces études souffrent de n'être menées rigoureusement que dans les codes déterministes, avec bien souvent des modèles très simplifiés. L'arrivée d'une méthode Monte Carlo permettant d'évaluer le flux adjoint permet l'évaluation de sensibilités de référence.

Ce chapitre a pour objectif de présenter les nouveaux développements associés à la sensibilité du k_{eff} aux données nucléaires dans TRIPOLI-4[®]. Ils seront illustrés par quelques études bénéficiant de ce nouveau support.

IV.A Expressions Calculées par TRIPOLI-4[®]

En neutronique, on exprime généralement la sensibilité $S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}$ du k_{eff} par rapport à la section efficace de la réaction r d'un isotope i en pourcent par pourcent, (ou en France en pcm par pourcent) ; soit la variation relative de l'un par rapport à l'autre,

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}} = \left[\frac{\partial k_{\text{eff}}}{k_{\text{eff}}} / \frac{\partial \sigma_{i,r}}{\sigma_{i,r}} \right]_{\sigma_{i,r}^{\text{ref}}} \quad (\text{IV.1})$$

où $\frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial \sigma_{i,r}}$ peut être approché, selon les méthodes, par le calcul direct de la variation δk_{eff} induite par une faible variation $\delta \sigma_{i,r}$ autour de sa référence $\sigma_{i,r}^{\text{ref}}$, ou bien en établissant le lien,

$$\frac{\partial k_{\text{eff}}}{k_{\text{eff}}} = \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{k_{\text{eff}}} = k_{\text{eff}}^2 \frac{\partial \rho}{k_{\text{eff}}} = k_{\text{eff}} \partial \rho, \quad (\text{IV.2})$$

avec la théorie des perturbations au premier ordre (cf. Sec. III.A.2.i) qui exprime la quantité $\frac{\partial \rho}{\partial \sigma_{i,r}}$. Il vient que :

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}} = \left[k_{\text{eff}} \sigma_{i,r} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma_{i,r}} \right]_{\sigma_{i,r}^{\text{ref}}} \quad (\text{IV.3})$$

La sensibilité au *terme d'absorption* d'une section s'écrit donc :

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}^{\text{a}} = -k_{\text{eff}} \frac{\langle \Phi^\dagger(\epsilon), N_i \sigma_{i,r}^{\text{ref}}(\epsilon) \Phi(\epsilon) \rangle}{\langle \Phi^\dagger(\epsilon'), \mathcal{P}(\epsilon \rightarrow \epsilon') \Phi(\epsilon) \rangle}, \quad (\text{IV.4})$$

où N_i est la concentration en isotope i , \mathcal{P} l'opérateur de production par fission, Φ le flux direct critique et Φ^\dagger le flux adjoint critique. Lorsque la section présente un terme d'émission (c'est-à-dire qu'un neutron est émis après réaction), le *terme d'émission* de la section renvoyant $\nu_{i,r}$ neutrons et suivant une probabilité de renvoi $f_{i,r}$ s'exprime par,

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}^{\text{e}} = k_{\text{eff}} \frac{\langle \Phi^\dagger(\epsilon'), \nu_{i,r}(\epsilon) f_{i,r}(\epsilon \rightarrow \epsilon') N_i(\epsilon) \sigma_{i,r}^{\text{ref}}(\epsilon) \Phi(E, \hat{\Omega}) \rangle}{\langle \Phi^\dagger(\epsilon'), \mathcal{P}(\epsilon \rightarrow \epsilon') \Phi(\epsilon) \rangle}. \quad (\text{IV.5})$$

Lorsque la section $\sigma_{i,r}$ est une section de fission, le *terme d'émission* est appelé sensibilité au *terme de production* et doit être divisé par le k_{eff} (en accord avec la formule des perturbations),

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}^{\text{p}} = \frac{\langle \Phi^\dagger(\epsilon'), \nu_{i,r}(\epsilon) f_{i,r}(\epsilon \rightarrow \epsilon') N_i(\epsilon) \sigma_{i,r}^{\text{ref}}(\epsilon) \Phi(E, \hat{\Omega}) \rangle}{\langle \Phi^\dagger(\epsilon'), \mathcal{P}(\epsilon \rightarrow \epsilon') \Phi(\epsilon) \rangle}, \quad (\text{IV.6})$$

terme qui est aussi appelé sensibilité au facteur ν de multiplication des neutrons par fission. Afin d’obtenir la sensibilité totale $S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}$ d’une section $\sigma_{i,r}$, on somme les termes d’*absorption* et d’*émission* (ou de *production*),

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}} = S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}^{\text{a}} + S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}^{\text{e ou p}}, \quad (\text{IV.7})$$

tandis que la sensibilité totale d’un isotope s’obtient en sommant les sensibilités de chaque réaction : $S_{k_{\text{eff}}/i} = \sum_r S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}}$.

Afin d’évaluer ces quantités, nous utiliserons le schéma de calcul en deux étapes de la méthode CEP (cf. Sec. III.D) au cours duquel toutes les grandeurs intervenant dans les expressions des sensibilités sont stockées. Le besoin de *vérification* et de *validation* du module de sensibilité est alors considérablement allégé par le retour d’expérience acquis dans le développement de la méthode CEP.

IV.B Illustrations

Les illustrations que nous présentons ci-après sont des cas d’école de l’utilisation des nouveaux modules de sensibilités destinés à être intégrés au code TRIPOLI-4[®]. Beaucoup de ces traitements utilisent le petit utilitaire C++ mis en place afin de post-traiter les résultats ponctuels de la méthode CEP avec plus de facilité.

- Une première étude concerne des solutions critiques de plutonium. Les sensibilités du k_{eff} aux sections du plutonium y sont calculées par la méthode CEP et comparées à celles issues de la « méthode des échantillons corrélés » et du code APOLLO-2.
- La seconde illustration correspond au travail réalisé dans le cadre de la participation de l’auteur à un benchmark international sur le calcul des sensibilités. Les sensibilités seront calculées sur deux boules d’uranium enrichies à 2 % et 50 %.
- Enfin, une suite d’illustrations détaille les larges possibilités offertes par la méthode en terme de post-traitement.

IV.B.1 Solutions Critiques de Plutonium

Pour cette partie, l’auteur tient à remercier E. POUGET [1] qui a été en charge de cette étude encadrée par P. LECONTE durant l’année 2014.

Dans l’objectif de réaliser un retour sur les données nucléaires, une analyse poussée a été conduite sur la série de benchmarks des solutions critiques de plutonium (PU-SOL-THERM) référencés dans la base internationale ICSBEP [2]. Cette étude a, dans un premier temps, consisté à calculer des sensibilités aux données nucléaires dans le but de propager leurs incertitudes, puis de réaliser un retour sur les sections elles-mêmes. En effet, les sections des différents isotopes du plutonium sont moins bien connues que celles de l’uranium, le retour des expériences intégrales est donc d’autant plus appréciable qu’il peut permettre la correction d’un biais sur le niveau des sections ou une réduction notable des incertitudes.

Nous présenterons ici les sensibilités du k_{eff} aux sections des isotopes de capture et de fission du ^{239}Pu et du ^{240}Pu sur un maillage à 15 groupes d’énergie (typique des études de sensibilités au CEA, voir tableau IV.1) et en se limitant au benchmark PST-01-01. Les trois méthodes suivantes seront appliquées,

- T4_CEP, méthode exacte des perturbations dans TRIPOLI-4[®] (cf. Sec. III.C.2),
- T4_EC, méthodes des échantillons corrélés dans TRIPOLI-4[®],
- A2, code déterministe APOLLO2 et calculs S_{32}/P_5 .

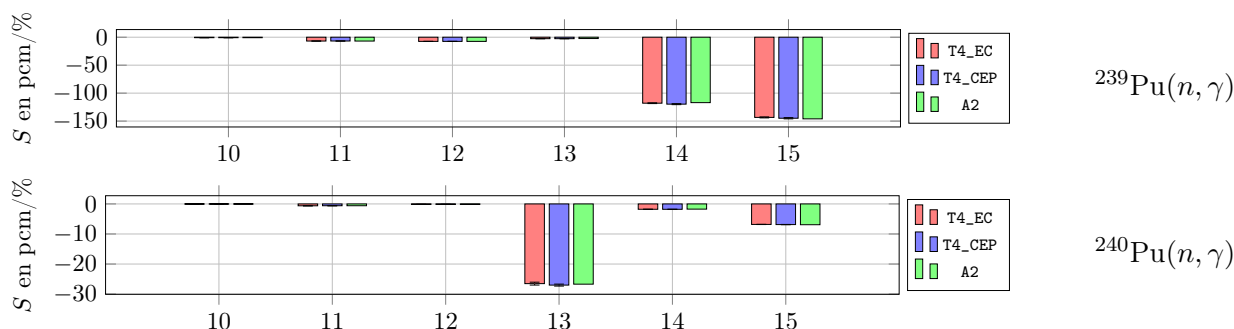
TABLEAU IV.1 – Groupes d'énergie du maillage à 15 groupes.

Groupe	E_{\min} (eV)	E_{\max} (eV)
15	1.000000×10^{-05}	1.000000×10^{-01}
14	1.000000×10^{-01}	5.400000×10^{-01}
13	5.400000×10^{-01}	$4.000000 \times 10^{+00}$
12	$4.000000 \times 10^{+00}$	$2.260329 \times 10^{+01}$
11	$2.260329 \times 10^{+01}$	$4.539993 \times 10^{+02}$
10	$4.539993 \times 10^{+02}$	$2.034684 \times 10^{+03}$
9	$2.034684 \times 10^{+03}$	$9.118820 \times 10^{+03}$
8	$9.118820 \times 10^{+03}$	$2.478752 \times 10^{+04}$
7	$2.478752 \times 10^{+04}$	$6.737947 \times 10^{+04}$
6	$6.737947 \times 10^{+04}$	$1.831564 \times 10^{+05}$
5	$1.831564 \times 10^{+05}$	$4.978707 \times 10^{+05}$
4	$4.978707 \times 10^{+05}$	$1.353353 \times 10^{+06}$
3	$1.353353 \times 10^{+06}$	$2.231302 \times 10^{+06}$
2	$2.231302 \times 10^{+06}$	$6.065307 \times 10^{+06}$
1	$6.065307 \times 10^{+06}$	$1.964033 \times 10^{+07}$

Les résultats obtenus sont similaires en ce qui concerne la sensibilité à la section de capture des deux isotopes (*cf.* Tab. IV.2). Un accord rigoureux est obtenu entre la méthode T4_CEP et la méthode des échantillons corrélés T4_EC. Seuls les groupes de basses énergies ont été représentés car il s'agit d'un benchmark à sensibilités thermiques.

TABLEAU IV.2 – Sensibilités du k_{eff} en pcm/% du benchmark PST-01-01 aux sections de capture du ^{239}Pu et du ^{240}Pu sur le maillage à 15 groupes d'énergie.

Groupe d'énergie	$^{239}\text{Pu}(n, \gamma)$					$^{240}\text{Pu}(n, \gamma)$				
	T4_EC		T4_CEP		A2	T4_EC		T4_CEP		A2
	S	σ	S	σ		S	σ	S	σ	
15	-143.4	0.9	-144.9	1.1	-146.0	-6.82	0.04	-6.87	0.05	-6.92
14	-118.0	0.7	-119.7	0.9	-117.0	-1.78	0.01	-1.79	0.01	-1.73
13	-2.60	0.02	-2.62	0.02	-2.37	-26.52	0.48	-27.01	0.33	-26.7
12	-7.47	0.12	-7.46	0.07	-7.47	-0.14	0.01	-0.14	0.04	-0.14
11	-6.86	0.10	-6.80	0.07	-6.89	-0.62	0.02	-0.60	0.01	-0.60
10	-0.85	0.01	-0.85	0.01	-0.87	-0.03	0.001	-0.03	0.03	-0.03

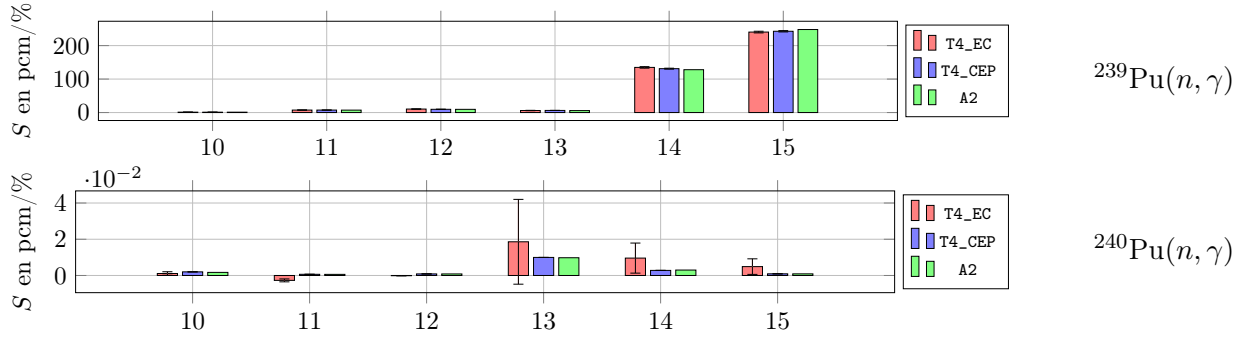


L'analyse de la sensibilité à la section de fission (terme d'absorption et de production) permet également de montrer le bon accord des méthodes T4_CEP et A2 (*cf.* Tab. IV.3). Cependant la sensibilité

calculée par échantillon corrélé T4_EC, présente une incertitude anormale pour le ^{240}Pu : en effet il s'agit d'un problème intrinsèque aux échantillons corrélés : bien que mathématiquement exacte, cette méthode est incapable de calculer une perturbation sur des événements inexistantes (ou très peu probables) comme la fission d'un isotope peu présent et peu fissile (*cf.* encadré sur les limites de la méthode des échantillons corrélés page 75).

TABLEAU IV.3 – Sensibilités du k_{eff} en pcm/% du benchmark PST-01-01 aux sections de fission du ^{239}Pu et du ^{240}Pu sur le maillage à 15 groupes d'énergie.

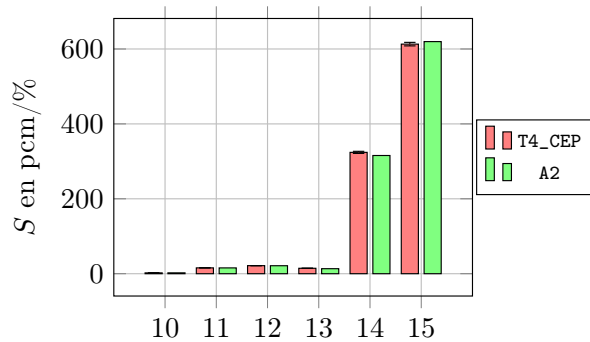
Groupe d'énergie	$^{239}\text{Pu}(n, f)$					$^{240}\text{Pu}(n, f)$				
	T4_EC		T4_CEP		A2	T4_EC		T4_CEP		A2
	S	σ	S	σ		S	σ	S	σ	
15	240.4	2.5	242.8	2.0	248	4.9×10^{-3}	4.3×10^{-3}	9.18×10^{-4}	0.08×10^{-4}	9×10^{-4}
14	134.86	2.3	131.08	1.4	128	9.6×10^{-3}	8.3×10^{-3}	2.81×10^{-3}	0.03×10^{-4}	3×10^{-3}
13	6.08	0.54	6.32	0.07	5.85	1.86×10^{-2}	2.34×10^{-2}	9.97×10^{-3}	0.02×10^{-3}	9.8×10^{-3}
12	10.42	0.66	9.68	0.17	9.57	-1.2×10^{-4}	0.7×10^{-4}	8.7×10^{-4}	0.6×10^{-4}	8.56×10^{-4}
11	7.40	0.54	7.38	0.10	7.24	-2.7×10^{-3}	0.8×10^{-3}	6.5×10^{-4}	0.2×10^{-4}	6.2×10^{-4}
10	1.15	0.24	1.06	0.01	1.10	1.09×10^{-3}	0.98×10^{-3}	2.00×10^{-3}	0.07×10^{-3}	1.71×10^{-3}



La sensibilité au ν total (*cf.* Tab. IV.4), calculée par T4_CEP et A2 confirme le bon accord général entre le calcul déterministe et le calcul Monte Carlo. Notons que la méthode des échantillons corrélés implémentée dans TRIPOLI-4[®] ne propose pas cette fonctionnalité de calcul. La méthode T4_CEP est par ailleurs également en mesure de calculer la sensibilité au spectre de fission dont nous présenterons quelques exemples dans la suite de ce chapitre.

TABLEAU IV.4 – Sensibilités du k_{eff} en pcm/% du benchmark PST-01-01 au ν total, sur le maillage à 15 groupes d'énergie.

Groupe d'énergie	T4_CEP		A2
	S	σ	
15	613.0	4.7	619.7
14	324.0	2.8	315.6
13	14.5	0.1	13.4
12	21.5	0.2	21.3
11	15.6	0.2	15.5
10	2.18	0.02	2.27



Les performances des trois méthodes en terme de temps de calcul sont présentées dans le tableau IV.5. Le code APOLLO présente une efficacité indéniable vis-à-vis des méthodes Monte Carlo qui, présentent des temps de calcul similaires entre elles. Cependant, la reproduction exacte d'une géométrie 3D dans un code déterministe dans le but de calculer des sensibilités n'est pas toujours réalisable et

bien souvent ces études se limitent à des simplifications 1D ou 2D. Or certains effets d’auto-protection énergétique et spatiale ne peuvent être pris en compte que dans une simulation 3D continue en énergie. C’est là tout l’avantage d’une méthode de référence Monte Carlo du calcul des perturbations.

TABLEAU IV.5 – Temps de calcul des sensibilités présentées du PST-01-01.

Méthode	CPU × (Temps de Simulation)	Temps cpu cumulé
A2	1 × (90 min)	1.5 h
T4_IFP	64 × (38 min)	40.5 h
T4_EC	64 × (43 min)	45.9 h

IV.B.2 Benchmark OCDE, UACSA, Phase III

Les résultats qui vont suivre ont été présentés lors d’une réunion du groupe UACSA de l’OCDE/NEA/WPEC; de plus cette application fait l’objet d’une publication à la conférence ICNC2015 [3], Charlotte USA.

Le benchmark UACSA, Phase III, a été initié par l’OCDE [4] afin de partager les expertises des différents pays et laboratoires dans le domaine du calcul de sensibilité du k_{eff} aux données nucléaires. Nous présentons ici le calcul de la phase III, sous phase III-3. Les deux « boules » fissiles étudiées, sans lien direct avec la réalité, sont constituées d’un mélange d’uranium et d’oxyde fluorhydrique dont les concentrations sont rassemblées dans le tableau IV.6. L’objectif de ce benchmark est d’analyser les effets « implicites »¹ sur les calculs de sensibilités multi-groupes.

TABLEAU IV.6 – Concentrations (10^{-24} atomes/cm²) et rayons des boules des solutions du Benchmark UACSA Phase III-3.

	Enrichissement ($\sim 2\%$ ²³⁵ U)	Enrichissement ($\sim 50\%$ ²³⁵ U)
Rayon	36 cm	18.2 cm
²³⁵ U	1.3303×10^{-4}	3.2850×10^{-3}
²³⁸ U	6.4370×10^{-3}	3.2850×10^{-3}
H	3.9097×10^{-2}	3.9097×10^{-2}
C (nat)	1.8797×10^{-2}	1.8797×10^{-2}
¹⁹ F	2.6280×10^{-2}	2.6280×10^{-2}

Ces deux configurations permettent d’étudier la capacité des codes à calculer des sensibilités différentes : en effet, un enrichissement de 2 % va induire un spectre en énergie des neutrons plutôt « thermique » tandis qu’un enrichissement à 50 % induira un spectre plutôt « rapide ». Les sections efficaces sollicitées dans des spectres différents n’influent pas de manière égale sur le k_{eff} . Afin de démontrer la justesse de la nouvelle méthode développée dans le code TRIPOLI-4[®], nous présenterons, pour le calcul des sensibilités intégrées, les résultats issus des calculs suivants :

- ① ERANOS [5] /ECCO [6] →BISTRO [7] sur 1968 groupes d’énergie, utilisant des sections anisotropes d’ordre P₅. Les bibliothèques d’ERANOS ne permettant pas l’utilisation de l’isotope d’hydrogène dans la matrice CH₂, le calcul a été réalisé avec l’isotope H seul. Il s’agit pour nous d’un calcul de référence déterministe. (*Commissariat à l’Energie Atomique*).
- ② TRIPOLI-4[®], méthode CEP développée dans cette thèse, avec l’isotope H « seul ». (*CEA*).

¹Les effets dits « implicites » sur les sensibilités sont des effets d’auto-protection induits par le recouvrement énergétique et spatial de résonances de différents isotopes.

- ③ TRIPOLI-4[®], méthode CEP, avec l'isotope H_{CH₂}. (*CEA*).
- ④ MCNP-6, méthode des sensibilités premier ordre IFP, avec l'isotope H_{CH₂}. (*Los Alamos National Laboratory*).
- ⑤ TRIPOLI-4[®], méthode CEP en semi-multigroupe (*cf.* Approximation SMG de la méthode CEP développée Section III.D.2.iv) avec l'isotope H_{CH₂} où les produits scalaires ont été réalisés sur un maillage à 1968 groupes d'énergie. (*CEA*).
- ⑥ SCALE6 à 238 groupes d'énergie avec l'isotope H_{CH₂}. (*Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire*).

Puis nous analyserons les différences de profils en énergie entre les calculs ① et ②.

IV.B.2.i Coefficients de Sensibilités Intégrés

Les résultats de l'ensemble des calculs pour la boule enrichie à 2 % sont présentés dans le tableau IV.7. Cette boule thermique est bien entendu très sensible aux ν de l'²³⁵U². Les sensibilités se compensent souvent entre elles, il en va de même des erreurs, ce qui bien souvent limite l'impact du schéma de calcul sur les valeurs intégrées des sensibilités. Sur cette configuration, l'²³⁵U apporte les neutrons par fission (d'où sa forte sensibilité positive), l'²³⁸U joue majoritairement un rôle capturant (d'où une forte sensibilité négative), et l' H joue lui le rôle de modérateur/réfecteur accompagnant les neutrons à leur énergie de fission et limitant leur fuite hors de la boule.

Comparons en détail les méthodes ① et ②. Nous n'observons pas de différence notable entre le calcul déterministe et le calcul Monte Carlo, les résultats tombent le plus souvent dans l'intervalle de confiance statistique des 3σ . Deux légères différences doivent cependant être mises en exergue : la sensibilité à la capture et à l'élastique de l'²³⁸U. Bien que des erreurs sur la sensibilité de ces réactions ne présentent pas un problème majeur étant donné leur faible impact sur le k_{eff} , par souci de bien faire, nous étudierons dans la section suivante leurs possibles origines à travers le tracé de leur profil énergétique.

La comparaison des résultats ③ et ④ montre un accord parfait entre le code TRIPOLI-4[®] et le code MCNP-6, rappelons que ces deux codes utilisent des méthodes proches, basées sur les IFP, mais que leur façon de procéder est différente.

La comparaison des résultats ⑤ et ⑥ montre un accord relatif. Cependant les sensibilités à l'élastique de l'²³⁸U sont très mal calculées par rapport aux résultats de référence ③ et ④. Ce gros écart observé sur un calcul multigroupe est en partie comblé en réalisant les intégrations sur les flux angulaires et non sur les flux scalaires comme le suggèrent les résultats bien plus cohérents obtenus par ① avec une méthode multigroupe.

En ce qui concerne la seconde boule, « rapide », les résultats (*cf.* Tab. IV.8) présentent une sensibilité à l'²³⁸U en baisse ainsi que les mêmes tendances générales : un bon accord entre ③ et ④ et de légères différences entre ① et ② au niveau de l'élastique et de la capture de l'²³⁸U sont également visibles, tout comme dans la première configuration.

IV.B.2.ii Profils de Sensibilités

Afin d'analyser en détail les approximations du schéma déterministe ① ERANOS/ECCO→BISTRO sur 1968 groupes d'énergie, traçons les sensibilités à la capture (*cf.* Fig. IV.1) et à la diffusion élastique (*cf.* Fig. IV.2) de l'²³⁸U.

²La sensibilité au ν total est par définition égale à 1 % pour 1 %.

TABLEAU IV.7 – Sensibilités intégrées pour la boule enrichie à 2 % (en % par %).

Isotopes	Réaction	ERANOSH MG ①	T4 _H ②		T4 _{HCH₂} ③		MCNP _{HCH₂} ④		T4 _{HCH₂} SMG ⑤		SCALE6 _{HCH₂} MG ⑥
			$S_{i,r}$	σ	$S_{i,r}$	σ	$S_{i,r}$	σ	$S_{i,r}$	σ	
²³⁵ U	Total	2.59×10 ⁻⁰¹	2.61×10 ⁻⁰¹	5.73×10 ⁻⁰⁴	2.53×10 ⁻⁰¹	3.88×10 ⁻⁰³	2.53×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	2.42×10 ⁻⁰¹	2.86×10 ⁻⁰⁴	2.54×10 ⁻⁰¹
	Capture	-1.11×10 ⁻⁰¹	-1.11×10 ⁻⁰¹	2.05×10 ⁻⁰⁴	-1.12×10 ⁻⁰¹	9.13×10 ⁻⁰⁴	-1.12×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	-1.14×10 ⁻⁰¹	1.36×10 ⁻⁰⁴	-1.12×10 ⁻⁰¹
	Elastic	3.12×10 ⁻⁰⁴	3.01×10 ⁻⁰⁴	1.11×10 ⁻⁰⁵	2.54×10 ⁻⁰⁴	7.14×10 ⁻⁰⁵	2.13×10 ⁻⁰⁴	3.60×10 ⁻⁰⁵	-1.79×10 ⁻⁰⁵	1.50×10 ⁻⁰⁷	1.27×10 ⁻⁰⁴
	Inelastic	2.32×10 ⁻⁰⁴	2.39×10 ⁻⁰⁴	2.35×10 ⁻⁰⁶	2.42×10 ⁻⁰⁴	2.07×10 ⁻⁰⁵	2.27×10 ⁻⁰⁴	8.00×10 ⁻⁰⁶	1.24×10 ⁻⁰⁴	2.38×10 ⁻⁰⁷	-
	(n,xn)	1.70×10 ⁻⁰⁵	1.78×10 ⁻⁰⁵	2.14×10 ⁻⁰⁷	1.77×10 ⁻⁰⁵	1.70×10 ⁻⁰⁶	-	-	1.69×10 ⁻⁰⁵	1.13×10 ⁻⁰⁷	-
	Fission	3.70×10 ⁻⁰¹	3.72×10 ⁻⁰¹	7.35×10 ⁻⁰⁴	3.65×10 ⁻⁰¹	4.65×10 ⁻⁰³	3.65×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	3.56×10 ⁻⁰¹	4.20×10 ⁻⁰⁴	3.66×10 ⁻⁰¹
nu	9.49×10 ⁻⁰¹	9.49×10 ⁻⁰¹	1.73×10 ⁻⁰³	9.49×10 ⁻⁰¹	8.67×10 ⁻⁰³	9.50×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	9.48×10 ⁻⁰¹	1.12×10 ⁻⁰³	9.50×10 ⁻⁰¹	
²³⁸ U	Total	-2.07×10 ⁻⁰¹	-1.96×10 ⁻⁰¹	8.57×10 ⁻⁰⁴	-2.01×10 ⁻⁰¹	3.39×10 ⁻⁰³	-2.02×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	-2.39×10 ⁻⁰¹	3.34×10 ⁻⁰⁴	-2.62×10 ⁻⁰¹
	Capture	-2.80×10 ⁻⁰¹	-2.75×10 ⁻⁰¹	5.69×10 ⁻⁰⁴	-2.78×10 ⁻⁰¹	3.11×10 ⁻⁰³	-2.79×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	-2.88×10 ⁻⁰¹	4.03×10 ⁻⁰⁴	-3.02×10 ⁻⁰¹
	Elastic	2.18×10 ⁻⁰²	2.85×10 ⁻⁰²	6.49×10 ⁻⁰⁴	2.65×10 ⁻⁰²	2.98×10 ⁻⁰³	2.69×10 ⁻⁰²	2.00×10 ⁻⁰⁴	6.46×10 ⁻⁰³	5.20×10 ⁻⁰⁵	6.49×10 ⁻⁰³
	Inelastic	1.54×10 ⁻⁰²	1.50×10 ⁻⁰²	1.50×10 ⁻⁰⁴	1.53×10 ⁻⁰²	7.71×10 ⁻⁰⁴	1.47×10 ⁻⁰²	1.00×10 ⁻⁰⁴	7.79×10 ⁻⁰³	1.52×10 ⁻⁰⁵	-
	(n,xn)	1.03×10 ⁻⁰³	1.07×10 ⁻⁰³	1.65×10 ⁻⁰⁵	1.01×10 ⁻⁰³	1.31×10 ⁻⁰⁴	-	-	1.04×10 ⁻⁰³	9.18×10 ⁻⁰⁶	-
	Fission	3.44×10 ⁻⁰²	3.46×10 ⁻⁰²	9.51×10 ⁻⁰⁵	3.43×10 ⁻⁰²	8.59×10 ⁻⁰⁴	3.40×10 ⁻⁰²	1.00×10 ⁻⁰⁴	3.39×10 ⁻⁰²	6.60×10 ⁻⁰⁵	3.34×10 ⁻⁰²
nu	5.06×10 ⁻⁰²	5.09×10 ⁻⁰²	1.32×10 ⁻⁰⁴	5.05×10 ⁻⁰²	1.09×10 ⁻⁰³	5.02×10 ⁻⁰²	1.00×10 ⁻⁰⁴	5.15×10 ⁻⁰²	9.96×10 ⁻⁰⁵	5.03×10 ⁻⁰²	
H	Total	2.54×10 ⁻⁰¹	2.43×10 ⁻⁰¹	5.95×10 ⁻⁰³	2.39×10 ⁻⁰¹	1.85×10 ⁻⁰²	2.41×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	1.98×10 ⁻⁰¹	4.93×10 ⁻⁰⁴	2.06×10 ⁻⁰¹
	Capture	-9.98×10 ⁻⁰²	-9.95×10 ⁻⁰²	1.82×10 ⁻⁰⁴	-1.02×10 ⁻⁰¹	7.54×10 ⁻⁰⁴	-1.02×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	-1.03×10 ⁻⁰¹	1.23×10 ⁻⁰⁴	-1.01×10 ⁻⁰¹
	Elastic	3.53×10 ⁻⁰¹	3.43×10 ⁻⁰¹	5.98×10 ⁻⁰³	3.40×10 ⁻⁰¹	1.87×10 ⁻⁰²	3.43×10 ⁻⁰¹	1.00×10 ⁻⁰³	3.01×10 ⁻⁰¹	5.61×10 ⁻⁰⁴	3.08×10 ⁻⁰¹
C	Total	2.99×10 ⁻⁰²	2.95×10 ⁻⁰²	6.90×10 ⁻⁰⁴	2.77×10 ⁻⁰²	3.90×10 ⁻⁰³	2.78×10 ⁻⁰²	2.00×10 ⁻⁰⁴	1.70×10 ⁻⁰³	2.52×10 ⁻⁰⁵	3.73×10 ⁻⁰³
	Capture	-6.51×10 ⁻⁰⁴	-6.47×10 ⁻⁰⁴	3.04×10 ⁻⁰⁶	-6.63×10 ⁻⁰⁴	1.55×10 ⁻⁰⁵	-6.63×10 ⁻⁰⁴	1.00×10 ⁻⁰⁶	-6.93×10 ⁻⁰⁴	2.41×10 ⁻⁰⁶	-6.61×10 ⁻⁰⁴
	Elastic	3.03×10 ⁻⁰²	2.99×10 ⁻⁰²	6.90×10 ⁻⁰⁴	2.81×10 ⁻⁰²	3.88×10 ⁻⁰³	2.82×10 ⁻⁰²	2.00×10 ⁻⁰⁴	2.25×10 ⁻⁰³	2.48×10 ⁻⁰⁵	4.39×10 ⁻⁰³
	Inelastic	2.81×10 ⁻⁰⁴	2.78×10 ⁻⁰⁴	9.29×10 ⁻⁰⁶	2.81×10 ⁻⁰⁴	4.75×10 ⁻⁰⁵	2.89×10 ⁻⁰⁴	1.00×10 ⁻⁰⁵	9.17×10 ⁻⁰⁷	4.75×10 ⁻⁰⁵	-
¹⁹ F	Total	4.72×10 ⁻⁰²	4.66×10 ⁻⁰²	1.06×10 ⁻⁰³	4.41×10 ⁻⁰²	4.91×10 ⁻⁰³	4.32×10 ⁻⁰²	2.00×10 ⁻⁰⁴	7.91×10 ⁻⁰⁴	2.80×10 ⁻⁰⁵	4.39×10 ⁻⁰³
	Capture	-5.25×10 ⁻⁰³	-5.26×10 ⁻⁰³	1.72×10 ⁻⁰⁵	-5.31×10 ⁻⁰³	7.39×10 ⁻⁰⁵	-5.33×10 ⁻⁰³	1.00×10 ⁻⁰⁵	-5.72×10 ⁻⁰³	2.18×10 ⁻⁰⁵	-5.67×10 ⁻⁰³
	Elastic	3.58×10 ⁻⁰²	3.53×10 ⁻⁰²	9.34×10 ⁻⁰⁴	3.27×10 ⁻⁰²	3.83×10 ⁻⁰³	3.21×10 ⁻⁰²	2.00×10 ⁻⁰⁴	5.67×10 ⁻⁰⁵	2.51×10 ⁻⁰⁵	1.01×10 ⁻⁰²
	Inelastic	1.67×10 ⁻⁰²	1.66×10 ⁻⁰²	2.64×10 ⁻⁰⁴	1.66×10 ⁻⁰²	1.30×10 ⁻⁰³	1.63×10 ⁻⁰²	1.00×10 ⁻⁰⁴	6.45×10 ⁻⁰³	1.19×10 ⁻⁰⁵	-
	(n,xn)	2.36×10 ⁻⁰⁶	2.54×10 ⁻⁰⁶	3.54×10 ⁻⁰⁷	1.86×10 ⁻⁰⁶	1.58×10 ⁻⁰⁶	-	-	2.09×10 ⁻⁰⁶	1.53×10 ⁻⁰⁷	-

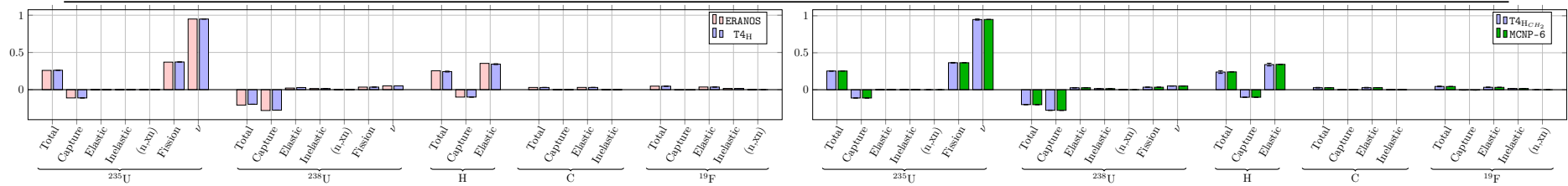
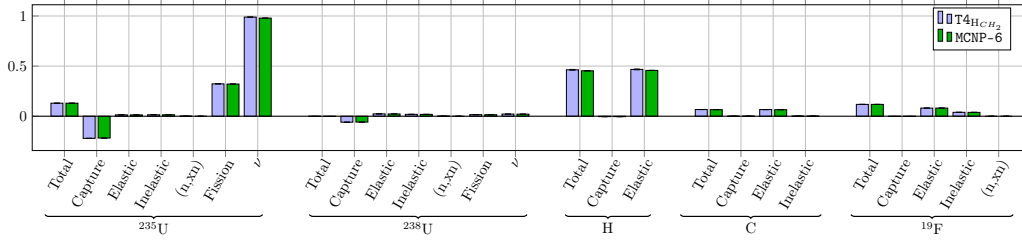


TABLEAU IV.8 – Sensibilités intégrées pour la boule enrichie à 50 %.

Isotopes	Réaction	ERANOS _H	T _{4H} ②		T _{4HCH₂} ③		MCNP _{HCH₂} ④	
		MG ①	$S_{i,r}$	σ	$S_{i,r}$	σ	$S_{i,r}$	σ
²³⁵ U	Total	1.28×10^{-01}	1.30×10^{-01}	9.53×10^{-04}	1.29×10^{-01}	9.67×10^{-04}	1.30×10^{-01}	1.00×10^{-03}
	Capture	-2.19×10^{-01}	-2.18×10^{-01}	3.84×10^{-04}	-2.18×10^{-01}	4.10×10^{-04}	-2.18×10^{-01}	1.00×10^{-03}
	Elastic	1.32×10^{-02}	1.34×10^{-02}	2.15×10^{-04}	1.33×10^{-02}	2.15×10^{-04}	1.31×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	Inelastic	1.39×10^{-02}	1.41×10^{-02}	6.22×10^{-05}	1.41×10^{-02}	6.21×10^{-05}	1.42×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	(n,xn)	4.76×10^{-04}	4.89×10^{-04}	5.46×10^{-06}	4.89×10^{-04}	5.38×10^{-06}	-	-
	Fission	3.20×10^{-01}	3.20×10^{-01}	9.69×10^{-04}	3.20×10^{-01}	1.01×10^{-03}	3.21×10^{-01}	1.00×10^{-03}
	nu	9.79×10^{-01}	9.79×10^{-01}	1.71×10^{-03}	9.79×10^{-01}	1.81×10^{-03}	9.79×10^{-01}	1.00×10^{-03}
²³⁸ U	Total	-5.14×10^{-03}	-1.03×10^{-03}	4.52×10^{-04}	-1.52×10^{-03}	4.61×10^{-04}	-2.18×10^{-03}	1.00×10^{-04}
	Capture	-6.06×10^{-02}	-5.87×10^{-02}	1.73×10^{-04}	-5.90×10^{-02}	1.97×10^{-04}	-5.87×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	Elastic	2.02×10^{-02}	2.33×10^{-02}	3.83×10^{-04}	2.31×10^{-02}	3.74×10^{-04}	2.26×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	Inelastic	1.92×10^{-02}	1.84×10^{-02}	8.19×10^{-05}	1.85×10^{-02}	8.71×10^{-05}	1.84×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	(n,xn)	6.02×10^{-04}	6.39×10^{-04}	9.70×10^{-06}	6.27×10^{-04}	1.00×10^{-05}	-	-
	Fission	1.55×10^{-02}	1.53×10^{-02}	4.43×10^{-05}	1.53×10^{-02}	4.80×10^{-05}	1.50×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	nu	2.11×10^{-02}	2.11×10^{-02}	5.50×10^{-05}	2.11×10^{-02}	6.01×10^{-05}	2.07×10^{-02}	1.00×10^{-04}
H	Total	4.61×10^{-01}	4.54×10^{-01}	3.78×10^{-03}	4.58×10^{-01}	3.74×10^{-03}	4.53×10^{-01}	1.00×10^{-03}
	Capture	-4.11×10^{-03}	-4.10×10^{-03}	8.05×10^{-06}	-4.17×10^{-03}	7.96×10^{-06}	-4.16×10^{-03}	1.00×10^{-05}
	Elastic	4.65×10^{-01}	4.58×10^{-01}	3.78×10^{-03}	4.63×10^{-01}	3.74×10^{-03}	4.57×10^{-01}	1.00×10^{-03}
C	Total	6.69×10^{-02}	6.62×10^{-02}	6.18×10^{-04}	6.60×10^{-02}	5.95×10^{-04}	6.56×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	Capture	-1.09×10^{-04}	-1.12×10^{-04}	1.90×10^{-06}	-1.09×10^{-04}	1.75×10^{-06}	-1.12×10^{-04}	1.00×10^{-06}
	Elastic	6.64×10^{-02}	6.57×10^{-02}	6.17×10^{-04}	6.55×10^{-02}	5.94×10^{-04}	6.51×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	Inelastic	5.87×10^{-04}	5.81×10^{-04}	9.95×10^{-06}	5.78×10^{-04}	9.32×10^{-06}	5.71×10^{-04}	2.00×10^{-06}
¹⁹ F	Total	1.20×10^{-01}	1.19×10^{-01}	1.07×10^{-03}	1.17×10^{-01}	1.05×10^{-03}	1.18×10^{-01}	1.00×10^{-03}
	Capture	-2.11×10^{-03}	-2.14×10^{-03}	9.84×10^{-06}	-2.14×10^{-03}	1.10×10^{-05}	-2.15×10^{-03}	1.00×10^{-05}
	Elastic	8.24×10^{-02}	8.23×10^{-02}	9.60×10^{-04}	8.03×10^{-02}	9.38×10^{-04}	8.12×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	Inelastic	3.95×10^{-02}	3.85×10^{-02}	2.68×10^{-04}	3.85×10^{-02}	2.37×10^{-04}	3.84×10^{-02}	1.00×10^{-04}
	(n,xn)	2.68×10^{-06}	2.18×10^{-06}	2.49×10^{-07}	2.97×10^{-06}	3.48×10^{-07}	-	-



En ce qui concerne la capture, les résultats déterministes et Monte Carlo semblent en très bon accord, excepté peut être au niveau des grandes et étroites résonances de l'²³⁸U qui influencent le profil chaotique des sensibilités. Notons que notre représentation présente l'effet en valeur absolue pour aider à la comparaison avec ces résonances. Bien que similaires, les deux courbes (2 % et 50 %) présentent des différences dans leur partie thermique imputées à la forte différence d'enrichissement qui induit inéluctablement une différence des spectres directs (*cf.* Figs. IV.3). Un détail pouvant prêter à confusion est observé au centre de la première résonance de l'²³⁸U (6.67 eV) : la sensibilité qui semble croître et « mimer » la forme de la résonance chute brutalement en son centre. En effet, à ce moment, c'est la forme du flux adjoint (*cf.* Figs. IV.4) qui influe le plus l'expression de la sensibilité à la capture,

$$\Delta\rho_c = -\Phi^\dagger(\epsilon)\Delta\Sigma_c(\epsilon)\Phi(\epsilon) \quad (\text{IV.8})$$

et provoque cette dégringolade : les neutrons n'ont plus aucune importance au milieu de la résonance.

Pour la diffusion élastique, le profil est différent. Une alternance de pics étroits positifs et négatifs est visible, similaire pour les deux enrichissements. Pour comprendre cet effet, il suffit de décomposer l'effet de diffusion en une composante d'absorption et une composante d'émission,

$$\delta\rho_s = \underbrace{[\Phi^\dagger(\epsilon')]_{\text{Émission}}}_{\text{Émission}} - \underbrace{[\Phi^\dagger(\epsilon)]_{\text{Absorption}}}_{\text{Absorption}} \Delta\Sigma_s(\epsilon \rightarrow \epsilon')\Phi(\epsilon) \quad (\text{IV.9})$$

La première est liée à l'importance du neutron incident tandis que la seconde est liée à l'importance du neutron diffusé. En rentrant dans la résonance (c'est-à-dire dans le sens du ralentissement) l'importance

du neutron incident est plus grande que celle du neutron diffusé par ^{238}U , l'effet est inversé lorsque le neutron sort de la résonance et que l'importance du neutron qui lui échappe est plus grande que l'importance du neutron diffusant. C'est au niveau de ces pics de sensibilités, que les petites différences apparaissent et finissent par s'accumuler tout au long du profil conduisant, *in fine*, aux différences aperçues précédemment sur les sensibilités intégrées.

Afin de trouver l'origine physique de ces différences – et de confirmer la validation de nos développements – nous avons tracé les flux directs et adjoints des deux configurations (Figs. IV.3 et IV.4) calculés par ERANOS et TRIPOLI-4[®]. Les flux directs sont semblables et la solution en provenance d'ERANOS est contenue dans les incertitudes statistiques. Le flux adjoint TRIPOLI-4[®], calculé via la méthode AIWS (cf. Sec. II.B) est, lui aussi, en accord avec le flux adjoint issu d'ERANOS. Plusieurs hypothèses peuvent alors être formulées quant à l'origine des différences observées sur les profils de capture et de diffusion :

- Le bon accord obtenu sur les flux directs et adjoints « moyens par groupe » n'implique pas nécessairement que les produits de type $\Phi^\dagger(\epsilon)A(\epsilon)\Phi(\epsilon)$ soient corrects sur le groupe. Sur une résonance étroite grossièrement maillée en énergie, c'est même peu probable puisque taux de réaction $A\Phi$ et flux adjoints Φ^\dagger présentent respectivement une forme concave et convexe.
- Une autre hypothèse, qui ne concerne que la sensibilité à la diffusion, suppose que les transferts (*i.e.* la fonction f de la formule (IV.5)) sont mal calculés. Plusieurs raisons peuvent être évoquées :
 - f n'est pas autoprotégée dans le codes déterministe, ce qui pourrait induire des différences aux énergies des résonances.
 - f ne peut être fidèlement représentée sur un maillage multigroupe très fin. En effet, dans les codes déterministes, les sections doublement différentielles sont projetées sur une matrice carrée en fonction des groupes d'énergies incidentes et sortantes, et cela pour chaque degré d'anisotropie P_n . Or, lorsqu'on utilise un maillage très fin, la corrélation entre l'angle de déviation et les énergies incidente et sortante sera mal reproduite par une projection sur base de polynômes de Legendre : ceux-ci ne peuvent pas approcher un Dirac avec un développement d'ordre limité. Mais en ce qui concerne la diffusion élastique de ^{238}U et le maillage 1968G, nous sommes amenés à rejeter physiquement ce phénomène puisque la largeur en léthargie des groupes correspond au gain de léthargie moyen d'une diffusion.
 - Une dernière hypothèse provient de la négligence implicite de certains termes dans l'expression multigroupe des effets de diffusion. En effet, pour une résonance contenue entièrement dans un groupe, les transferts internes ne sont pas évalués puisque les flux adjoints aux énergies incidente et sortante sont identiques. Afin de s'assurer de l'effet possible d'une telle hypothèse, nous avons modifié le post-traitement opéré à la suite du calcul TRIPOLI-4[®] de manière à annihiler les transferts intrinsèques à un même groupe (*i.e.* du groupe dans le groupe) pour un maillage 1968 groupes (cf. Fig. IV.5). On remarque que ce profil « corrigé » est plus proche du profil déterministe que ne l'était le profil exact TRIPOLI-4[®]. Cette approximation tient donc un rôle dans le calcul des sensibilités à la section de diffusion de ^{238}U .

Dans notre article [3], nous poursuivons la discussion en présentant également des résultats de calculs ERANOS utilisant des maillages énergétiques plus « classiques » à 172 ou 33 groupes. Il est cependant toujours étonnant de voir qu'un code multigroupe utilisant un maillage pourtant très fin ne permette pas de reproduire dans les moindres détails un calcul de référence Monte Carlo.

Ces développements pourront être utilisés à l'avenir pour améliorer les schémas de calculs déterministes, par une analyse fine des écarts observés.

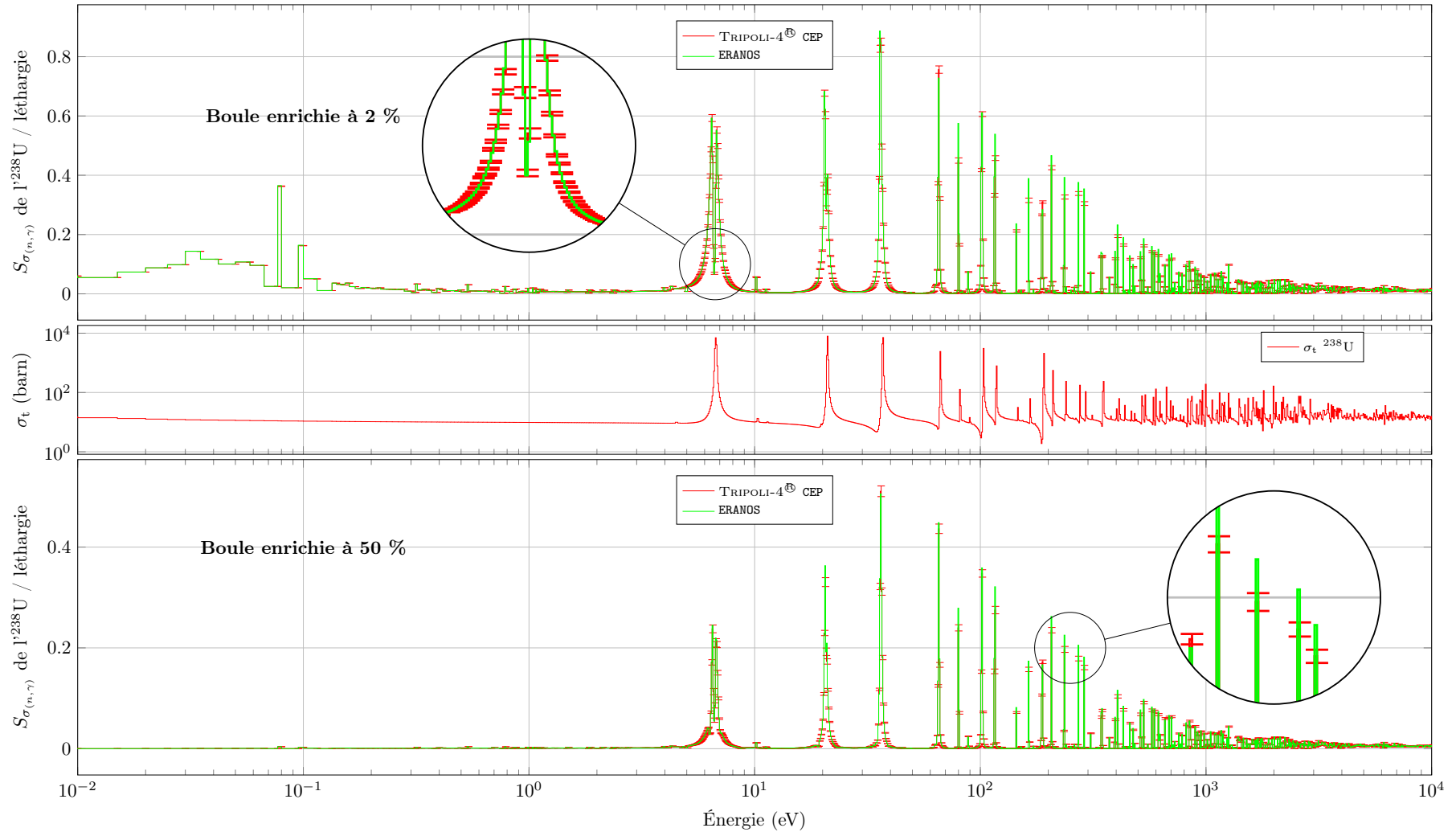


FIGURE IV.1 – UACSA Benchmark Phase III.3, Profils de Sensibilité du k_{eff} à la section de capture de $l^{238}\text{U}$. Haut : Enrichissement 2 %. Bas : Enrichissement 50 %. Attention, nous avons représenté la valeur absolue de l'effet de capture qui est par nature toujours négatif. Ces profils sont à mettre en parallèle avec le profil de la section de $l^{238}\text{U}$ ainsi que les profils des flux direct et adjoint.

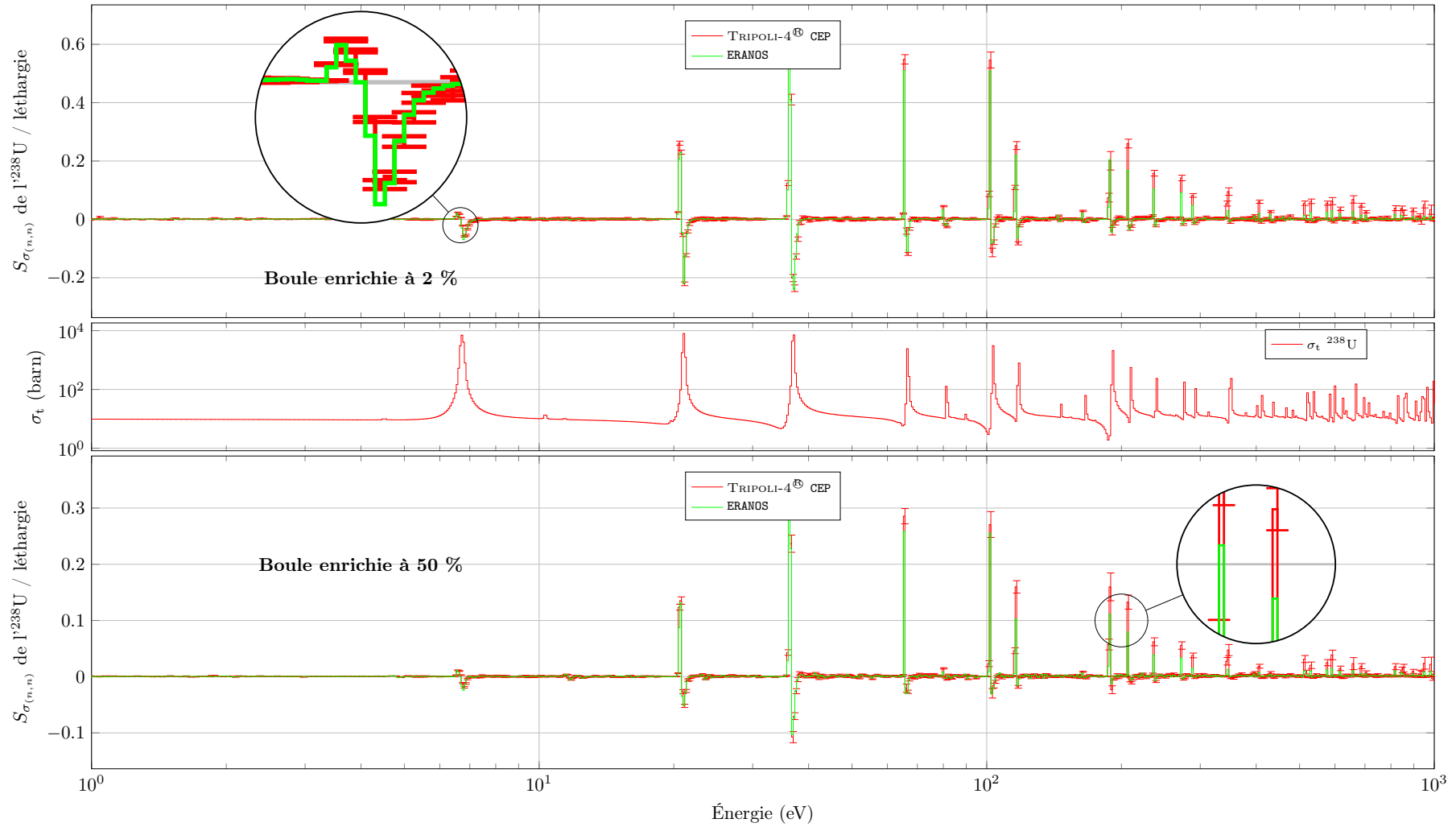


FIGURE IV.2 – UACSA Benchmark Phase III.3, Profils de Sensibilité du k_{eff} à la section de diffusion élastique de ^{238}U . Haut : Enrichissement 2 %. Bas : Enrichissement 50 %. Ces profils sont à mettre en parallèle avec le profil de la section de ^{238}U ainsi que les profils des flux direct et adjoint.

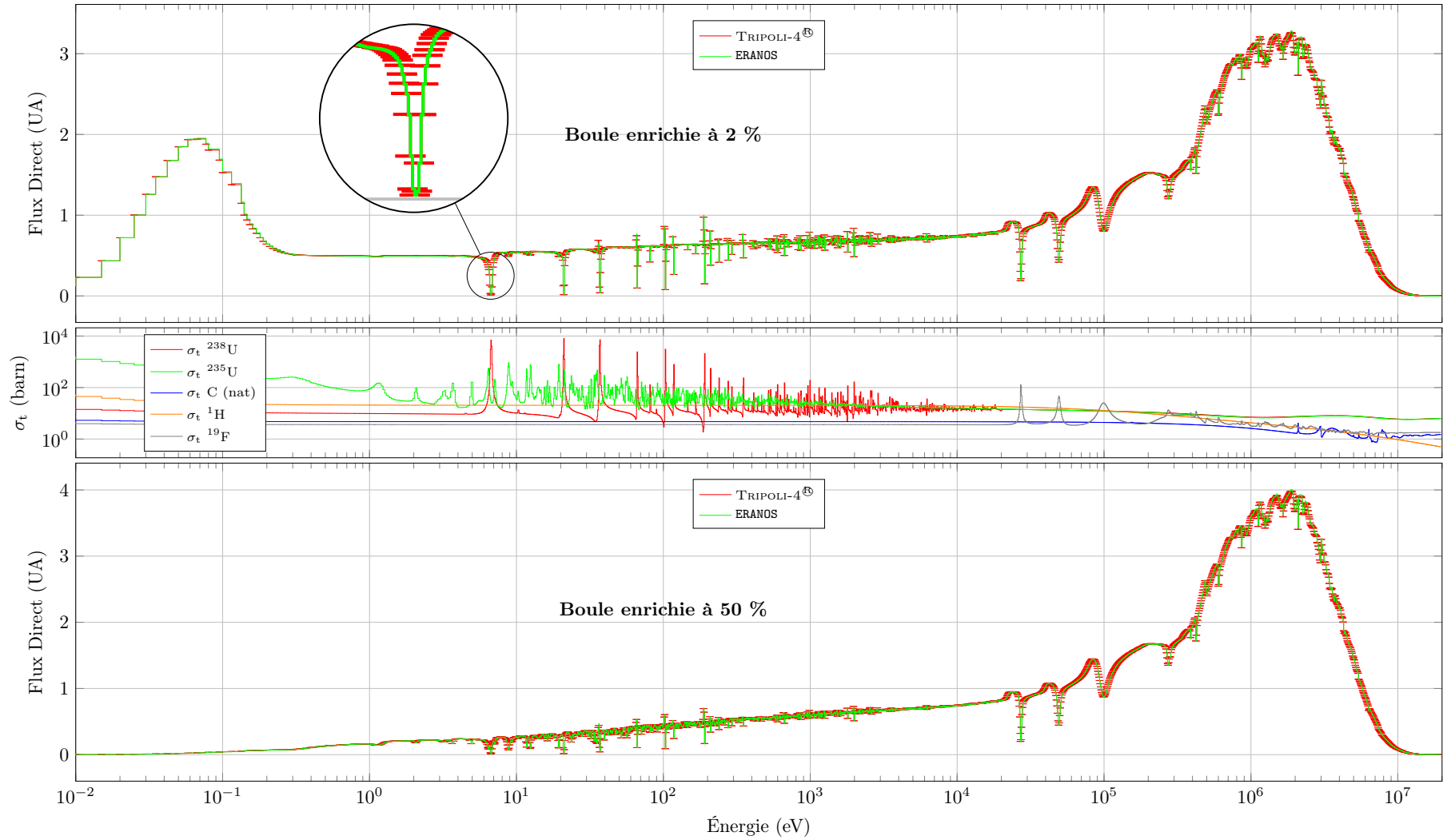


FIGURE IV.3 – UACSA Benchmark Phase III.3, Flux directs. Haut : Enrichissement 2 %. Bas : Enrichissement 50 %. Par curiosité scientifique, les différentes sections microscopiques totales des isotopes présents dans les boules ont été tracées de manière à pouvoir relier chaque relief du flux à la section d'un isotope.

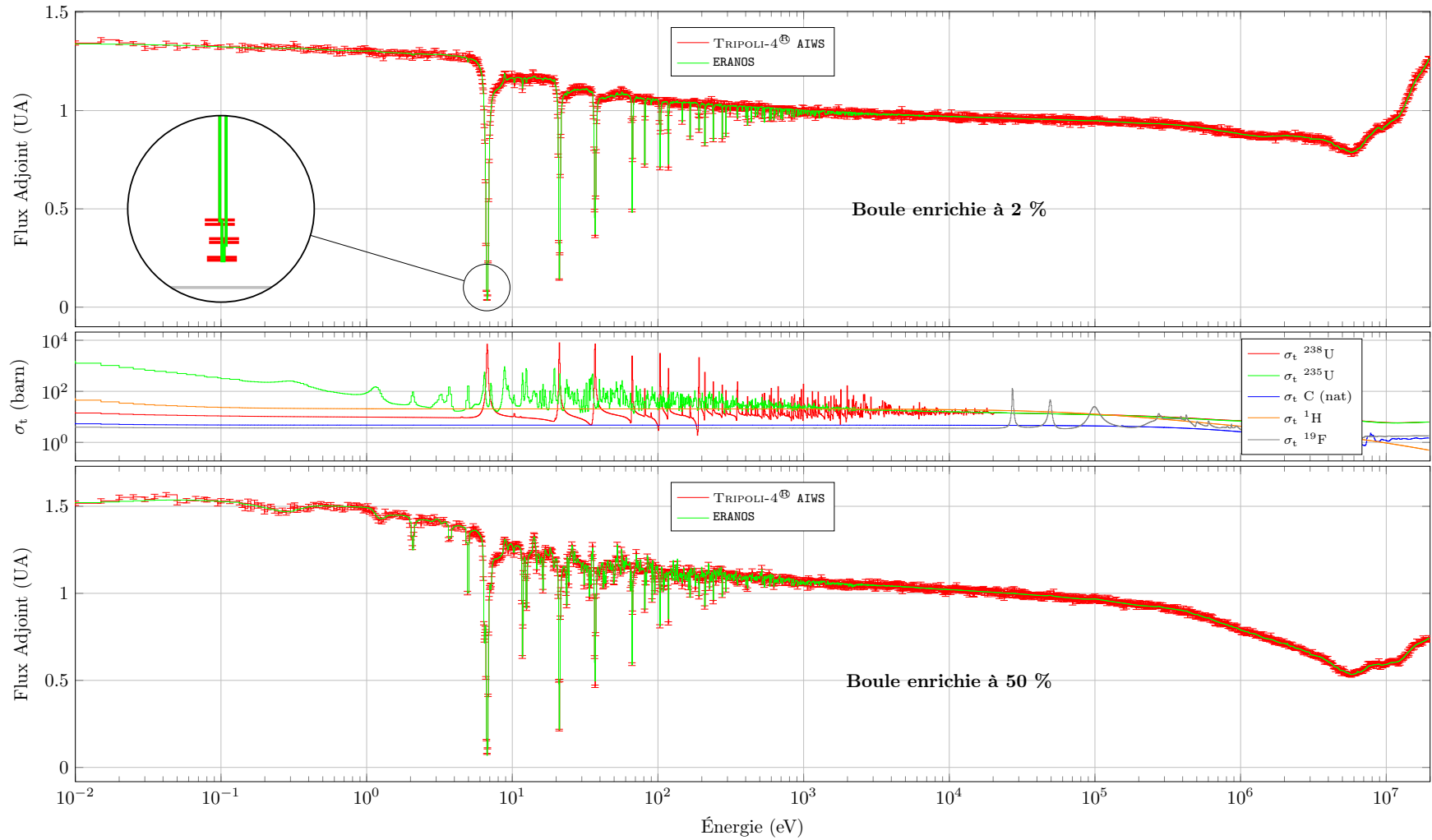


FIGURE IV.4 – UACSA Benchmark Phase III.3, Flux adjoints. Haut : Enrichissement 2 %. Bas : Enrichissement 50 %. Par curiosité scientifique, les différentes sections microscopiques totales des isotopes présents dans les boules ont été tracées de manière à pouvoir relier chaque relief du flux à la section d'un isotope. On remarque que le profil de la boule enrichie à 50 % présente des structures liées aux résonances de ^{235}U qui ne sont pas visibles sur le profil de la boule enrichie à 2 %.

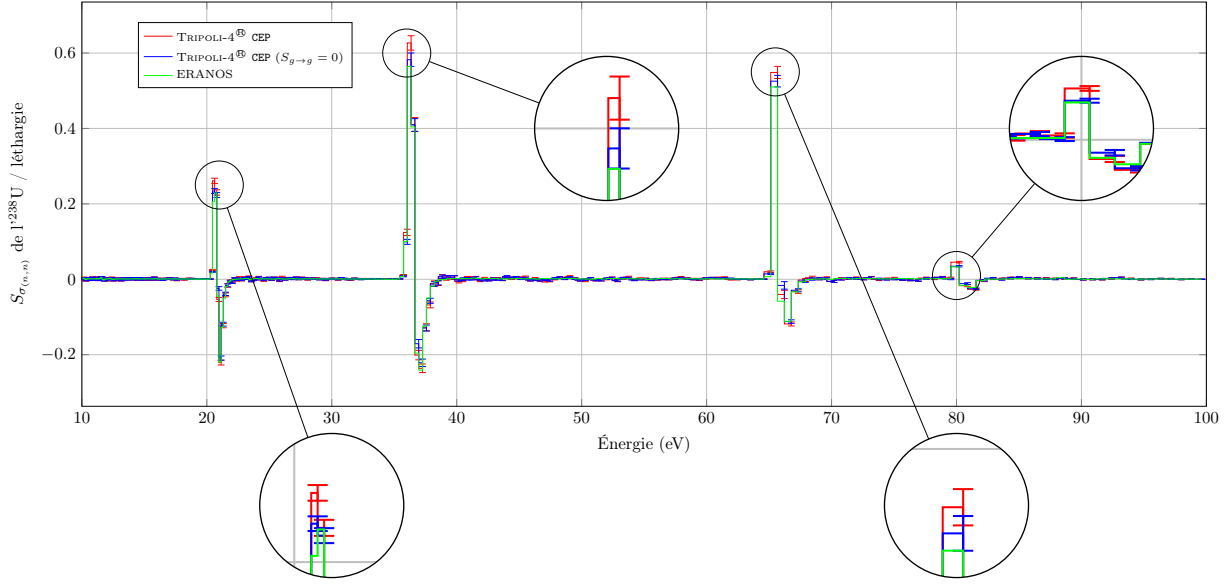


FIGURE IV.5 – UACSA Benchmark Phase III.3, Profils de Sensibilité du k_{eff} à la section de diffusion élastique de $l^{238}\text{U}$. Transferts internes au groupe négligé ou non. Enrichissement 2 %.

IV.B.3 Capacités de Post-Traitement

La méthode des perturbations/sensibilités développée nécessite un espace de stockage conséquent dans le cas où l'analyse des données après calculs est requise (aux alentours de 100 Go par simulation pour une simulation complète et précise). Si, sur une station de travail classique les études se trouvent vite limitées par la capacité des disques durs, elles le sont beaucoup moins sur les clusters de calcul de type CURIE du TGCC, qui offrent une capacité supérieure à 20 To par utilisateur. Le stockage de ces données permet au code de disposer d'une palette complète de post-traitement indispensable à l'étude détaillée des sections efficaces.

IV.B.3.i Sensibilités en Fonction de l'Énergie Incidente et Sortante

Outre l'obtention des profils de sensibilités sur différents maillages énergétiques et spatiaux, ou la décomposition des effets d'absorption et d'émission, il est possible d'analyser en détail les sensibilités des sections de diffusion doublement différentielles,

$$S_{k_{\text{eff}}/\sigma_{i,r}} \left[(E, \hat{\Omega}) \rightarrow (E', \hat{\Omega}') \right] = k_{\text{eff}} \frac{\langle \Phi^\dagger(E', \hat{\Omega}'), \left[f_{i,r}(E, \hat{\Omega}) \rightarrow (E', \hat{\Omega}') - \delta_{(E, \hat{\Omega})}(E', \hat{\Omega}') \right] \sigma_{i,r}^{\text{ref}}(E, \hat{\Omega}) \Phi(E, \hat{\Omega}) \rangle}{\langle \Phi^\dagger(E', \hat{\Omega}'), \mathcal{P}_{(E, \hat{\Omega}) \rightarrow (E', \hat{\Omega}')} \Phi(E, \hat{\Omega}) \rangle} \quad (\text{IV.10})$$

avec $x \rightarrow \delta_y(x)$ la fonction de Dirac dont l'intégrale sur un intervalle quelconque contenant y vaut 1. La figure IV.6 présente les sensibilités obtenues à la section doublement-différentielle inélastique de $l^{238}\text{U}$ dans la couverture d'uranium du benchmark à spectre rapide *Flattop* [2], après intégration sur les différents angles de déviation possibles. Le niveau de détail obtenu permet une distinction très nette de la corrélation entre énergie incidente et sortante révélant ainsi les différents niveaux de la section inélastique et de son continuum³. Des études distinctes de la sensibilité aux différents niveaux

³En effet, pour les réactions élastique et inélastique, il existe une corrélation moyenne entre les énergies incidente et sortante. Cette corrélation provient du principe de conservation de l'énergie : pour la section élastique, toute l'énergie du neutron incident est répartie entre le neutron et la cible ; pour les sections inélastiques, une quantité discrète d'énergie est communiquée à la cible où chaque quantité discrète d'énergie identifiée correspond un niveau inélastique, que l'on peut distinguer sur la figure IV.6. Lorsque ces niveaux ne sont pas bien identifiés ou qu'ils se recouvrent presque, la réaction inélastique est décrite par un continuum.

pourraient même être envisagées, ouvrant la voie à un retour sur les données nucléaires plus précis. Peu de codes sont actuellement capables de produire ce genre de matrice, qu'ils soient déterministes ou Monte Carlo.

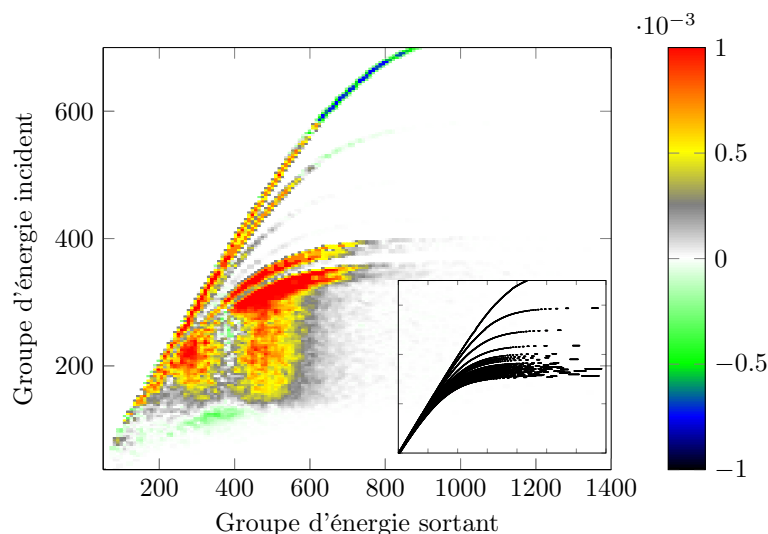


FIGURE IV.6 – Matrice de sensibilités à la section inélastique de l' ^{238}U en fonction du groupe d'énergie incident (avant collision) et sortant (après collision), sur maillage 1968G. La sous-figure représente les différents niveaux « théoriques » (calculés pour un maillage 1968G) en fonction de l'énergie incidente et sortante.

Toujours dans la boule critique *Flattop*, la figure IV.7 donne une image à deux dimensions de la sensibilité à la fission. On y observe que la fission de l' ^{238}U est induite par des neutrons de plus hautes énergies que la fission de l' ^{235}U . La fission de l' ^{235}U n'a pas lieu à basse énergie dans ce benchmark à spectre rapide dur.

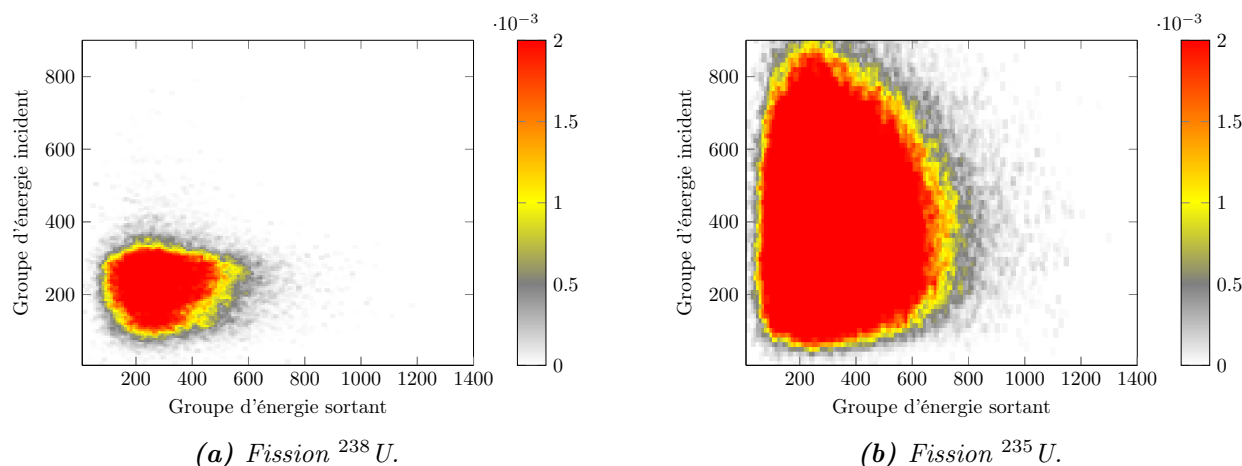


FIGURE IV.7 – Sensibilités aux sections de fission ^{238}U et ^{235}U en fonction du groupe d'énergie incident (avant collision) et sortant (après collision), sur maillage 1968G.

IV.B.3.ii Sensibilités en Fonction de l'Énergie Incidente et de l'Angle de Déviation μ

Enfin, la figure IV.8, présente la sensibilité à la section doublement-différentielle élastique de l'hydrogène dans la matrice eau obtenue dans le cas du benchmark PST-01-01 étudié précédemment. L'eau légère, et en particulier l'hydrogène dont elle est formée, est l'élément essentiel du ralentissement des neutrons

dans la majorité des réacteurs actuels. Sur le profil de sensibilité, figure IV.8, on observe deux domaines :

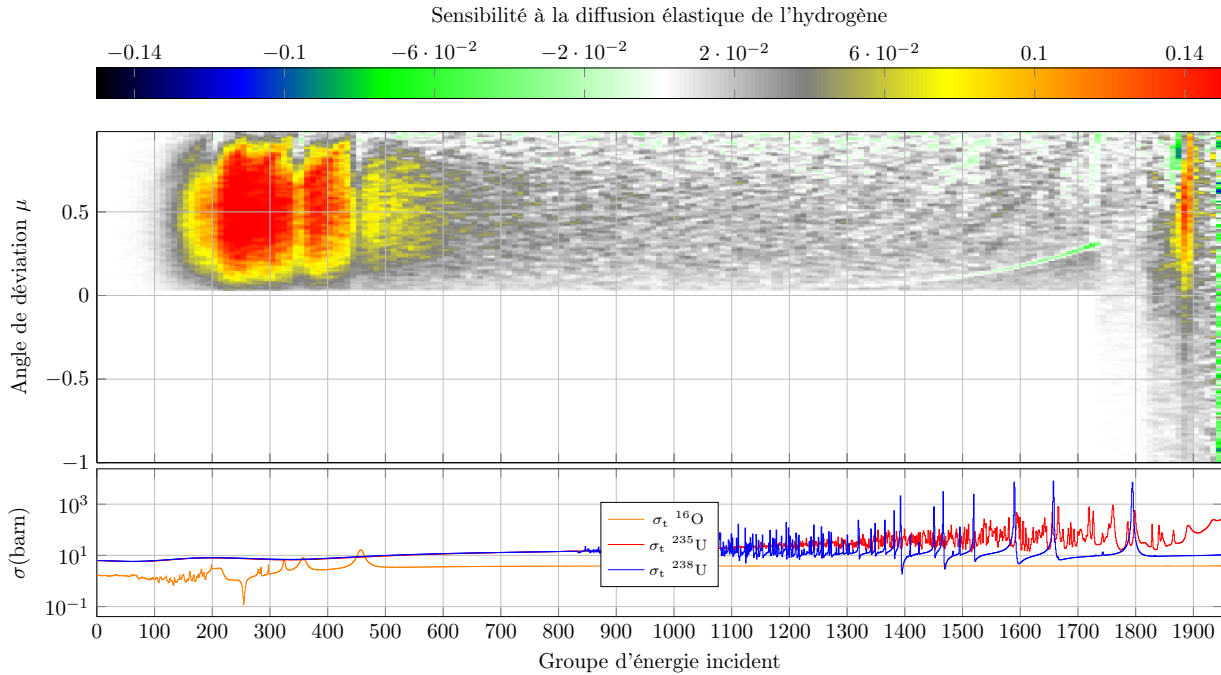


FIGURE IV.8 – Sensibilité à la section doublement-différentielle élastique de l' H_2O en fonction du groupe d'énergie incident (avant collision) et l'angle μ de déviation dans le référentiel du laboratoire, sur maillage 1968G.

- Pour les énergies incidentes $E > 50$ eV (*i.e.* groupe inférieur à 1720), le profil tracé en fonction de E et du cosinus de l'angle de déviation $\mu \in [-1; 1]$ dans le référentiel du laboratoire présente une forte sensibilité positive dans le domaine des hautes énergies. Il s'agit des neutrons issus de la fission qui naissent aux alentours de 2 MeV et qui subissent leur première collision sur l'hydrogène (*i.e.* les neutrons quittent une zone en énergie de faible importance, et sont ralentis par l'eau dans la zone d'énergie thermique, plus favorable à la fission). Certaines structures de ce profil dans le domaine des hautes énergies sont à relier aux résonances de l'oxygène dont la section totale est aussi représentée.

Remarquons également que seuls des μ positifs sont tirés avant $E > 50$ eV ; en effet, l'égalité de masse entre le neutron et l'hydrogène impose un μ positif dans le référentiel du laboratoire : en d'autres termes, tout neutron rapide entrant en collision avec l'hydrogène ne peut être diffusé que vers l'avant, tout comme une boule de billard percutant une autre boule ne peut revenir en arrière.

- Pour les énergies incidentes $E < 50$ eV (*i.e.* groupe supérieur à 1720), petit à petit, la sensibilité s'« ouvre » aux μ négatifs : l'agitation du milieu est susceptible de communiquer de l'énergie au neutron lors d'une collision. Il est même possible de voir les différences avec un autre sous-domaine, en dessous de $E < 5$ eV, où la communication d'énergie des noyaux d'hydrogène aux neutrons semble différente. Ces limites correspondent aux limites d'enclenchement dans le code TRIPOLI-4[®] des différents traitements de la thermalisation : en dessous de $E < 50$ eV, on utilise le modèle du gaz libre et en dessous de $E < 5$ eV, le ralentissement est formalisé par les sections $S(\alpha, \beta)$.

Pour interpréter ce dernier domaine des basses énergies, il est aussi plus adéquat de tracer le

profil en fonction des coefficients α et β ,

$$\alpha = \frac{E + E' - 2\mu\sqrt{EE'}}{Ak_bT} \quad (\text{IV.11})$$

$$\beta = \frac{E' - E}{k_bT} \quad (\text{IV.12})$$

en fonction desquels s'expriment la section efficace de l'hydrogène $S(\alpha, \beta)$. E et E' correspondent respectivement aux énergies incidente et après diffusion, k_B est la constante de Boltzmann, T est la température (ici $T = 300$ K) et A est la masse de l'isotope (pour l'hydrogène $A = 1$). La figure IV.9 donne un aperçu d'une telle sensibilité projetée sur une grille d' α et β (et tracée en fonction des mailles de cette grille). Ce type d'analyse permet alors une propagation rigoureuse des incertitudes des sections $S(\alpha, \beta)$ au calcul du k_{eff} .

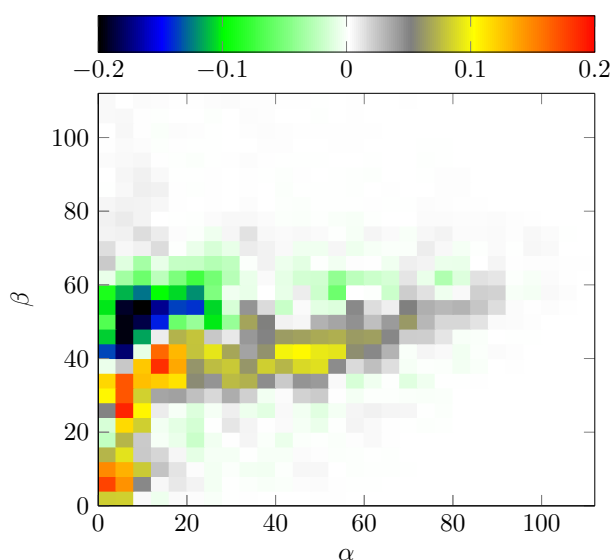


FIGURE IV.9 – Sensibilités aux $S(\alpha, \beta)$ de l'hydrogène dans l'eau sur le cas PST-01-01.

IV.C Vers l'Évaluation des Incertitudes

Une fois les sensibilités (ou les perturbations) calculées, il est possible d'évaluer les incertitudes des paramètres de sortie (dans cette thèse, nous nous sommes limités au k_{eff}) imputées aux différents paramètres d'entrée d'un calcul neutronique par produit matriciel de ces mêmes sensibilités avec les variances/covariances des paramètres d'entrée.

L'alternative à ces méthodes de propagations d'incertitude « au premier ordre » consiste à réaliser un calcul dit *Total Monte Carlo* (TMC) [8] où les paramètres finaux sont calculés grâce à différentes valeurs des paramètres d'entrée (principalement les données nucléaires, mais aussi par exemple les dimensions de la géométrie) échantillonnés selon leurs lois de distributions associées. La variance obtenue après calcul des paramètres neutroniques finaux est alors représentative des incertitudes liées aux données d'entrée.

Nous proposons ici de montrer l'intérêt de la méthode CEP pour la propagation des incertitudes liées aux données nucléaires du ^{239}Pu via son application dans un calcul TMC sur le cas PST-01-01. L'étude se limite ici à une perturbation des paramètres de résonances, soit des sections efficaces dans le domaine des Résonances Résolues. Nous commençons pour cela par réaliser une simulation de référence (typiquement le calcul mené avec la bibliothèque JEFF-3.1.1). Puis, après avoir généré $N = 1000$ sections perturbées du ^{239}Pu ⁴, nous lançons N calculs dans des configurations adjointes perturbées,

⁴La génération des différentes évaluations perturbées a été réalisée par G. NOGUERE par variations des différents paramètres de résonance en accord avec la bibliothèque de covariance COMAC [9] générée par le code CONRAD [10].

chacun utilisant une des évaluations disponibles, de manière à calculer la différence de réactivité entre les états perturbés et l'état de référence. Seuls les effets de capture et de fission, que nous savons prédominants sont calculés, de manière exacte par la méthode CEP. La figure IV.10 (du haut) présente l'histogramme des variations de réactivité $\Delta\rho_i$ obtenues entre la bibliothèque de référence et chaque évaluation i . Afin d'appuyer la justesse de la procédure, nous présentons également l'histogramme issu d'une méthode TMC classique, dans laquelle la différence de réactivité $\Delta\rho_i$ est obtenue par différence des réactivités entre la simulation i et la simulation de référence calculées indépendamment. Deux conclusions sont à tirer de cette expérience :

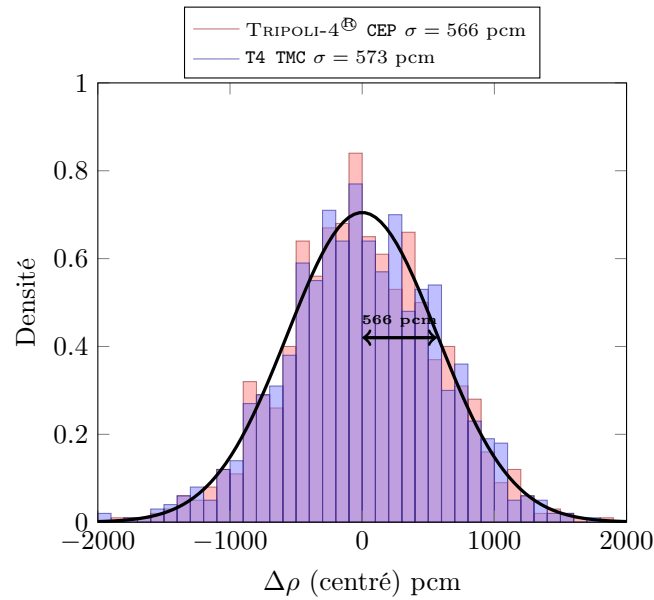
- Les deux méthodes TMC-IFP et TMC classique fournissent des résultats équivalents.
- La méthode TMC-IFP est équivalente en temps de calcul à la méthode TMC classique. Cependant, il faut tenir compte du fait que nous traitons un benchmark extrêmement simple ou chaque calcul de réactivité converge rapidement en dessous des 566 pcm d'incertitude finale obtenue sur la variance des $\Delta\rho_i$. Si les perturbations avaient été plus faibles, la méthode des perturbations aurait montré un avantage certain puisque sa précision relative n'est pas dépendante de la magnitude de la perturbation. Rappelons que l'incertitude σ_{TMC} de la méthode TMC est la combinaison de l'incertitude réelle $\sigma_{\Delta\rho}$ sur le $\Delta\rho$, et de l'incertitude liée à la convergence moyenne $\bar{\sigma}_i$ de chaque calcul :

$$\sigma_{\text{TMC}} \simeq \sqrt{\sigma_{\Delta\rho}^2 + \bar{\sigma}_i^2} \quad (\text{IV.13})$$

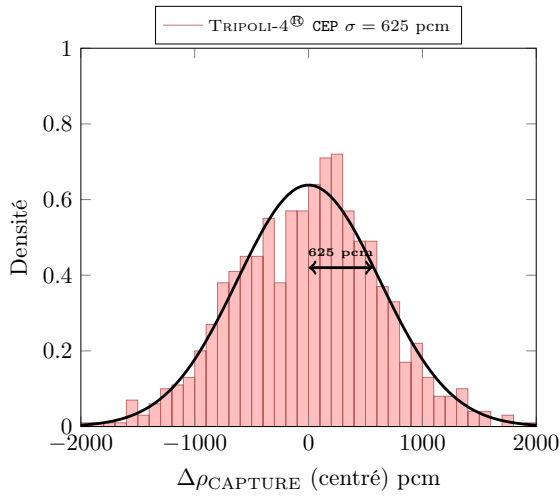
et que pour obtenir l'incertitude $\sigma_{\Delta\rho}^2$, il faut que l'incertitude de chaque calcul indépendant soit inférieure à l'effet mesuré, soit :

$$\bar{\sigma}_i \ll \sigma_{\text{TMC}} \quad (\text{IV.14})$$

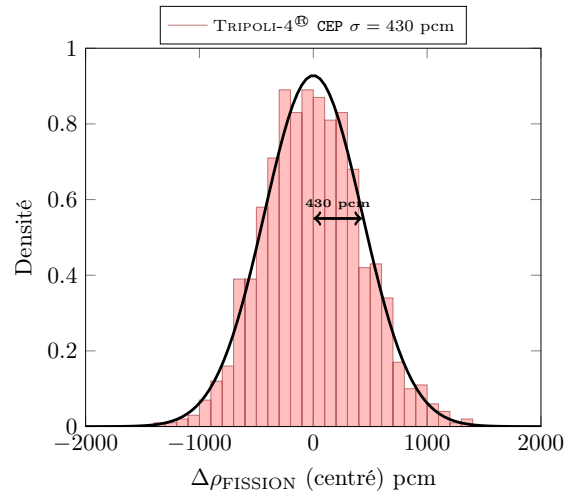
La méthode TMC classique permet de déterminer l'influence sur le k_{eff} de chaque paramètre via l'étude des corrélations entre la différence de réactivité $\Delta\rho_i$ et la valeur des paramètres de résonance de l'évaluation i . La méthode TMC-IFP va, elle, permettre la décomposition des incertitudes sur les différentes réactions via la décomposition des effets $\Delta\rho_i$ sur les réactions, voire pour chaque groupe en énergie. Le résultat est une incertitude sur la réactivité attribuée à chacune des réactions (*cf.* Fig. IV.10). On remarque alors une forte anti-corrélation, $\text{Cor}[\Delta\rho_{\text{CAPTURE}}, \Delta\rho_{\text{FISSION}}] = -0.475$, entre la capture et la fission qui est une source de réduction d'incertitude importante. Soulignons encore une fois l'importance de ces corrélations dans la propagation des incertitudes, et les avancées réalisées en ce sens par la bibliothèque de matrices de covariance COMAC.



(a) Effet en réactivité total.



(b) Effet dû à la capture.



(c) Effet dû à la fission.

FIGURE IV.10 – Histogramme des 1000 différences de réactivités $\Delta\rho_i$ entre le calcul de référence JEFF-3.1.1 et les 1000 évaluations du ^{239}Pu échantillonnées en accord les lois de distribution des différents paramètres de résonances, appliqué au le benchmark PST-01-01.

Bilan du Chapitre

Théorie : Sensibilités

Les sensibilités peuvent être calculées par les méthodes suivantes :

- Méthode exacte des perturbations comme la méthode CEP.
- Méthode premier ordre des perturbations comme les méthodes Méthode IFP ou CLUTCH. Dans l'absolu, une méthode premier ordre suffit puisqu'une sensibilité correspond à un effet premier ordre.
- Méthode des *échantillons corrélés* évoluée.

Apport de la méthode CEP

L'application de la méthode CEP permet le calcul rigoureux des sensibilités du k_{eff} à l'ensemble des données nucléaires dans le code TRIPOLI-4[®] (sections, multiplicité, spectre, etc.).

Possibilités étendues de post-traitement et de calcul des sensibilités (sections doublement différentielles, $S(\alpha, \beta)$, etc.). Cependant, on note une difficulté à converger sur les effets de diffusion.

Le calcul 3D des sensibilités en Monte Carlo est amené à remplacer les calculs déterministes parfois très simplifiés (géométrie 2D, effets implicites d'auto-protection, etc.) afin de simplifier le travail des évaluateurs en vue d'établir un retour plus précis sur les données nucléaires ainsi que le travail des physiciens des réacteurs pour les études de transposition et de représentativité.

Perspectives

Puisque la lourdeur d'utilisation de la méthode CEP n'est pas entièrement nécessaire au calcul des sensibilités, il serait également bon de développer les méthodes concurrentes :

- Méthode IFP,
- Méthode CLUTCH,
- Méthode des *échantillons corrélés* évoluée,

et de suivre leur exemple en ce qui concerne le calcul des sensibilités généralisées (*i.e.* des sensibilités sur des paramètres autres que le k_{eff}).

En ce qui concerne le calcul des incertitudes « Total Monte Carlo », la méthode CEP peut être utilisée afin de calculer les différences de réactivité engendrées par la perturbation des données nucléaires dans le but de déterminer la distribution d'incertitude du k_{eff} . Ce type de calcul TMC-IFP (couplé à la méthode CEP) est au moins aussi rapide qu'un calcul TMC classique. La méthode CEP permet de plus la décomposition des incertitudes par réaction et isotope et va permettre de converger efficacement sur des petits effets.

Bibliographie

- [1] E. POUGET. *Analyse des solutions critiques de Plutonium de la base ICSBEP avec le code TRIPOLI4.9 et la bibliothèque JEFF-3.1.1*. Rapport de stage universitaire. 2014 (cf. p. 118).
- [2] OCDE/NEA. *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. NEA/NSC/DOC(95)03. 2012 (cf. p. 118, 130).
- [3] G. TRUCHET, P. LECONTE et A. SANTAMARINA. “Implementation and Validation of Reference Sensitivity Profile Calculations in TRIPOLI4”. In : *ICNC2015*. 2015 (cf. p. 121, 125).
- [4] T. IVANOVA. “Benchmark on Sensitivity Calculation (Phase III)”. In : *PHYSOR 2012, Knoxville, USA*. 2012 (cf. p. 121).
- [5] G. RIMPAULT. “The ERANOS Code and Data System for Fast Reactor Neutronic Analyses”. In : *PHYSOR 2002, Séoul, Corée du Sud*. 2002 (cf. p. 121).
- [6] G. RIMPAULT. “Algorithmic Features of the ECCO Cell Code for Treating Heterogeneous Fast Reactor Subassemblies”. In : *International Topical Meeting on Reactor Physics and Computations*. 2012 (cf. p. 121).
- [7] G. PALMIOTTI. “BISTRO Optimized Two Dimensional Sn Transport Code”. In : *Nuclear Science and Engineering* 104.26 (1990) (cf. p. 121).
- [8] A. KONING et D. ROCHMAN. “Towards sustainable nuclear energy : Putting nuclear physics to work”. In : *Annals of Nuclear Energy* 35.11 (2008), p. 2024–2030 (cf. p. 133).
- [9] P. ARCHIER et al. “Estimation of multi-group cross section covariances of U-238, U-235, Pu-239, Am-241, Fe-56 and Na-23”. In : *PHYSOR 2012, Knoxville, USA*. 2012 (cf. p. 133).
- [10] C. de SAINT JEAN et al. “CONRAD Evaluation Code : Development Status and Perspectives”. In : *ND2013, New York, USA*. 2013 (cf. p. 133).

Chapitre V

Paramètres Cinétiques

Sommaire

V.A Dérivation des Paramètres Cinétiques Effectifs	143
V.A.1 Équation Cinétique du Modèle Point Exact	144
V.A.2 Choix des Paramètres du Modèle	144
V.B Implémentation	145
V.B.1 Algorithme	146
V.B.2 Vérification	147
V.C Validation et Qualification	149
V.C.1 La Suite de Validation/Qualification des α_{Rossi}	149
V.C.2 Le Réacteur CALIBAN	150
V.C.3 Les Configurations MISTRAL 1 et 2	151
V.D Discussions	152
V.D.1 Sensibilités aux Données Nucléaires	152
V.D.2 Longueur du Cycle IFP	153
V.D.3 Corrélations Inter-Génération	154

Les paramètres cinétiques sont essentiels à la bonne conduite d'un réacteur car ils caractérisent la cinétique de la réaction en chaîne. Tout d'abord le *temps de vie* des neutrons, noté Λ , qui correspond au temps moyen entre l'émission et la mort d'un neutron. Ce temps est plus ou moins lié à la vitesse de propagation de la réaction en chaîne : dans le domaine sur-critique, la puissance augmentera en moyenne d'un facteur $k_{\text{eff}} > 1$ tous les Λ secondes [1]. Or, ce temps de vie est extrêmement court ($\sim 10^{-7}$ s), si bien qu'il serait presque impossible de contrôler un réacteur nucléaire si un autre phénomène ne rentrait pas en compte : les neutrons retardés. La fission d'un noyau d' ^{235}U va émettre, avec une grande probabilité, des neutrons prompts dans un laps de temps très court ; mais elle peut aussi induire, avec une probabilité beaucoup plus faible, des neutrons émis dans un laps de temps beaucoup plus long (de l'ordre de la seconde voir de la minute [1]). Ce sont ces neutrons qui permettent le contrôle de la réaction en chaîne à une échelle de temps raisonnable. Le ratio du nombre de neutrons retardés sur le nombre de neutrons total émis par fission est appelé la *fraction de neutrons retardés*, et est noté β . Bien que très faible (autour de 0.6 % pour l' ^{235}U), cette fraction de neutrons permet la conduite d'un réacteur lors d'excursions faibles dans le domaine sur-critique (*i.e.* $\rho < \beta$).

La détermination des paramètres cinétiques est avant tout un problème de sûreté. Mais il s'agit aussi d'une donnée indispensable aux comparaisons calculs/expériences puisque la réactivité n'est mesurable qu'en unités du β , (*i.e.* unité qu'on appelle le dollar, \$). La valeur du β calculée en pcm est donc indispensable à la conversion des mesures.

Dans ce chapitre, nous présentons la méthode que nous avons implémentée dans le code TRIPOLI-4[®] afin de calculer les paramètres cinétiques *effectifs*. Nous utiliserons pour cela la Méthode IFP (*cf.* Sec. III.B.1) déjà éprouvée dans le code MCNP.

V.A Dérivation des Paramètres Cinétiques Effectifs

Si nous nous sommes limités jusqu'à présent à l'étude de l'équation homogène du transport des neutrons (*cf.* Sec. II.A), qui reflète la physique d'un réacteur mathématiquement ramené à l'état (stable) critique, il est aussi fondamental de pouvoir décrire le comportement d'un cœur dans une situation transitoire ou accidentelle. Dans ce cas il faut faire appel à l'équation du transport des neutrons dans sa forme la plus générale [2] :

$$\forall \{\epsilon, t\} \in \mathcal{E} \times T, \quad \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\epsilon, t) = [\mathcal{P}(\epsilon, t) - \mathcal{K}(\epsilon, t) - \mathcal{B}(\epsilon, t)] \phi(\epsilon, t) + S_d(\epsilon, t) + S(\epsilon, t) \quad (\text{V.1})$$

- v est la vitesse du neutron.
- ϕ est le flux de neutron (direct).
- t le temps.
- ϵ un point de l'espace de phase \mathcal{E} .
- \mathcal{P} l'opérateur de production total des neutrons par fission.
- \mathcal{B} l'opérateur de production retardée des neutrons par fission.
- S_d la source de neutron provenant de la désintégration des précurseurs (gouvernée par une autre équation différentielle).
- S est une source externe de neutrons.

Cette équation est généralement remaniée afin d'être résolue. Apparaissent alors des paramètres intégraux correspondant au temps de vie moyen des neutrons Λ et à la fraction de neutrons retardés β .

V.A.1 Équation Cinétique du Modèle Point Exact

A cette fin, le flux est décomposé en un produit de deux fonctions [3] :

$$\phi(\epsilon, t) = p(t)\Psi(\epsilon, t) \quad (\text{V.2})$$

où p est une fonction d'amplitude (*i.e.* de puissance), et Ψ une fonction de forme. Dans un modèle point approché, cette fonction de forme Ψ est supposée indépendante du temps ; dans le modèle point exact, cette hypothèse n'est plus valable¹. Afin d'assurer l'unicité de la décomposition, on introduit une fonction de pondération w et une constante K_0 définie comme il suit :

$$\left\langle \frac{w(\epsilon)\Psi(\epsilon, t)}{v(E)} \right\rangle = K_0 \quad (\text{V.3})$$

En divisant l'équation du transport par $F(t) = \langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle$ et en intégrant à nouveau sur l'espace des phases, on peut définir l'équation suivante :

$$\Lambda(t)p'(t) = (\rho(t) - \beta(t))p(t) + s_d(t) + s(t) \quad (\text{V.4})$$

Avec :

$$\Lambda(t) = \frac{\langle w, \frac{1}{v}\Psi \rangle}{\langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle} = \frac{K_0}{\langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle} \quad (\text{V.5})$$

$$\rho(t) = \frac{\langle w, (\mathcal{P} - \mathcal{K})\Psi \rangle}{\langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle} \quad (\text{V.6})$$

$$\beta(t) = \frac{\langle w, \mathcal{B}\Psi \rangle}{\langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle} \quad (\text{V.7})$$

$$s_d(t) = \frac{\langle w, S_d \rangle}{\langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle} \quad (\text{V.8})$$

$$s(t) = \frac{\langle w, S \rangle}{\langle w, \mathcal{P}\Psi \rangle} \quad (\text{V.9})$$

$$(\text{V.10})$$

Si le choix de la fonction $t \rightarrow F(t)$ est arbitraire, le choix de la fonction de pondération w l'est tout autant (w doit cependant être une fonction de « bonne famille »). Citons Henry [4] pour s'en convaincre : « *The definition of F is arbitrary. That is, although the magnitudes ρ , β and Λ are altered by changes in F , the kinetic equations are entirely independent of it [...]. Evidently, it makes no differences, provided β and Λ are defined consistently with ρ* ».

V.A.2 Choix des Paramètres du Modèle

Néanmoins il faut bien donner des valeurs aux paramètres w et F . Le choix est généralement fait par cohérence avec d'autres formules (*cf.* la thèse de doctorat de G. Perret donne un aperçu très large et bien construit de ces aspects [5]). En général, F est choisie de manière à normaliser les estimateurs par le taux de fission, quant à w , elle est généralement choisie égale au flux adjoint critique fondamental pour les raisons suivantes :

- Rendre la définition de la réactivité $\rho(t)$ cohérente avec la définition de la réactivité statique [6],

$$\rho_s = \frac{\langle \Phi^\dagger, (\mathcal{P} - \mathcal{K})\Psi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Psi \rangle} = \frac{\langle \Phi^\dagger, S\Psi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Psi \rangle} \quad (\text{V.11})$$

¹Bien qu'avec des paramètres bien choisis, la dépendance de la fonction de forme Ψ en fonction du temps sera de faible amplitude.

- Par cohérence avec la formule des perturbations (*cf.* Sec. III.A.2.i) lorsque le réacteur est critique :

$$\begin{aligned} \delta\rho = (\rho + \delta\rho) - \rho &= \left(\frac{\langle \Phi^\dagger, (\mathcal{P} - \mathcal{K})\Psi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Psi \rangle} + \frac{\langle \Phi^\dagger, (\delta\mathcal{P} - \delta\mathcal{K})\Psi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Psi \rangle} \right) - \frac{\langle \Phi^\dagger, (\mathcal{P} - \mathcal{K})\Psi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Psi \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi^\dagger, (\delta\mathcal{P} - \delta\mathcal{K})\Psi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Psi \rangle} \end{aligned} \quad (\text{V.12})$$

- Parce qu'il est possible de montrer que le flux adjoint fondamental est la fonction qui minimise les erreurs lorsque Ψ est choisie indépendante du temps [7].

D'autres raisons d'ordre phénoménologique, liées à la mesure, peuvent être avancées. Prenons pour exemple la fraction de neutrons retardés, β , et imaginons qu'une mesure de ce paramètre soit réalisée à t_1 avec un détecteur capable de distinguer les lignées issues d'un neutron retardé et celles issues d'un neutron prompt ayant eu lieu au temps t_0 . Grâce à cette mesure, il serait possible d'accéder à la quantité suivante,

$$\frac{\langle I((\epsilon, t_0) \rightarrow (\epsilon_d, t_1)), \mathcal{B}(t_0)\phi(t_0) \rangle_\epsilon}{\langle I((\epsilon, t_0) \rightarrow (\epsilon_d, t_1)), \mathcal{P}(t_0)\phi(t_0) \rangle_\epsilon} \quad (\text{V.13})$$

où $I((\epsilon, t_0) \rightarrow (\epsilon_d, t_1))$ est le nombre moyen de lignées engendrées par un neutron en ϵ au temps t_0 et qui seront détectées par le détecteur en ϵ_d au temps t_1 . On suppose le réacteur sous-critique à ce stade, puisque sinon, il n'existe potentiellement pas de limite à ce nombre moyen de neutrons. Dans ce cas, il y a équivalence entre ce nombre moyen de lignées et le flux adjoint issu de l'équation adjointe à l'équation (V.1). Attention, l'importance I est à ce stade différente de l'importance introduite auparavant dans ce manuscrit (*cf.* Chap. II), qui l'a été pour un réacteur exactement critique, ou rendu artificiellement critique. Lorsque le réacteur est sous-critique et stable, I ne dépend plus du temps et correspond à la solution de l'équation adjointe à sources :

$$0 = [\mathcal{P}^\dagger(\epsilon) - \mathcal{K}^\dagger(\epsilon)] I(\epsilon) + S^\dagger(\epsilon_d) \quad (\text{V.14})$$

où $S^\dagger(\epsilon_d)$ est la « fonction » de détection du détecteur. Une telle mesure dans un réacteur sous-critique est donc dépendante de la position du détecteur. Lorsque le réacteur est critique (ou rendu artificiellement critique par la division des sources par le k_{eff}), il est raisonnable de penser que I s'apparente à la solution de l'équation adjointe homogène, et tend vers la probabilité itérée de fission.

Le détecteur décrit plus haut n'existe évidemment pas, mais certaines techniques de mesures (*e.g.* technique du bruit neutronique [5]) permettent, par exemple, de remonter à la corrélation entre lignées de fission parvenant à être détectées simultanément par deux détecteurs. Cette corrélation est nécessairement pondérée par la même importance $I((\epsilon, t_0) \rightarrow (\epsilon_d, t_1))$ décrite plus haut et provient des neutrons émis par une même fission. La majeure partie des mesures étant réalisée dans un cœur critique ou proche de la criticité, il est judicieux de développer une méthode de calcul de référence permettant d'accéder aux paramètres neutroniques dits *effectifs* :

$$\Lambda_{\text{eff}} = \frac{\langle \Phi^\dagger, \frac{1}{v}\Phi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle}, \quad \beta_{\text{eff}} = \frac{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{B}\Phi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle} \quad (\text{V.15})$$

où Φ et Φ^\dagger correspondent aux flux direct et adjoint de l'équation homogène du transport des neutrons.

V.B Implémentation

L'ensemble des résultats présentés ci-après a fait l'objet d'une publication dans Annals of Nuclear Energy [8] en collaboration avec l'équipe TRIPOLI-4[®] du DEN/DM2S/SERMA du CEA Saclay. Nous remercions particulièrement A. Zoia et E. Brun qui ont grandement aidé à la réalisation de ce travail.

Dans les chapitres précédents, nous avons démontré l'équivalence entre la probabilité de fission itérée (IFP) et le flux adjoint critique (*cf.* Sec. II). Les expressions des paramètres cinétiques effectifs étant très proches des expressions des sensibilités du k_{eff} aux données nucléaires, il semblait opportun d'employer la méthode CEP (*cf.* Sec. III.D), qui utilise le principe des IFP afin de calculer des perturbations avec TRIPOLI-4[®]. Cependant, une efficacité accrue est attendue par l'emploi des méthodes approchées des perturbations au premier ordre qui permettent d'effectuer le calcul direct et adjoint dans une même simulation et sans nécessité de stockage. La Méthode IFP (*cf.* Sec. III.B.1) a été sélectionnée pour son caractère de référence et sa simplicité d'utilisation (rappelons que dans la méthode CLUTCH (*cf.* Sec. III.B.2), il faut calculer une importance moyenne sur un maillage spatial). Des méthodes basées sur les échantillons corrélés sont aussi en développement dans d'autres codes [9], mais elles ne reflètent pas la direction prise dans cette thèse. Bien que l'algorithme que nous présentons ici ait déjà été implémenté [10, 11] dans les codes MCNP [12] et SCALE [13], nous y avons adjoint de légères modifications qui permettent d'améliorer son efficacité² et le diagnostic de convergence des paramètres en fonction du cycle IFP.

Soient Λ_0 et β_0 les estimateurs non pondérés ($w = 1$) du temps de vie et de la fraction retardée des neutrons :

$$\Lambda_0 = \frac{\langle 1, \frac{1}{v}\Phi \rangle}{\langle 1, \mathcal{P}\Phi \rangle}, \quad \beta_0 = \frac{\langle 1, \mathcal{B}\Phi \rangle}{\langle 1, \mathcal{P}\Phi \rangle} \quad (\text{V.16})$$

Ces estimateurs peuvent être calculés par TRIPOLI-4[®] et sont nommés UNWEIGHTED. Soient Λ_L et β_L pour $L > 0$, les temps de vie et fraction retardée des neutrons, pondérés par une probabilité itérée de fission I^L obtenue avec un cycle de longueur L :

$$\Lambda_L = \frac{\langle I^L, \frac{1}{v}\Phi \rangle}{\langle I^L, \mathcal{P}\Phi \rangle}, \quad \beta_L = \frac{\langle I^L, \mathcal{B}\Phi \rangle}{\langle I^L, \mathcal{P}\Phi \rangle} \quad (\text{V.17})$$

Lorsque le cycle L est égal à 1, les estimateurs IFP se confondent avec les estimateurs introduits par Y. NAUCHI [15] et qui étaient déjà implémentés dans le code TRIPOLI-4[®] sous le nom d'estimateur de NAUCHI. Puisque I^L tend vers le flux adjoint Φ^\dagger pour un L suffisamment grand,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \Lambda_L = \Lambda_{\text{eff}}, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \beta_L = \beta_{\text{eff}}, \quad (\text{V.18})$$

il est possible de calculer les paramètres cinétiques effectifs. Nous calculerons aussi la valeur du paramètre α_{Rossi} , qui a donné son nom à une méthode de mesure des paramètres cinétiques et qui est défini comme le ratio des deux paramètres précédents :

$$\alpha_{\text{Rossi}} = -\frac{\beta_{\text{eff}}}{\Lambda_{\text{eff}}} = -\frac{\langle \Phi^\dagger, \mathcal{B}\Phi \rangle}{\langle \Phi^\dagger, \frac{1}{v}\Phi \rangle}, \quad (\text{V.19})$$

V.B.1 Algorithme

Durant un transport classique en mode critique, les scores associés à chaque fission d'une génération g sont associés à une importance, calculée a posteriori dans une génération $g + L$ où L est la longueur du cycle IFP. Tout comme dans les méthodes CEP et AIWS introduites dans ce document, un identifiant unique i est associé à chaque neutron de fission de la génération g de manière à pouvoir attribuer la contribution de chaque fission de la génération $g + L$ à une source i de fission de la génération g . La part des fissions dans la génération $g + L$ que l'on peut relier au neutron de fission i est notée $(\pi)_i$ de manière générale, $(\pi_p)_i$ si i était un neutron prompt et $(\pi_d)_i$ si i était un neutron retardé. A chaque fission, mémoire est gardée du temps de vie t_i du neutron, estimé depuis la source qui a initié l'histoire (à laquelle appartient i) dans la génération g . Ainsi, il est possible d'estimer pour chaque histoire :

$$\frac{1}{k_{\text{eff}}} \langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\Phi \rangle_{\text{histoire}} = \Phi_1^\dagger w_{f1} + \Phi_2^\dagger w_{f2} + \dots \propto \sum_i \frac{(\pi)_i}{w_{fi}} w_{fi} = \sum_i (\pi)_i. \quad (\text{V.20})$$

²Ces modifications ont été partiellement apportées au même moment dans le code SERPENT [14] par une autre équipe de chercheurs.

où le poids du neutron issu de la fission i , w_{fi} , s'annule lors de la normalisation de $(\pi)_i$ à un unique neutron. De même il est possible d'estimer l'intégrale impliquant l'opérateur retardé des fissions :

$$\frac{1}{k_{\text{eff}}} \langle \Phi^\dagger, \mathcal{B}\Phi \rangle_{\text{histoire}} \propto \sum_i (\pi_d)_i. \quad (\text{V.21})$$

La fraction de neutrons retardés s'obtient alors comme le ratio de (V.21) et (V.20) préalablement sommées sur toutes les histoires de la génération g . Pour obtenir le temps de vie moyen effectif des neutrons, il faut encore estimer,

$$\langle \varphi^\dagger, \frac{1}{v} \varphi \rangle_{\text{histoire}} \propto \sum_i (\pi)_i t_i, \quad (\text{V.22})$$

de manière à pouvoir calculer le ratio des équations (V.22) et (V.20).

Le point technique qui complexifie l'implémentation de cet algorithme est la transmission des identifiants i de chaque fission à travers les générations. L'innovation introduite par TRIPOLI-4[®] consiste à mémoriser dans des tableaux dynamiques le père de chaque fission dans la génération précédente durant L générations glissantes (où L est un nombre entier fixé par l'utilisateur). Ainsi pour chaque fission d'une génération $g + \lambda$, il est possible de remonter de proche en proche à la génération g pourvu que $\lambda \leq L$. Comme indiqué sur le schéma de droite de la figure V.1, il devient possible de débiter un nouveau cycle lors de chaque nouvelle génération, là où les implémentations existantes doivent attendre la fin du cycle afin d'en commencer un nouveau. Un algorithme autorisant le départ d'un nouveau cycle à chaque génération a également été implémenté dans le code SERPENT très récemment, cependant, contrairement à TRIPOLI-4[®], une sortie de tous les paramètres cinétiques pour tous les cycles inférieurs à L n'est pas proposée. Cette fonctionnalité doit permettre à l'utilisateur d'estimer, rigoureusement et sans calcul supplémentaire, la longueur du cycle adéquat.

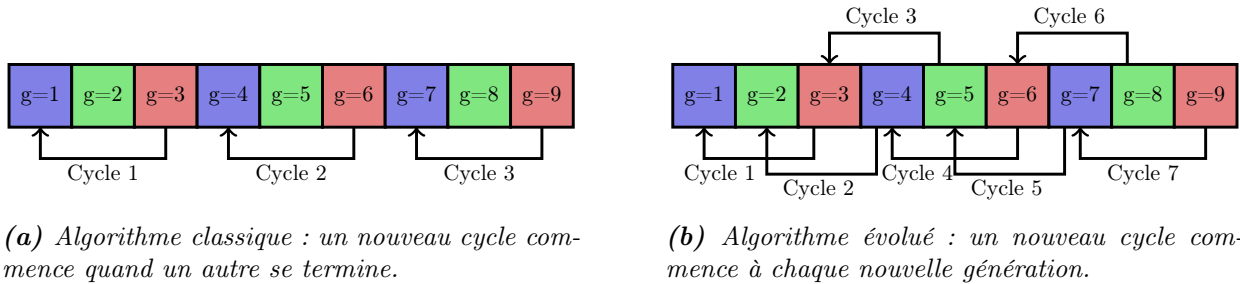


FIGURE V.1 – Différents algorithmes pour la Méthode IFP. Les flèches indiquent le lien entre les scores d'une génération g et leur importance évaluée dans une génération $g + L$. Ici, $L = 2$. Pour l'estimation des paramètres cinétiques, les données nécessaires au calcul des paramètres cinétiques sont peu nombreuses et permettent la création d'un nouveau cycle à chaque génération. L'implémentation MCNP conserve une approche où les cycles se succèdent distinctement de manière à limiter l'empreinte mémoire du calcul des sensibilités qui requière un stockage par cycle bien plus conséquent.

V.B.2 Vérification

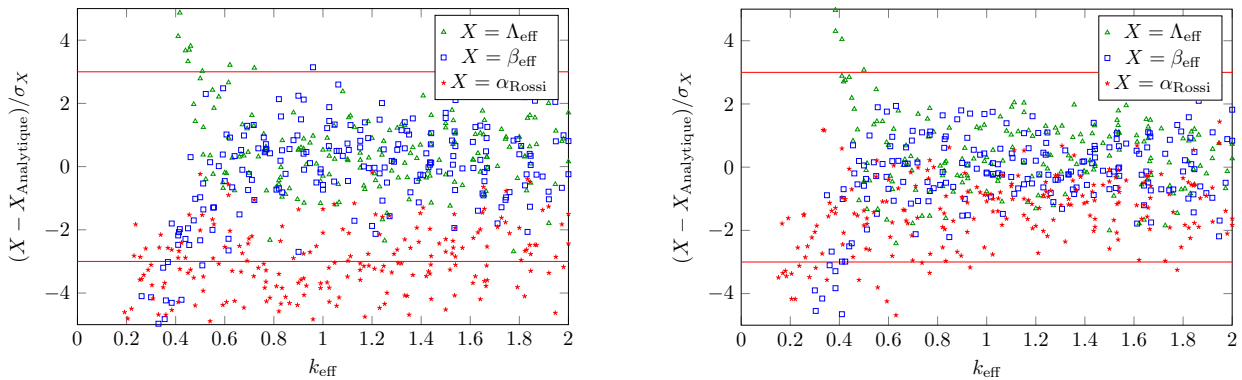
Encore une fois, nous insistons sur la nécessité de *vérifier* la bonne implémentation de nos méthodes. Pour ce faire, nous traiterons deux cas théoriques pour lesquels les paramètres cinétiques ont pu être évalués de manière analytique ou quasi-analytique. Ces cas théoriques ont été testés dans une maquette C++ du code TRIPOLI-4[®]³.

³Cette maquette du code TRIPOLI-4[®] a été mise à disposition par le DEN/DM2S/SERMA. Pour notre vérification, la même « classe » C++ a été vérifiée puis incluse directement dans le code TRIPOLI-4[®].

V.B.2.i Système INFINI à deux Groupes d'Énergie

Le premier cas de vérification concerne un réacteur infini homogène à deux groupes d'énergie (rapide et thermique). Les neutrons retardés sont classés selon deux « familles », chacune possédant son propre spectre de fission. Les paramètres de référence du modèle ainsi que les expressions analytiques des paramètres cinétiques sont disponibles dans [8] qui reprend l'étude originellement menée par B. C. Kiedrowski [16]. La vérification de l'algorithme a consisté à calculer les paramètres cinétiques de plusieurs configurations où le nombre de neutrons émis par fission et la section d'absorption ont été légèrement perturbés autour de leur valeur de référence. La cohérence des valeurs calculées vis-à-vis des valeurs analytiques est ensuite analysée (*cf.* Fig. V.2, à gauche). Trois points sont à mettre en valeur :

- Un très bon accord est obtenu entre les valeurs calculées et les valeurs de référence dans les configurations où $k_{\text{eff}} > 0.5$ pour les paramètres β_{eff} et λ_{eff} . Les écarts aux valeurs de référence restent compris dans les incertitudes statistiques (*i.e.* ces écarts appartiennent à l'intervall $[-3; 3]$ dans 99.7 % des cas.).
- Pour les $k_{\text{eff}} < 0.5$, les calculs IFP des trois paramètres divergent par rapport aux calculs de référence. Ce comportement est certainement dû à une sous-estimation de la variance liée à un milieu très faiblement multiplicateur⁴ ou à un biais lié à un trop faible nombre de particules par génération.
- L'estimateur de l' α_{Rossi} présente un biais clairement identifié. Il s'agit d'un problème statistique que nous avons déjà évoqué dans un chapitre précédent (*cf.* p. 87) : l'espérance d'un ratio est différente du ratio des espérances. L'augmentation du nombre de particules corrige ce biais statistique (*cf.* Fig. V.2, à droite) en attendant une correction définitive grâce à un nouveau type de score.


 (a) $N = 10^3$ histoires de neutrons par génération.

 (b) $N = 10^4$ histoires de neutrons par génération.

FIGURE V.2 – Réacteur infini, deux groupes d'énergie. Écarts (exprimés relativement à leur incertitude à 1σ) entre les paramètres cinétiques de référence (calculés analytiquement) et les paramètres cinétiques IFP calculés par la maquette du code TRIPOLI-4[®]. 2700 cycles IFP actifs sont simulés. Chaque point correspond à un modèle de cœur dont on a perturbé l'absorption et/ou la multiplicité des neutrons par fission par rapport à une référence. A chacune des configurations correspond un k_{eff} et un écart aux valeurs de références du Λ_{eff} , β_{eff} et α_{Rossi} .

⁴En effet, un milieu très faiblement multiplicateur⁵ augmente les corrélations inter-génération puisque peu de neutrons survivent à la fin de chaque génération et qu'ils doivent alors être dédoublés. Ces corrélations seront évoquées un peu plus loin dans ce chapitre.

V.B.2.ii Système FINI à deux Groupes d'Énergie

La forme du flux adjoint varie en fonction de l'énergie, mais aussi en fonction de l'espace. Il est donc nécessaire de traiter un cas de vérification où les fuites de neutrons occasionnent une très forte variation du flux adjoint. Le « rod model » [17] constitue le modèle le plus simple remplissant ce critère. Il est constitué d'une unique dimension spatiale dans laquelle les neutrons évoluent selon un sens positif ou négatif avec une probabilité égale après chaque collision. Lorsqu'un neutron s'égare hors de l'intervalle $[-\frac{\mathcal{L}}{2}; \frac{\mathcal{L}}{2}]$, il est perdu. Tout comme dans le cas précédent, il existe deux groupes de neutrons retardés. Les équations de ce modèle sont écrites dans [8] et permettent une dérivation analytique des paramètres cinétiques. Cependant, pour des raisons pratiques, la solution de référence est obtenue par résolution du système matriciel finement maillé sur la dimension spatiale. La figure V.3 présente les écarts obtenus sur les paramètres cinétiques en fonction du k_{eff} pour différentes largeurs de cœur. Les écarts sont inclus dans les fluctuations statistiques des estimateurs et confirment la bonne implémentation de la méthode.

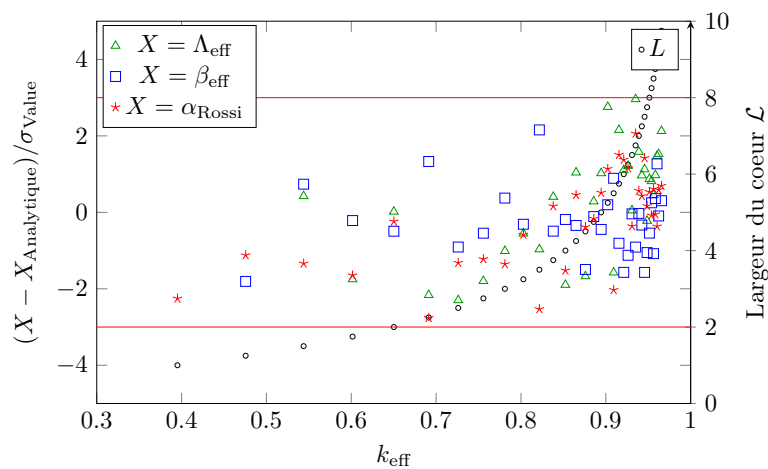


FIGURE V.3 – Réacteur fini, deux groupes d'énergie. Écarts (exprimés relativement à leur incertitude à 1σ) entre les paramètres cinétiques de référence (calculés analytiquement) et les paramètres cinétiques IFP calculés par la maquette du code TRIPOLI-4[®]. 2700 cycles IFP actifs sont simulés. Chaque point correspond à un modèle de cœur dont on a perturbé la largeur $\mathcal{L} \in [1; 10]$. À chacune des configurations correspond un k_{eff} et un écart aux valeurs de références du Λ_{eff} , β_{eff} et α_{Rossi} .

V.C Validation et Qualification

Les deux exemples précédents couvraient les aspects de *vérification* du code. Les cas traités dans cette section font partie d'une part, de la *validation numérique*, via une comparaison des calculs TRIPOLI-4[®] et MCNP (utilisant la même méthode) et d'autre part, de la *qualification*, en se comparant aux mesures disponibles.

V.C.1 La Suite de Validation/Qualification des α_{Rossi}

La constante de décroissance prompt $\alpha(\rho) = (\rho - \beta_{\text{eff}})/\Lambda_{\text{eff}}$ (qui apparaît après division de l'équation V.4 par Λ_{eff}) peut être directement mesurée dans un réacteur à faible puissance par différentes techniques [2, 5, 18]. La valeur extrapolée à une valeur critique (*i.e.* $\rho = 0$) est appelée $\alpha_{\text{Rossi}} = -\beta_{\text{eff}}/\Lambda_{\text{eff}}$. Lorsqu'elles sont disponibles, les mesures de l'alpha Rossi donnent un moyen de qualifier le calcul IFP des paramètres cinétiques. En premier lieu, nous considérerons la Suite de Validation [19, 20] des α_{Rossi} , mise en place pour le code MCNP qui contient une liste de benchmarks et de valeurs expérimentales associées. De manière à rester cohérent avec les résultats MCNP obtenus lors la validation de la Méthode

IFP par le Laboratoire de Los Alamos, (LANL), nous utiliserons dans un premier temps la bibliothèque ENDF/B-VII.0. Le nombre de particules par génération est de l'ordre de 40000 et le cycle IFP est égal à 20. Pour toutes les configurations testées, les résultats TRIPOLI-4[®] (cf. Tab. V.1) sont en bon accord avec les mesures. Lorsque, néanmoins, des différences apparaissent, les valeurs de TRIPOLI-4[®] restent cohérentes avec les valeurs MCNP. Ces écarts peuvent être expliqués d'une part par une forte sensibilité aux données nucléaires mal connues (e.g. ^{233}U et le domaine non résolu de ^{235}U) ou bien par la non propagation des incertitudes technologiques (dimensions, concentrations des isotopes, etc.).

TABLEAU V.1 – Les paramètres α_{Rossi} exprimés pour 10^4 s^{-1} pour chacune des configurations de la Suite de Validation des α_{Rossi} . Nous comparons les α_{Rossi} calculés par TRIPOLI-4[®] avec la bibliothèque de données nucléaires ENDF/B-VII.0 aux α_{Rossi} calculés par le code MCNP avec la même bibliothèque.

Configuration	Mesure	T4-IFP	MCNP-IFP
JEZEBEL-233	-100 ± 1	-107.15 ± 0.35	-108 ± 1
FLATTOP-23	-26.7 ± 0.5	-29.15 ± 0.2	-30.2 ± 0.4
GODIVA	-111 ± 2	-114 ± 0.59	-113 ± 1
FLATTOP-25	-38.2 ± 0.2	-39.55 ± 0.09	-39.7 ± 0.2
ZEUS-1	-0.338 ± 0.008	-0.36 ± 0.008	-0.363 ± 0.002
ZEUS-5	-7.96 ± 0.08	-10.81 ± 0.03	-10.76 ± 0.07
ZEUS-6	-3.73 ± 0.05	-4.07 ± 0.01	-4.14 ± 0.03
BIGTEN	-11.7 ± 0.1	-11.8 ± 0.03	-11.8 ± 0.1
STACY-30	-0.0127 ± 0.0003	-0.01273 ± 0.0001	-0.0133 ± 0.0003
STACY-46	-0.0106 ± 0.0004	-0.01080 ± 0.0001	-0.0104 ± 0.0002
JEZEBEL	-64 ± 1	-63.83 ± 0.37	-65 ± 1
FLATTOP-PU	-21.4 ± 0.5	-21.34 ± 0.16	-21.0 ± 0.3
THOR	-19 ± 1	-21.48 ± 0.35	-20 ± 1

Pour certaines configurations, les valeurs expérimentales du β_{eff} sont aussi disponibles. Les comparaisons des β_{eff} mesurés et des valeurs calculées par TRIPOLI-4[®] et MCNP avec la bibliothèque de données nucléaires ENDF/B-VII.0 sont présentées dans le tableau V.2. Figurent aussi, les résultats calculés avec une fonction de pondération $w = 1$, notés β_0 ainsi qu'un IFP de cycle 1, noté β_1 . Si les valeurs IFP obtenues avec un cycle de 20 générations sont en bon accord avec les mesures, il faut noter l'influence du choix de définition des paramètres cinétiques : les valeurs des β_1 et β_0 peuvent être très éloignées des valeurs mesurées, notamment pour les configurations réfléchies dans lesquelles la magnitude du flux adjoint présente une forte dépendance spatiale.

Les mesures du β et de α_{Rossi} , permettent trivialement de déterminer le temps de vie $\Lambda_{\text{eff}} = -\beta_{\text{eff}}/\alpha_{\text{Rossi}}$. Ainsi, le tableau V.3 compare les résultats issus des calculs MCNP et TRIPOLI-4[®] avec les valeurs « mesurées » (cependant aucune incertitude ne peut être calculée sans une plus ample connaissance des conditions de mesures de l'alpha Rossi et du temps de vie, et en particulier de la corrélation entre ces deux mesures). Les temps de vie obtenus avec des IFP de cycles 1 et 20 sont comparés aux mesures et aux temps de vie non pondérés⁶. Les valeurs Λ_{20} des deux codes sont en bon accord avec les mesures. On constate encore une fois l'extrême différence engendrée par une longueur trop faible du cycle IFP, voire par la pondération des estimateurs par la fonction unité.

V.C.2 Le Réacteur CALIBAN

Le réacteur CALIBAN est un réacteur opéré au CEA de Valduc, permettant des excursions brèves dans le domaine critique prompt. La description détaillée du réacteur est disponible dans [21] et fait partie

⁶Afin d'obtenir la valeur du temps de vie non pondéré dans le code MCNP, il est possible de calculer le ratio $\Lambda_0 = T_0/k_{\text{eff}}$ où T_0 est le temps de génération non pondéré que calcule le code MCNP dans sa version de base.

TABLEAU V.2 – Les paramètres β_{eff} exprimés en pcm pour chacune des configurations de la Suite de Validation des α_{Rossi} . Nous comparons les β_{eff} calculés par TRIPOLI-4[®] avec la bibliothèque de données nucléaires ENDF/B-VII.0 aux β_{eff} calculés par le code MCNP avec la même bibliothèque. Les paramètres β_0 et β_1 , respectivement non pondérés et pondérés par une IFP de cycle 1 sont aussi calculés par le code TRIPOLI-4[®].

Configuration	Mesure	T4-IFP β_{20}	MCNP-IFP β_{20}	T4 β_1	T4 β_0
JEZEBEL-233	289 ± 7	294 ± 1	296 ± 2	292 ± 0.3	281 ± 0.2
FLATTOP-23	360 ± 9	371 ± 2	383 ± 5	337 ± 0.6	578 ± 0.5
GODIVA	645 ± 13	649 ± 3	644 ± 7	644 ± 0.9	641 ± 0.5
FLATTOP-25	665 ± 4	689 ± 2	692 ± 3	621 ± 0.4	812 ± 0.3
BIGTEN	720 ± 7	725 ± 2	725 ± 4	705 ± 0.1	910 ± 0.4
JEZEBEL	190 ± 4	183 ± 1	187 ± 2	183 ± 0.3	204 ± 0.2
FLATTOP-PU	276 ± 7	283 ± 2	279 ± 4	257 ± 0.5	537 ± 0.5

TABLEAU V.3 – Les paramètres Λ_{eff} exprimés pour 10^{-9} s dans chacune des configurations de la Suite de Validation des α_{Rossi} . Nous comparons les Λ_{eff} calculés par TRIPOLI-4[®] avec la bibliothèque de données nucléaires ENDF/B-VII.0 aux Λ_{eff} calculés par le code MCNP avec la même bibliothèque. Les paramètres Λ_0 et Λ_1 , respectivement non pondérés et pondérés par une IFP de cycle 1 sont aussi calculés par le code TRIPOLI-4[®]. Les paramètres Λ_0 doivent être comparés aux valeurs T_0/k_{eff} calculés par MCNP.

Configuration	Mesure	T4-IFP Λ_{20}	MCNP-IFP Λ_{20}	T4 Λ_1	T4 Λ_0	MCNP T_0/k_{eff}
JEZEBEL-233	2.9	2.75 ± 0.0008	2.74 ± 0.0016	2.79 ± 0.0004	3.21 ± 0.00013	3.21 ± 0.00012
FLATTOP-23	13.5	12.7 ± 0.017	12.7 ± 0.03	15.1 ± 0.0048	71.9 ± 0.008	71.7 ± 0.0065
GODIVA	5.8	5.69 ± 0.0037	5.70 ± 0.0075	5.72 ± 0.0011	6.25 ± 0.0003	6.24 ± 0.00052
FLATTOP-25	17.5	17.4 ± 0.0085	17.4 ± 0.017	18.8 ± 0.0023	66.6 ± 0.003	66.5 ± 0.0026
BIGTEN	62	61.5 ± 0.024	61.5 ± 0.05	62.4 ± 0.006	112 ± 0.006	111 ± 0.0053
JEZEBEL	3	2.87 ± 0.0012	2.87 ± 0.0025	2.92 ± 0.0004	3.74 ± 0.0002	3.74 ± 0.00021
FLATTOP-PU	12.9	13.3 ± 0.017	13.3 ± 0.003	15.7 ± 0.0046	77.5 ± 0.009	77.3 ± 0.0065

de la base ICSBEP [22]. La valeur de α_{Rossi} est donnée par P. Casoli [23]. Nous avons réalisé le calcul des paramètres cinétiques de ce cœur avec la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1, 40000 particules par génération et un cycle IFP de 20 générations. La valeur calculée $\alpha_{\text{Rossi}} = -65.8 \pm 0.8$ par 10^4 s^{-1} est en bon accord avec la valeur mesurée $\alpha_{\text{Rossi}} = -64 \pm 1$ par 10^4 s^{-1} .

V.C.3 Les Configurations MISTRAL 1 et 2

Les configurations MISTRAL1 et MISTRAL2 que nous avons déjà évoquées dans ce document (cf. Sec. III.F.3.i), ont aussi permis de mesurer la fraction de neutrons retardés β par la méthode du bruit neutronique [24]. Le tableau V.4 rassemble les résultats des calculs et des mesures pour les deux configurations. On remarque le très bon accord entre les résultats TRIPOLI-4[®], le schéma de calcul déterministe APOLLO2/SHEM-MOC et les mesures. Remarquons également que les valeurs des paramètres estimés avec un cycle de 1 génération sont très proches de ceux estimés avec un cycle de 20 générations.

TABLEAU V.4 – Fractions de neutrons retardés β_{eff} (pcm) pour les configuration MISTRAL 1 et MISTRAL 2. Le β_{eff} mesuré est comparé aux valeurs calculées avec la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1. Pour référence, les valeurs calculées avec le code déterministe APOLLO-2 avec le schéma SHEM-MOC et la même bibliothèque sont aussi présentées.

Configuration	Mesure	T4-IFP β_{20}	AP	T4 β_1	T4 β_0
MISTRAL1	788 ± 12	791 ± 2	792	784 ± 1	716 ± 1
MISTRAL2	370 ± 6	368 ± 2	371	368 ± 1	355 ± 1

V.D Discussions

V.D.1 Sensibilités aux Données Nucléaires

Les calculs des paramètres cinétiques de la Suite Alpha Rossi ont été effectués avec la méthode IFP en utilisant ENDF/B-VII.0. Dans cette section nous avons relancé les calculs avec JEFF-3.1.1 de manière à évaluer l'impact d'une évaluation différente. Les paramètres α_{Rossi} sont rassemblés dans le tableau V.5. Dans la plupart des cas, les différences sont très faibles et ne dépassent pas quelques pourcents. Afin de s'assurer également de la bonne cohérence des paramètres β_{eff} et Λ_{eff} , leurs valeurs sont données dans les tableaux V.6 et V.7. L'impact de certains isotopes comme l' ^{233}U [19] semble affecter de manière égale les deux bibliothèques (cf. JEZEBEL-233 ou FLATTOP-23, Tab. V.5). Les valeurs des β_{eff} et Λ_{eff} montrent des différences plus importantes entre les deux bibliothèques que celles des α_{Rossi} (ce qui traduit un effet de compensation voir de corrélation devant exister entre les données nucléaires intervenant dans le calcul du β_{eff} et du Λ_{eff}). Les effets spectraux dans le domaine des résonances non résolues comme dans le cas ZEUS-1 ont un impact similaire dans les deux bibliothèques. Le mauvais accord pour les configurations ZEUS-5 and ZEUS-6, qui peut être attribué à la coupure au-dessus de 100 keV [19], affecte aussi les calculs ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1 (Tab. V.5).

TABLEAU V.5 – Les paramètres α_{Rossi} exprimés pour 10^4 s^{-1} dans chacune des configurations de la Suite de Validation des α_{Rossi} . Nous comparons les α_{Rossi} calculés par TRIPOLI-4[®] avec les bibliothèques de données nucléaires ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1.

Configuration	Mesure	T4-IFP ENDF/B-VII.0	T4-IFP JEFF-3.1.1
JEZEBEL-233	-100 ± 1	-107.15 ± 0.35	-110 ± 0.36
FLATTOP-23	-26.7 ± 0.5	-29.15 ± 0.2	-30.4 ± 0.2
GODIVA	-111 ± 2	-114 ± 0.59	-113 ± 0.57
FLATTOP-25	-38.2 ± 0.2	-39.55 ± 0.09	-40 ± 0.09
ZEUS-1	-0.338 ± 0.008	-0.36 ± 0.008	-0.37 ± 0.008
ZEUS-5	-7.96 ± 0.08	-10.81 ± 0.03	-10.63 ± 0.03
ZEUS-6	-3.73 ± 0.05	-4.07 ± 0.01	-4.07 ± 0.01
BIGTEN	-11.7 ± 0.1	-11.8 ± 0.03	-11.9 ± 0.03
STACY-30	-0.0127 ± 0.0003	-0.01273 ± 0.0001	-0.013 ± 0.0001
STACY-46	-0.0106 ± 0.0004	-0.01080 ± 0.0001	-0.0109 ± 0.00008
JEZEBEL	-64 ± 1	-63.83 ± 0.37	-67 ± 0.38
FLATTOP-PU	-21.4 ± 0.5	-21.34 ± 0.16	-22.3 ± 0.17
THOR	-19 ± 1	-21.48 ± 0.35	-20.65 ± 0.35

TABLEAU V.6 – Les paramètres β_{eff} exprimés en pcm dans chacune des configurations de la Suite de Validation des α_{Rossi} . Nous comparons les β_{eff} calculés par TRIPOLI-4[®] avec les bibliothèques de données nucléaires ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1.

Configuration	Mesure	T4-IFP ENDF/B-VII.0	T4-IFP JEFF-3.1.1
JEZEBEL-233	289 ± 7	294 ± 1	292 ± 1
FLATTOP-23	360 ± 9	371 ± 2	377 ± 2
GODIVA	645 ± 13	649 ± 3	646 ± 3
FLATTOP-25	665 ± 4	689 ± 2	694 ± 2
BIGTEN	720 ± 7	725 ± 2	739 ± 2
JEZEBEL	190 ± 4	183 ± 1	188 ± 1
FLATTOP-PU	276 ± 7	283 ± 2	290 ± 2

TABLEAU V.7 – Les paramètres Λ_{eff} exprimés pour 10^{-9} s dans chacune des configurations de la Suite de Validation des α_{Rossi} . Nous comparons les Λ_{eff} calculés par TRIPOLI-4[®] avec les bibliothèques de données nucléaires ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1.

Configuration	Mesure	T4-IFP ENDF/B-VII.0	T4 IFP JEFF-3.1.1
JEZEBEL-233	2.9	2.75 ± 0.0008	2.66 ± 0.00076
FLATTOP-23	13.5	12.7 ± 0.017	12.4 ± 0.016
GODIVA	5.8	5.69 ± 0.0037	5.71 ± 0.0036
FLATTOP-25	17.5	17.4 ± 0.0085	17.4 ± 0.0082
BIGTEN	62	61.5 ± 0.024	62.1 ± 0.025
JEZEBEL	3	2.87 ± 0.0012	2.81 ± 0.0011
FLATTOP-PU	12.9	13.3 ± 0.017	13.0 ± 0.0017

V.D.2 Longueur du Cycle IFP

Nous avons déjà vu que la longueur du cycle IFP était un paramètre important dans la détermination du flux adjoint, mais finalement peu sensible puisque 5 à 10 générations suffisent, pour la plupart des configurations étudiées, à ce que la puissance asymptotique créée par un neutron converge avec le nombre de générations. De manière à guider l'utilisateur dans la détermination du cycle idéal, le code calculera une estimation des paramètres cinétiques pour toutes les longueurs de cycle inférieur à L , la longueur maximale donnée au code par l'utilisateur. Une approche par analyse d'entropie aurait nécessité la projection des scores sur un maillage spatial et aurait alors compliqué l'implémentation, cette dernière approche constituerait l'unique solution possible dans le cas où l'on souhaiterait accéder aux paramètres cinétiques découpés par zone. La Figure V.4, à gauche, illustre la convergence des paramètres cinétiques IFP dans le benchmark GODIVA. Après 5, voire 10 générations, les paramètres cinétiques semblent avoir convergé. De manière similaire au calcul de l'importance d'une source, les différentes lignées de neutrons ont une probabilité de disparaître à chaque génération et l'écart type des estimateurs augmente en fonction de la longueur du cycle IFP. L'impact de la taille du système (et plus précisément du rapprochement des valeurs propres), se fait sentir lors du calcul des paramètres cinétique sur un réacteur bien plus grand. La Figure V.4, à droite, donne la figure de convergence des paramètres cinétiques en fonction du cycle pour un réacteur actuel du parc français de palier N4 1450 MWe. Le cycle IFP semble être plus grand, environ 15 générations, et traduit bien l'influence de la première harmonique du flux sur la convergence des IFP.

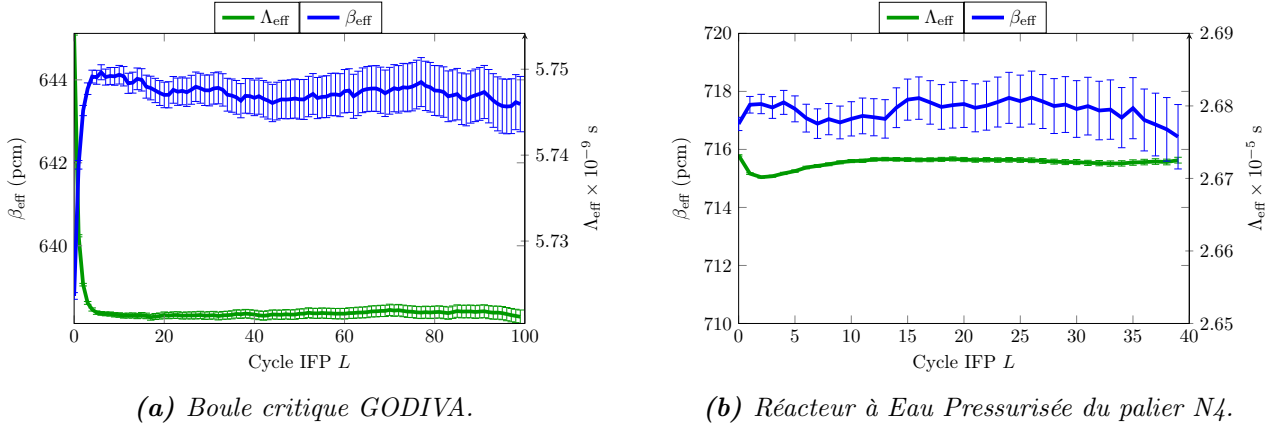


FIGURE V.4 – Les paramètres β_{eff} et Λ_{eff} en fonction de la longueur du cycle L . Les barres d'erreur représentent une incertitude statistique à 1σ .

V.D.3 Corrélations Inter-Génération

Dans la génération des scores Monte Carlo, on admet généralement que chaque estimation est, à chaque génération, indépendante des estimations passées et qu'elle est issue d'un processus stationnaire (*i.e.* après convergence des sources de fission). Or l'algorithme des itérations de la puissance introduit bel et bien des corrélations entre les scores de chaque génération, qu'ils soient locaux ou globaux. La non-prise en compte de ces corrélations est susceptible de mener à une sous-estimation des écart-types des différents scores. L'algorithme des paramètres cinétiques IFP introduit dans TRIPOLI-4[®] génère un nouveau cycle IFP à chaque génération, ce qui peut mener à une forte corrélation entre les générations pour deux raisons principales :

1. Les fissions d'une génération g initialisent les sources de la génération $g + 1$.
2. Les fissions d'une génération g sont pondérées par leur importance calculée dans une génération $g + L$.

Dans le but de s'assurer que les liens existants entre estimations consécutives ont peu d'impact sur l'estimation des écarts types générés par la méthode IFP, N simulations indépendantes sont réalisées avec différentes graines. Pour chaque simulation $i \in N$, n cycle IFP sont réalisés, de manière à calculer pour chaque simulation i une moyenne x_{S_i} ,

$$x_{S_i} = \mathbb{E}[x_i] = \frac{\sum_{k=1}^n x_{i,k}}{n} \quad (\text{V.23})$$

et une variance $\sigma_{S_i}^2$,

$$\sigma_{S_i}^2 = \frac{\sum_{k=1}^n (x_{i,k} - x_i)^2}{n} \quad (\text{V.24})$$

Selon T. Ueki [25], il est possible de définir, la variance apparente en rassemblant les résultats des différentes simulations indépendantes,

$$\sigma_A^2 = \mathbb{E}[\sigma_{S_i}^2], \quad (\text{V.25})$$

ainsi que la variance réelle, recalculée à partir de chaque estimation indépendante,

$$\sigma_R^2 = \mathbb{E}[(x_S - \mathbb{E}[x_S])^2]. \quad (\text{V.26})$$

L'effet des corrélations entre générations est contenu dans $\sigma_{S_i}^2$, et par conséquent dans σ_A^2 , qui peut être sous-estimé (si les réalisations sont corrélées) ou sur-estimé (si les réalisations sont anti-corrélées). Le ratio $f = \sigma_R/\sigma_A$ est donc grossièrement représentatif des corrélations inter-génération. Plusieurs tests

ont été réalisés sur des configurations réacteurs de la Suite Alpha Rossi. Pour chacune des configurations $N = 1000$ simulations indépendantes sont lancées, chacune réalisant $n = 900$ cycles IFP. Le nombre de neutrons par génération est fixé à 500 de manière à accentuer les effets des corrélations inter-génération. Figure V.5, le ratio f est tracé en fonction de la longueur du cycle IFP. Pour le β_{eff} , f ne montre que de petites variations autour de l'unité, ce qui démontre un faible impact des corrélations inter-génération sur l'estimation de l'écart type. Le ratio f tracé pour les Λ_{eff} a tendance à augmenter lorsque les cycles IFP diminuent, ce qui traduit un possible biais dans l'estimation de l'écart type. Ce biais ne dépasse pas ici 10 %.

Ces benchmarks sont tous de petites tailles, ce qui implique qu'un petit nombre de neutrons par génération suffit à couvrir l'ensemble du cœur; de manière générale, les effets de corrélation sont accentués sur les cœurs de plus grande taille. Afin de s'assurer de ces potentiels effets de taille, analysons cette fois-ci les facteurs f pour un REP du parc français de palier N4 (cf. Fig. V.6) en utilisant $N = 100$ et $n = 900$ et différents nombres de neutrons par génération allant de $\mathcal{N} = 5 \cdot 10^2$ à $\mathcal{N} = 5 \cdot 10^4$. Les corrélations sur le β_{eff} sont faibles tandis que les corrélations sur le Λ_{eff} montent jusqu'à $f \simeq 1.6$ pour des petites valeurs du cycle. Ceci démontre que les faibles longueurs de cycle peuvent induire des corrélations : intuitivement la corrélation est plus grande entre la génération g et $g + L$ lorsque L est petit. Le facteur f est moins élevé pour le β_{eff} que pour le Λ_{eff} . En effet, les événements servant à calculer le facteur β_{eff} correspondent uniquement aux événements liés aux neutrons retardés, ce qui introduit un « degré de liberté » plus grand que pour les événements servant à calculer le temps de vie qui, eux, utilisent l'ensemble de fission sans « filtre » supplémentaire. Les figures obtenues ne semblent pas être dépendantes du nombre de neutrons par génération comme nous le pensions, ce qui indique que les corrélations sont véhiculées par la pondération par l'importance et non pas par les sites de fission. En tout état de cause, les corrélations sont faibles pour des longueurs de cycle convenablement choisies.

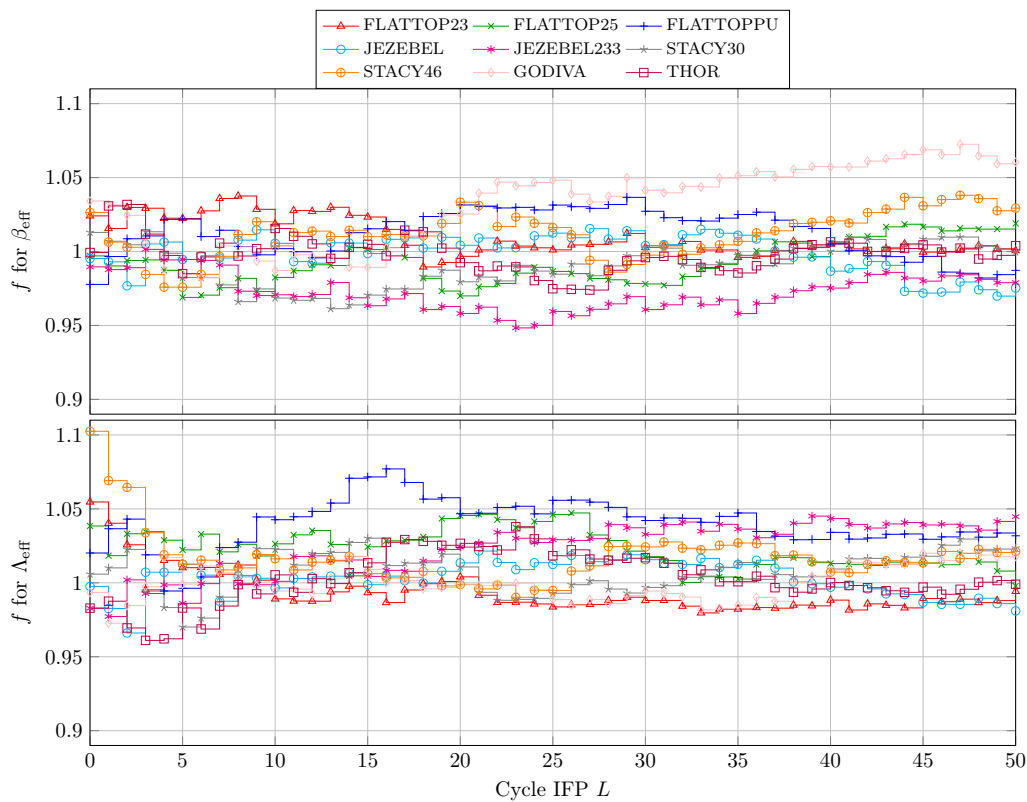


FIGURE V.5 – Tracé du facteur f reflétant l'effet des corrélations inter-génération sur les estimateurs du β_{eff} (haut) et du Λ_{eff} (bas) pour certaines configurations de réacteurs reprises à la Suite Alpha. L'écart à la référence $f \simeq 1$ est indicateur de grande (anti-)corrélations.

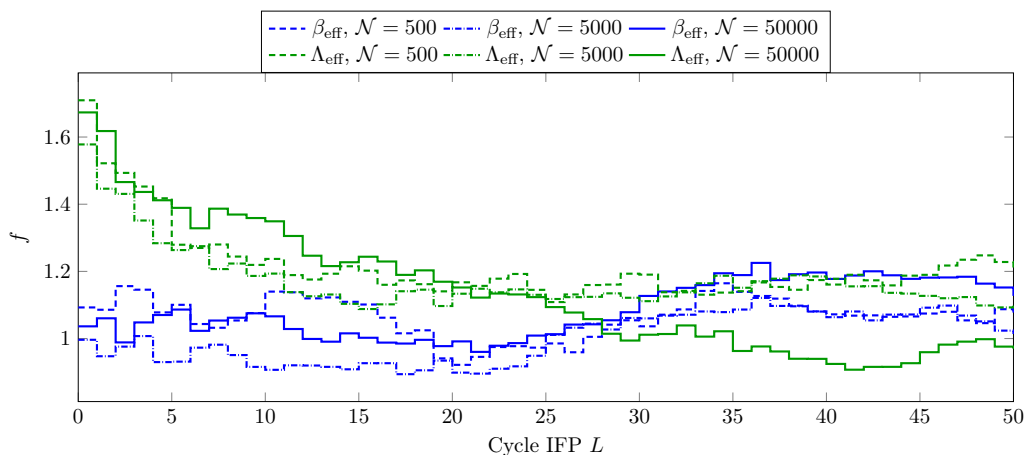


FIGURE V.6 – Tracé du facteur f reflétant l'effet des corrélations inter-générationnelles sur les estimateurs du β_{eff} (à gauche) et du Λ_{eff} (à droite) pour le réacteur à eau légère de puissance de type N_4 . L'écart à la référence $f \simeq 1$ est indicateur de grande (anti-)corrélations.

Bilan du Chapitre

Théorie : Paramètres Cinétiques Effectifs

Les paramètres cinétiques sont essentiels à la démonstration de sûreté d'un réacteur puisqu'en aucun cas la réactivité ne doit excéder la fraction des neutrons retardés β .

Les paramètres cinétiques effectifs sont nécessaires afin de comparer calculs et mesures. Leur définition « effective » est la plus adéquate pour ces comparaisons et se rapproche des expressions des sensibilités calculées précédemment. Par exemple, le poids des barres de contrôle est souvent évalué à l'aide d'un « réactimètre » en prenant pour base des paramètres cinétiques calculés.

Implémentation de la Méthode IFP

La Méthode IFP, déjà éprouvée dans d'autres codes dans le même but, a été implémentée dans TRIPOLI-4[®]. Elle permet le calcul des paramètres cinétiques effectifs avec rigueur, à moindre coût et de façon simplifiée pour l'utilisateur grâce à deux évolutions principales :

- Le commencement d'un nouveau cycle lors de chaque nouvelle génération.
- La possibilité d'obtenir directement dans la sortie de code, la figure de convergence en fonction de la longueur du cycle IFP.

Les aspects de *vérification* (cas analytiques) et de *validation* (comparaisons au code MCNP) de la méthode ont été soignés. Il a même été vérifié que les corrélations inter-génération ne biaisaient pas notre estimation de l'écart type.

Perspectives

Pour compléter cette étude, il serait intéressant d'analyser la dépendance des paramètres cinétiques au placement du détecteur dans le cœur : lorsque la réactivité est négative les paramètres cinétiques dépendent de la position de celui-ci. Une telle étude permettrait d'élucider certaines problématiques expérimentales.

Bibliographie

- [1] P. REUSS. *Précis de neutronique*. EDP Sciences, 2012 (cf. p. 143).
- [2] G. KEEPIN. *Physics of nuclear kinetics*. Addison-Wesley series in nuclear science and engineering. Addison-Wesley Pub. Co., 1965 (cf. p. 143, 149).
- [3] K. OTT et R. NEUHOLD. *Introductory nuclear reactor dynamics*. American Nuclear Society, 1985 (cf. p. 144).
- [4] A. F. HENRY. “The Application of Reactor Kinetics to the Analysis of Experiments”. In : *Nuclear Science and Engineering* 52.3 (1958) (cf. p. 144).
- [5] G. PERRET. “Amélioration et développement des méthodes de détermination de la réactivité - Maîtrise des incertitudes associées”. Thèse de doct. Université de Grenoble, 2003 (cf. p. 144, 145, 149).
- [6] J. LEWINS. *Importance*. Pergamon Press, Oxford, 1965 (cf. p. 144).
- [7] J. KOCLAS. *Neutronic Analysis of Reactor*. <https://canteach.candu.org/Content%20Library/20043601.pdf>. 1998 (cf. p. 145).
- [8] G. TRUCHET et al. “Computing adjoint-weighted kinetics parameters in Tripoli-4® by the Iterated Fission Probability method”. In : *Annals of Nuclear Energy* 85 (2015), p. 17–26 (cf. p. 145, 148, 149).
- [9] D. P. GRIESHEIMER et T. P. GOTER. “Estimating the Effective Neutron Generation Time with Monte Carlo Correlated Sampling”. In : *SNA + MC 2015, Nashville, USA*. 2002 (cf. p. 146).
- [10] B. KIEDROWSKI. *Adjoint Weighting for Continuous- Energy Monte Carlo Radiation Transport*. University of Wisconsin–Madison, 2009 (cf. p. 146).
- [11] C. M. PERFETTI. “Advanced Monte Carlo Methods for Eigenvalue Sensitivity Coefficient Calculations”. Thèse de doct. Université du Michigan, 2006 (cf. p. 146).
- [12] J. F. BRIESMEISTER. “MCNP : A General Monte Carlo N-Particle Transport Code”. In : (1993) (cf. p. 146).
- [13] S. M. BROWMAN. “SCALE 6 : Comprehensive Nuclear Safety Analysis Code System”. English. In : *Nuclear Science And Technology* 172.2 (2011), p. 126–148 (cf. p. 146).
- [14] J. LEPPANEN. “The Serpent Monte Carlo code : Status, development and applications in 2013”. In : *Annals of Nuclear Energy* 82 (2015), p. 142–150 (cf. p. 146).
- [15] Y. NAUCHI et T. KAMEYAMA. “Proposal of Direct Calculation of Kinetic Parameters β_{eff} and Based on Continuous Energy Monte Carlo Method”. In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 42.503 (2005) (cf. p. 146).
- [16] B. C. KIEDROWSKI. *Analytic, Infinite-Medium Solutions for Point Reactor Kinetics Parameters and Reactivity Perturbations*. LA-UR-10-01803, 2010 (cf. p. 148).
- [17] B. MONTAGNINI et V. PIERPAOLI. “The time-dependent rectilinear transport equation”. In : *Transport Theory and Statical Physics* 1.1 (1955) (cf. p. 149).
- [18] G. BELL et S. GLASSTONE. *Nuclear reactor theory*. Van Nostrand Reinhold Co., 1970 (cf. p. 149).

- [19] R. MOSTELLER et B. KIEDROWSKI. “The Rossi-Alpha Validation Suite for MCNP”. In : *International Conference on Nuclear Criticality 2011*. 2011 (cf. p. 149, 152).
- [20] B. C. KIEDROWSKI. *Theory, Interface, Verification, Validation, and Performance of the Adjoint-Weighted Point Reactor Kinetics Parameter Calculations in MCNP*. LA-UR-10-01700, 2010 (cf. p. 149).
- [21] B. RICHARD. “Mesures de perturbations sur le réacteur CALIBAN”. Thèse de doct. Université Paris-Sud, 2013 (cf. p. 150).
- [22] OCDE/NEA. *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. NEA/NSC/DOC(95)03. 2012 (cf. p. 151).
- [23] P. CASOLI, N. AUTHIER et A. CHAPELLE. “Determination of kinetic parameters of the caliban metallic core reactor from stochastic neutron measurements”. In : *PHYSOR 2012, Knoxville, USA*. 2012 (cf. p. 151).
- [24] A. SANTAMARINA et al. “Calculation of LWR β_{eff} kinetic parameters : Validation on the MIS-TRAL experimental program”. In : *Annals of Nuclear Energy* 48 (2012), p. 51–59 (cf. p. 151).
- [25] T. UEKI. “Error estimations and their biases in Monte Carlo eigenvalue calculations”. In : *Nuclear Science and Engineering* 1.125 (1997) (cf. p. 154).

Chapitre VI

Conclusions

Sommaire

VI.A Rappels et Conclusions des Chapitres	163
VI.A.1 Du Calcul des Sensibilités et des Incertitudes	163
VI.A.2 Du Calcul Exact des Perturbations de la Réactivité	163
VI.A.3 Du Calcul de Flux Adjoint ou d'Intégrales Pondérées par l'Adjoint	164
VI.A.4 Du Calcul des Paramètres Cinétiques	164
VI.B Perspectives	165
VI.B.1 Perspectives de Développements	165
VI.B.2 Perspectives d'Applications	165

VI.A Rappels et Conclusions des Chapitres

Dans notre chapitre introductif nous nous étions fixés des objectifs répondant à plusieurs problématiques. Pour conclure ce document, nous proposons de reprendre une à une ces problématiques.

VI.A.1 Du Calcul des Sensibilités et des Incertitudes

Problématique 1 : Le code Monte Carlo du transport des neutrons TRIPOLI-4[®], développé au CEA, ne permet pas le calcul des sensibilités du facteur de multiplication moyen des neutrons, k_{eff} , aux nombreuses données nucléaires, ou à d'autres types de perturbations, de manière exacte et aisée pour l'utilisateur.

La première problématique concernait le calcul des sensibilités du k_{eff} aux données nucléaires. Ces sensibilités correspondent au calcul de la variation du k_{eff} au « premier ordre », c'est-à-dire une variation du k_{eff} induite par une perturbation infinitésimale des données nucléaires de base. Le chapitre sur les méthodes de perturbations en Monte Carlo (*cf.* Chap. III) a donné quelques exemples de méthodes actuellement utilisées dans d'autres codes de transport Monte Carlo et a permis de développer une nouvelle méthode, la Méthode CEP pour *Collision-based Exact Perturbation*. C'est cette méthode que nous avons appliquée et validée dans le chapitre IV en s'appuyant sur des calculs déterministes poussés et des résultats du code concurrent MCNP obtenus dans le cadre de notre participation à un benchmark international. Notre participation détaillée à ce benchmark de l'UACSA, OCDE phase III-3 est disponible dans une publication à la conférence ICNC 2015. En ce qui concerne les temps de calcul, ils sont similaires à ceux de la méthode des échantillons corrélés qui était déjà implémentée dans le code TRIPOLI-4[®]. La méthode CEP permet, de plus, l'évaluation des faibles coefficients de sensibilités avec exactitude (*e.g.* la sensibilité à la fission du ²⁴⁰Pu), des sensibilités à la multiplication des neutrons par fission ν , à leur spectre χ_f , ou aux distributions de probabilité de renvoi angulaire des sections doublement différentielles. De manière générale, ces développements vont permettre une évaluation plus juste des sensibilités en remplaçant les modèles grossiers qui étaient alors utilisés dans les codes déterministes et donc, *in fine*, une évaluation plus juste des incertitudes.

VI.A.2 Du Calcul Exact des Perturbations de la Réactivité

Problématique 2 : Aucun code Monte Carlo n'est en mesure de réaliser un calcul de référence sous des contraintes de temps raisonnables, des expériences d'oscillations dans MINERVE. Ces expériences se caractérisent par une forte perturbation locale du flux de neutrons mais par une faible perturbation globale de réactivité.

La méthode CEP se révèle plus complexe dans sa mise en œuvre que les méthodes concurrentes (*e.g.* la méthode CEP utilise deux étapes de calcul distinctes et nécessite un stockage potentiellement important), principalement parce qu'elle a été développée dans l'objectif de satisfaire également à notre seconde problématique : le calcul exact des perturbations de réactivité. Dans ce domaine, la méthode CEP n'a pas d'équivalent. Elle est capable d'estimer avec une bonne précision relative les plus petits effets. A contrario, elle aura des difficultés à converger en absolu sur une perturbation de grande amplitude, mais présente tout de même l'avantage de fournir une décomposition des effets par isotope, par réaction ou bien par énergie. Bien que dans leur version actuelle les développements présentent certaines limitations (impossibilité d'utiliser les tables de probabilité du domaine non résolu ou de calculer des effets liés aux variations des sections de renvois angulaires), nous espérons en produire une version définitive qui, en plus de corriger ces défauts, bénéficiera du retour des premiers utilisateurs. Cette méthode a déjà permis l'interprétation des programmes CERES (réacteurs DIMPLE et MINERVE) et SENA (réacteur MINERVE) et a fait l'objet de deux publications en conférence (SNA+MC 2013 et

PHYSOR 2014). Elle a été utilisée afin de confirmer les calculs de différence des valeurs propres d'interprétations de coefficient de bore soluble et de poids d'un crayon erbié dans EOLE. Elle sera également utilisée prochainement dans l'interprétation du programme MAESTRO (réacteur MINERVE). Des résultats arrivés trop récemment pour être présentés dans ce document, confirment les capacités de la méthode à décomposer l'effet de réactivité induit par l'évolution sous irradiation de la composition de cellules REL/UOX, REL/MOX et RNR sur un ensemble conséquent d'isotopes ($\sim 150 - 800$).

Parallèlement à ces lourds développements C++, la méthode BBEP pour *Black Body Exact Perturbation*, (cf. Sec. III.C.3) permet l'évaluation exacte de l'effet global sur la réactivité de perturbations locales, en suivant une procédure et un post-traitement des résultats à base de scripts Python. Elle est donc directement utilisable dans de nombreux codes Monte Carlo moyennant un usage avancé de leurs fonctionnalités. Tout comme la méthode CEP, la méthode BBEP convient à l'estimation des petits effets qui doivent être calculés pour interpréter les expériences réalisées dans le réacteur MINERVE. Nous avons aussi démontré que son champ d'application pouvait être plus large (e.g. calcul d'un effet de vidange). La méthode BBEP n'introduit pas d'hypothèses autres que celles généralement admises dans les calculs Monte Carlo et présente une efficacité équivalente à celle de la méthode CEP.

VI.A.3 Du Calcul de Flux Adjoint ou d'Intégrales Pondérées par l'Adjoint

Problématique 3 : Aucun code de production Monte Carlo n'est en mesure de réaliser un calcul de flux adjoint de référence.

Avant de pouvoir comprendre et appliquer les méthodes CEP et BBEP, il était nécessaire d'approfondir notre notion du flux adjoint ainsi que de dresser un état de l'art des différentes méthodes de calcul (cf. Chap. II). Les schémas déterministes qui consistent à transposer les matrices des opérateurs de l'équation de Boltzmann ne peuvent être appliqués en Monte Carlo sans développements conséquents. C'est pourquoi l'importance d'une source a été calculée en suivant le principe de la probabilité itérée de fission (IFP); cette IFP correspond à la proportion de la puissance asymptotique pouvant être attribuée à cette source. La méthode AIWS, pour *Arbitrary IFP-Weighted Source*, a été implémentée dans TRIPOLI-4[®] (selon une idée de Y. NAUCHI) de manière à permettre le calcul de flux adjoint de référence ou la pondération par le flux adjoint de toute source décrite par l'utilisateur. Les bons accords obtenus lors de la vérification et de la validation font de cette nouvelle méthode un moyen fiable d'estimation des scores pondérés par l'adjoint. Les possibilités offertes sont nombreuses puisque tout produit intégré $\langle \Phi^\dagger S \rangle$ du flux adjoint Φ^\dagger par une source S peut être calculé, si tant est que la source S puisse être définie par l'utilisateur.

VI.A.4 Du Calcul des Paramètres Cinétiques

Problématique 4 : Le code Monte Carlo TRIPOLI-4[®] n'est pas en mesure de calculer les paramètres cinétiques β et Λ dans leur forme pondérée par le flux adjoint (dite effective), soit β_{eff} et Λ_{eff} .

Nous avons ensuite implémenté la Méthode IFP dans le but de calculer les paramètres cinétiques dits « effectifs » (cf. Chap. V). Les bons accords obtenus avec le code MCNP (qui est un des précurseurs de cette méthode) permettent de valider notre implémentation. La cohérence entre les calculs et les mesures est bien meilleure que celle obtenue avec les anciens estimateurs de TRIPOLI-4[®], qui n'étaient alors pas pondérés par le flux adjoint fondamental et qui ne pouvaient alors pas être réellement comparés à la mesure. Ces travaux ont donné lieu à une publication parue dans *Annals of Nuclear Energy* en 2015.

VI.B Perspectives

VI.B.1 Perspectives de Développements

Dans ce travail de thèse, nos efforts se sont concentrés sur la création d'une méthode capable de calculer à la fois des différences de réactivité de manière exacte (en toute circonstance) et des sensibilités du k_{eff} aux données nucléaires. Grâce à l'introduction des méthodes **AIWS**, **CEP**, **BBEP** et **Méthode IFP** dans le code **TRIPOLI-4**[®], nous avons réussi à remplir l'ensemble des objectifs que nous nous étions fixés. Cependant, nous voyons plusieurs pistes d'évolution évidentes à notre travail :

- La première concerne un aspect d'automatisation et d'aide au réglage des méthodes **CEP** et **BBEP** qui nécessitent actuellement une bonne compréhension des effets à calculer et une bonne maîtrise du code **TRIPOLI-4**[®]. Un outil de vérification des paramètres serait également d'une grande aide pour les utilisateurs non-avertis.
- La méthode **CEP** a montré quelques limitations quant à la convergence des effets des diffusions élastiques. L'approximation Semi-MultiGroupe (**SMG**) permet de résoudre ces problèmes mais introduit parfois un biais conséquent. Une évolution de l'approximation **SMG** prenant en compte les dimensions angulaires du flux est en cours de développement et permettra certainement de corriger une grande partie des biais. Pour interpoler le flux adjoint à l'intérieur des mailles, nous avons développer en **C++** une interpolation cubique à 6 dimensions.

Un flux adjoint multigroupe permet aussi l'estimation « au vol » des sensibilités ou des perturbations exactes : notre article dans **SNA + MC 2013** présentait déjà ce type de calcul que nous avons par la suite abandonné et choisi de ne pas développer dans ce manuscrit. En se limitant au premier ordre, la méthode **CLUTCH** est une évolution de ce principe puisque la simulation du transport des particules jusqu'à leur fission permet de ne stocker qu'un flux adjoint moyen par fission dont les variations sont beaucoup plus régulières.

- Afin de limiter le stockage des données, certaines sections efficaces pourront être tabulées sur maillage très fin (> 10000 groupes par exemple) plutôt que stockées de manière ponctuelle en chaque collision. Pour les noyaux non-résonnants, cette approximation est entièrement valide.
- La **Méthode IFP** que nous avons implémentée pour calculer les paramètres cinétiques effectifs peut permettre une évaluation simplifiée pour l'utilisateur des sensibilités du k_{eff} aux données nucléaires. Notre implémentation mériterait donc d'être étendue dans une prochaine version du code **TRIPOLI-4**[®] au calcul des sensibilités.
- A notre sens, le travail le plus utile à entreprendre concerne le calcul des sensibilités généralisées dont les résultats les plus prometteurs semblent avoir été obtenus via une évolution de la méthode des *échantillons corrélés* dans le code **SERPENT**.

VI.B.2 Perspectives d'Applications

Les perspectives offertes par ce travail concernent de nombreuses applications, en voici une liste non-exhaustive :

- L'obtention des sensibilités aux spectres de fission ou aux distributions de renvoi angulaire ouvre la voie à la propagation de leurs incertitudes et donc à un retour plus précis sur les données nucléaires. Ces aspects sont pour l'instant encore peu étudiés.
- Les mesures d'effets en réactivité infinitésimaux par la méthode d'oscillation de petits échantillons au centre de **MINERVE** pourront et devront être interprétées dorénavant en trois dimensions avec **TRIPOLI-4**[®]. Ainsi, les calculs seront totalement affranchis des nombreuses approximations déterministes (*e.g.* approximation multigroupe, réseau réduit, motif 2D, etc.) qui étaient nécessaires

jusqu' alors dans le but d'interpréter ces mesures. Une telle simulation Monte Carlo permet d'identifier, avec confiance, les écarts calculs/expériences de manière à réaliser un retour précis sur les données nucléaires investiguées.

- Les profils de sensibilités des benchmarks expérimentaux ICSBEP pourront désormais être calculés afin de réaliser les études de représentativité/transposition en sûreté-criticité.
- L'extension de la méthode BBEP aux calculs exacts de perturbations généralisées, peut permettre le calcul exact de certaines expériences à venir dans le réacteur MINERVE où la variation de flux à faible distance de la canne d'oscillation est prévue d'être mesurée. Une méthode perturbative a plus de change de converger sur l'effet au regard des variations minimales attendues.
- Le stockage très complet réalisé par la méthode CEP peut permettre la validation détaillée des codes déterministes. Notamment il est envisagé dans le cadre de la VVUQ du code APOLLO3 de choisir l'un des états de la perturbation (référence ou perturbé) dans le code déterministe et l'autre dans le code Monte Carlo. La perturbation exacte de réactivité entre le code déterministe et stochastique peut alors être analysée en détails et attribuée par groupe aux différents taux de réaction.
- En offrant la possibilité de calculer l'intégrale d'une source S pondérée par le flux adjoint, la méthode AIWS permet d'évaluer un certain nombre d'intégrales nécessaires à l'interprétation des mesures. Par exemple la mesure du β_{eff} par la méthode de la source de californium nécessite d'évaluer les intégrales :

$$\langle \Phi^\dagger, S_{\text{Cf}} \rangle \tag{VI.1}$$

$$\langle \Phi^\dagger, \mathcal{P}\phi \rangle \tag{VI.2}$$

où S_{Cf} représente les productions de neutrons de la source en californium, ϕ est un flux solution d'une équation hétérogène à source, \mathcal{P} l'opérateur de production par fission et Φ^\dagger le flux adjoint critique fondamental. Ce type d'évaluation n'est rigoureusement possible qu'avec un modèle 3D Monte Carlo et la méthode AIWS.