PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Utilisation de sources et d'adjoints DRAGON pour les calculs TRIPOLI
Auteur: Author:	Corentin Camand
Date:	2012
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Camand, C. (2012). Utilisation de sources et d'adjoints DRAGON pour les calculs TRIPOLI [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/961/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/961/
Directeurs de recherche: Advisors:	Guy Marleau, & Hadrien Leroyer
Programme: Program:	Génie énergétique

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

UTILISATION DE SOURCES ET D'ADJOINTS DRAGON POUR LES CALCULS TRIPOLI

CORENTIN CAMAND
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE ÉNERGÉTIQUE)
NOVEMBRE 2012

© Corentin Camand, 2012.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

UTILISATION DE SOURCES ET D'ADJOINTS DRAGON POUR LES CALCULS TRIPOLI

présenté par : CAMAND Corentin
en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. HÉBERT Alain, D.Ing., président
M. MARLEAU Guy, Ph.D., membre et directeur de recherche
M. LEROYER Hadrien, M.Sc.A., membre et codirecteur de recherche
M. GIRARDI Enrico, Doct., membre

à mes grand-parents,

REMERCIEMENTS

Je souhaite tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Guy Marleau, pour sa disponibilité, son aide précieuse et ses conseils tout au long de mon cursus. Je salue également l'ensemble des membres de l'IGN pour la bonne ambiance de travail. Je remercie tout particulièrement Cédric Laville pour ses nombreux conseils, ainsi que Mehdi Majoub, Alexandre Landry, Najoua Bejaoui, Haykel Raouafi, Geneviève Harrisson et Baptiste Delattre, auxquels je souhaite le meilleur pour la suite. Je remercie également mes professeurs, et Lyne Dénommé et Joanne Sirois pour leur disponibilité.

Ce projet a été l'occasion pour moi d'effectuer un stage au sein du département SINETICS d'EDF. Je souhaite remercier Hadrien Leroyer, mon maitre de stage et codirecteur de recherche, qui a permis la mise en place de ce stage, ainsi que pour son écoute et ses conseils. Je remercie également les autres membres du département pour leur accueil et les échanges que j'ai pu avoir avec eux, et les stagiaires qui ont contribué à l'excellente ambiance. Je remercie notamment Matthieu Guillo, Michel Tommy-Martin et Cécile-Aline Gosmain pour leur aide.

Je tiens aussi à remercier Alain Hébert et Enrico Girardi qui ont accepté de faire partie du jury.

Je remercie enfin Anaëlle qui, par sa présence au quotidien et ses encouragements, m'a permis de surmonter les difficultés, et mes parents pour leur soutien sans faille.

RÉSUMÉ

La simulation numérique est un élément essentiel de la physique des réacteurs nucléaires pour comprendre le comportement des neutrons dans et en dehors d'un réacteur nucléaire. Il s'agit de résoudre l'équation de transport des neutrons afin de connaitre le flux neutronique et les interactions des neutrons avec la matière. On utilise des codes de calculs pour la résoudre dans le cadre de problèmes de criticité, où l'on est en présence de milieux multiplicateurs de neutrons, et de radioprotection. On distingue deux grandes familles de méthodes numériques pour résoudre cette équation. Les méthodes déterministes résolvent directement l'équation de transport en procédant à certaines approximations. Le domaine énergétique est divisé groupes d'énergie, on utilise un maillage spatial pour traiter la géométrie, l'opérateur de transport est parfois dégradé. Ces approximations engendrent une erreur inhérente. Ces méthodes offrent cependant de bonnes performances en terme de temps de calcul. Les méthodes Monte Carlo ou stochastiques simulent un très grand nombre de neutrons et leurs interactions avec la matière en minimisant les approximations. L'énergie peut être traitée de manière continue ou multigroupe. Les grandeurs calculées sont des variables aléatoires, et les résultats obtenus comportent une incertitude statistique. Il faut simuler un très grand nombre de particules pour que le calcul converge et que les résultats soient suffisamment précis. De ce fait, les temps de calculs de ces méthodes peuvent être très longs.

Cette étude vise à mettre en place un chainage d'un code déterministe vers un code stochastique. Nous voulons améliorer la convergence des calculs Monte Carlo réalisés avec le code TRIPOLI. Nous désirons utiliser des données calculées par le code déterministe DRAGON afin de les implémenter en entrée du calcul TRIPOLI. Nous allons développer deux méthodes, chacune adaptée pour un type de problème différent. La première méthode a pour principe de calculer dans DRAGON des distributions de sources de neutrons et de les insérer en entrée d'un calcul de criticité réalisé avec TRIPOLI. L'objectif est d'accélérer la convergence des sources de neutrons, et ainsi de sauver les premiers cycles de particules qui ne sont pas significatifs. La deuxième méthode a pour but d'utiliser le flux adjoint généré par DRAGON comme fonction d'importance dans un calcul TRIPOLI de protection. L'objectif est d'améliorer le facteur de qualité de la réponse d'un détecteur placé loin de la source de neutrons.

La méthode d'initialisation des sources d'un calcul TRIPOLI en mode criticité par des sources DRAGON a requis la création dans DRAGON d'un module permettant de générer une liste de sources selon la syntaxe d'un jeu de données TRIPOLI, incluant l'intensité de

chaque source, sa position et le domaine énergétique qu'elle couvre. Nous avons testé cette méthode sur un assemblage REP-UOX 17×17 et sur un modèle réduit de 3×3 crayons. Nous avons tout d'abord vérifié que nos modèles DRAGON et TRIPOLI donnaient des résultats proches dans le but de fournir à TRIPOLI des distributions de sources cohérentes. Nous avons ensuite testé l'implémentation des sources de neutrons DRAGON dans TRIPOLI pour le calcul du flux et du facteur de multiplication effectif (k_{eff}). Nous observons des écarts type légèrement meilleurs dans les premiers cycles, de l'ordre d'une dizaine de pcm, sur les k_{eff} des simulations utilisant des sources DRAGON par rapport à des calculs où la source initiale est peu précise. De même, la convergence du flux sur les premiers cycles est un peu améliorée. Cependant, on observe quelques incohérences, notamment certains flux qui convergent moins rapidement, avec moins de neutrons par cycle, lorsque la source DRAGON est utilisée. De plus, l'utilisation d'un trop grand nombre de sources dans TRIPOLI est trop lourde à mettre en place. Il semble donc que notre méthode soit perfectible afin d'améliorer d'avantage la convergence et son implémentation. L'étude de géométries plus complexes, et ayant des distributions de sources moins uniformes (notamment l'ajout de MOX ou de combustible irradié) pourraient mener à de meilleures performances lors de l'utilisation de notre méthode.

Concernant le biaisage du calcul TRIPOLI par l'adjoint DRAGON, un module de création de cartes d'importances lisibles par TRIPOLI a été mis en place dans DRAGON. Nous avons testé notre méthode sur un problème source-détecteur de protection en une dimension. Après avoir vérifié la cohérence de nos modèles DRAGON et TRIPOLI, nous avons biaisé les calculs TRIPOLI avec l'adjoint DRAGON d'une part, et avec l'option INIPOND interne à TRIPOLI d'autre part. Nous avons observé une bonne amélioration du facteur de qualité du calcul biaisé avec l'adjoint de DRAGON. Cependant, le biaisage par INIPOND s'est souvent révélé plus performant. Alors que l'utilisation d'INIPOND semble très sensible au découpage énergétique des cartes d'importances, l'utilisation du flux adjoint de DRAGON l'est beaucoup moins. En revanche, INIPOND est plus stable que l'adjoint déterministe en ce qui concerne le maillage spatial de pondération. L'objectif initial d'améliorer le facteur de qualité d'un calcul TRIPOLI à l'aide de l'adjoint DRAGON par rapport à un calcul non biaisé est tout de même atteint.

ABSTRACT

Numerical simulation is an essential part of reactor physics in order to understand the behaviour of neutrons inside and outside nuclear reactors. The objective is to solve the neutron transport equation in order to know the neutron flux and the interactions between neutrons and materials. We use neutronic simulation codes in order to solve this equation for criticallity problem, where we have a neutron multiplying environnement, and shielding problems. There are two different types of numerical simulation techniques. Deterministic methods solve directly the transport equation using some approximations. The energy domain is devided in regions called groups, we use a spatial mesh for the geometry treatment, transport operator may also be simplified. Those approximations invole an inherent error. However these methods provide high computation time performances. Monte Carlo or stochastic methods follow explicitly a large number of neutrons as they travel through materials minimizing approximations. Continuous-energy and multigroup treatment are both available. Quantities calculated are random variables to which are associated statistical error called standard deviations. We have to simulate a very large number of neutrons if we want the calculation to converge and the results to be precise enough. As a matter of fact, computation time of these methods can be excissively large and represent their main weakness.

The objective of this study is to set up a chaining method from a deterministic code to a Monte Carlo code, in order to improve the convergence of Monte Carlo calculations performed by the code TRIPOLI. We want to use datas calculated by the deterministic code DRAGON and use them in TRIPOLI. We will develop two methods. The first one will calculate source distribution in DRAGON and implement them in TRIPOLI as initial sources of a criticallity calculation. The objective is to accelerate the convergence of the neutrons sources, and save the first batches that are usually non significant. The second method is to use of the adjoint neutron flux calculated by DRAGON as an importance function for Monte Carlo biaising in TRIPOLI. The objective is to improve the figure of merit of the detector response located far away of the neutron source.

The neutron source initialisation of a TRIPOLI calculation required to developthe developpement of a module in DRAGON that generates a list of sources in the TRIPOLI syntaxe, including for each source, its intensity, its position and the energy domain it covers. We tested our method on a complete 17×17 PWR-UOX assembly and on a reduced 3×3 model. We first verified that the DRAGON and TRIPOLI models were consistent in order to ensure that TRIPOLI receives a coherent source distribution. Then we tested the use of DRAGON

sources in TRIPOLI with neutron flux and the effective multiplying coefficient (k_{eff}). We observe slightly better standard deviations, of an order of 10 pcm, on k_{eff} for simulations using DRAGON sources distributions as compared to simulations with less precise initial sources. Flux convergence is also improved. However some incoherence were also observed in the results, some flux converging slower with DRAGON sources when fewer neutrons per batch are considered. In addition, a very large number of sources is too heavy to insert in TRIPOLI. It seems that our method is perfectible in order to improve implementation and convergence. Study of more complex geometries, with less regular sources distributions (for instance using MOX or irradiated fuel) may provide better performances using our method.

For biaising TRIPOLI calculations using the DRAGON adjoint flux we created a module that produces importance maps readable by TRIPOLI. We tested our method on a source-detector shielding problem in one dimension. After checking the coherence of DRAGON and TRIPOLI models, we biaised TRIPOLI simulations using the DRAGON adjoint flux, and using INIPOND, the internal biaising option of TRIPOLI. We observed a good improvement of the figure of merit of a calculation biaised with the DRAGON adjoint flux. However the use of INIPOND is often more efficient. INIPOND seems to be more sensitive to the energy mesh considered for biaising than the DRAGON adjoint flux, but INIPOND is more stable than the deterministic adjoint with respect to spatial mesh biaising. The initial objective of improving the figure of merit of a TRIPOLI calculation using the DRAGON adjoint flux is reached in this case.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iii

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES TABLEAUX xii

LISTE DES FIGURES xvi

LISTE DES ANNEXES xviii

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xix

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

1.1 Mise en contexte 1

1.2 Problématique 2

1.3 Structure du document 3

CHAPITRE 2 THÉORIE ET SIMULATION DU TRANSPORT NEUTRONIQUE . 4

2.1 Équation de transport et flux neutronique 4

2.1.1 Le flux neutronique 4

2.1.2 Équation de Boltzmann 5

2.1.3 L'équation adjointe de transport 6

2.2 Résolution stochastique de l'équation de transport 7

2.2.1 Quelques rappels mathématiques 8
2.2.2 L'algorithme Monte Carlo appliqué à la physique des réacteurs 9
2.2.3 Les estimateurs Monte Carlo 11
2.2.4 La convergence d'un calcul Monte Carlo 13
2.2.5 Les techniques de réduction de variance 15
2.3 Résolution déterministe de l'équation de transport 17
2.3.1 Formalisme multigroupe 17
2.3.2 Méthode des probabilités de collision 18
2.3.3 Résolution de l'équation adjointe dans DRAGON 20

CHAPITRE 3 PRÉSENTATION DU COUPLAGE ENTRE DRAGON ET TRIPOLI 22
3.1 Les codes utilisés 22
3.1.1 DRAGON : code de cellule déterministe 22
3.1.2 TRIPOLI : code Monte Carlo 23
3.2 Les deux approches d'accélération de convergence du calcul Monte Carlo envisagées 25
3.2.1 Accélération de la convergence des sources de neutrons 26
3.2.2 Biaisage du calcul Monte Carlo par l'adjoint déterministe 28
3.3 Conclusion 30

CHAPITRE 4 INITIALISATION DES SOURCES DE NEUTRONS MONTE CARLO PAR DES SOURCES DÉTERMINISTES 32
4.1 Mise en œuvre de la méthode 32
4.1.1 Structure de la liste de sources 32
4.1.2 Le module STR : 34
4.2 Présentation du problème traité : l'assemblage REP-UOX 35
4.2.1 Les assemblages REP-UOX complet et réduit 35
4.2.2 Discussions à propos des choix de modélisation 38
4.2.3 Étude comparative des modèles DRAGON et TRIPOLI 40

4.3 Test et validation de la méthode 49
4.3.1 Choix sur les distributions de sources 49
4.3.2 Tests de la méthode sur le facteur de multiplication effectif 50
4.3.3 Tests de la méthode sur le flux 56
4.3.4 Bilan de l'étude 62

CHAPITRE 5 BIAISAGE DES CALCULS MONTE CARLO PAR L'ADJOINT DÉTERMINISTE 63
5.1 Mise en œuvre de la méthode 63
5.1.1 Structure du fichier d'importances 64
5.1.2 Le module ITR : 64
5.2 Présentation du problème source-détecteur traité 66
5.2.1 Discussion autour des choix de modélisation 67
5.2.2 Étude comparative des modèles DRAGON et TRIPOLI 69
5.2.3 Justification du recours au biaisage 72
5.3 Test et validation de la méthode 74
5.3.1 Étude de l'impact de la discrétisation énergétique de l'importance . . . 75
5.3.2 Étude de l'impact de la discrétisation spatiale de l'importance 84
5.3.3 Bilan de l'étude 86

CHAPITRE 6 CONCLUSION 88
6.1 Synthèse des travaux 88
6.2 Limitations des solutions proposées et perspectives d'amélioration 90

RÉFÉRENCES 92

ANNEXES 94

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1 k_{eff} pour différentes sources initiales (10 000 neutrons par cycle) 40

Tableau 4.2 k_{eff} pour différentes sources initiales (100 000 neutrons par cycle) . . . 41

Tableau 4.3 Comparaison des k_{eff} calculés par DRAGON et TRIPOLI (ENDF/B-VI) 41

Tableau 4.4 Comparaison des k_{eff} calculés par DRAGON et TRIPOLI (JEFF3.1) . 42

Tableau 4.5 Comparaison des k_{eff} calculés par DRAGON et TRIPOLI (JEFF3.1) . 42

Tableau 5.1 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin . . 75

Tableau 5.2 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin 76

Tableau 5.3 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin (taux de collision) 77

Tableau 5.4 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin 77

Tableau 5.5 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin (taux d'absorption) 77

Tableau 5.6 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin . 79

Tableau 5.7 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin (flux neutronique) 79

Tableau 5.8 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin 80

Tableau 5.9 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin 81

Tableau 5.10 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin (flux neutronique) 81

Tableau 5.11 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin 82

Tableau 5.12 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin 82

Tableau 5.13 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin (flux neutronique) 82

Tableau 5.14 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier 84

Tableau 5.15 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier 84

Tableau 5.16 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (flux neutronique) 84

Tableau 5.17 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) 86

Tableau 5.18 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) 86

Tableau 5.19 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) 86

Tableau A.1 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin 94

Tableau A.2 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin (taux de collision) 94

Tableau A.3 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin 95

Tableau A.4 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin (taux d'absorption) 95

Tableau A.5 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin 96

Tableau A.6 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin (taux de collision) 96

Tableau A.7 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin 97

Tableau A.8 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin (taux d'absorption) 97

Tableau A.9 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes) 98

Tableau A.10 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes) (taux de collision) 98

Tableau A.11 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes) 99

Tableau A.12 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes) (taux d'absorption) 99

Tableau A.13 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) 100

Tableau A.14 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) (taux de collision) 100

Tableau A.15 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) 101

Tableau A.16 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) (taux d'absorption) 101

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Principe d'une simulation Monte Carlo de la vie d'un neutron 10

Figure 3.1 Flux dans un crayon REP en fonction du nombre de cycles et de la position en Z (axe de cellule) 27

Figure 4.1 Géométrie de l'assemblage REP 36

Figure 4.2 Géométrie de l'assemblage réduit 37

Figure 4.3 Découpages spatiaux d'une cellule 39

Figure 4.4 Distribution des flux et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage REP 44

Figure 4.5 Distribution des flux et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage réduit 45

Figure 4.6 Distribution des taux de collision et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage REP 47

Figure 4.7 Distribution des taux de collision et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage réduit 48

Figure 4.8 Évolution batch par batch des écarts type pour des simulations indépendantes du même problème 51

Figure 4.9 Évolution batch par batch des k_{eff} et des écarts entre les simulations initialisées par différentes sources de fission 52

Figure 4.10 Évolution batch par batch des écarts type (en pcm) pour les trois distributions initiales de sources 53

Figure 4.11 Évolution batch par batch des k_{eff}, des écarts type et des écarts entre les simulations initialisées par différentes sources de fission 55

Figure 4.12 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au coin de la géométrie 57

Figure 4.13 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au centre de la géométrie 58

Figure 4.14 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au coin de la géométrie 59

Figure 4.15 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule proche du centre de la géométrie 60

Figure 4.16 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au coin de la géométrie 61

Figure 5.1 Géométrie du problème source-détecteur étudié 66

Figure 5.2 Flux DRAGON et TRIPOLI 70

Figure 5.3 Écarts relatifs entre les flux rapide et thermique DRAGON et TRIPOLI 71

Figure 5.4 Erreurs statistiques relatives sur les flux rapide et thermique de TRIPOLI 73

Figure 5.5 Découpage énergétique à 5 groupes 75

Figure 5.6 Découpage énergétique à 9 groupes (premier découpage) 80

Figure 5.7 Découpage énergétique à 9 groupes (deuxième découpage) 82

LISTE DES ANNEXES

Annexe A Résultats de l'utilisation du biaisage pour les taux de réaction 94

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

REP Réacteur à eau pressurisée

UOX Oxyde d'uranium

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

En physique des réacteurs nucléaires, les calculs de neutronique permettent de concevoir des nouveaux systèmes, de réaliser des études de sûreté ou de suivi de fonctionnement. Ils sont réalisés par des outils informatiques appelés codes de calcul. Ceux-ci ont pour rôle de simuler le comportement des réacteurs, et de déterminer des grandeurs telles que le flux neutronique, des taux de réaction ou encore la réactivité. Ces outils se doivent d'être les plus fiables et les plus précis possibles. Ils sont de fait en perpétuelle évolution afin de tirer profit au maximum des capacités grandissantes des ordinateurs actuels. On distingue deux grands types de méthodes numériques utilisées dans les codes de calculs de physique des réacteurs.

Les méthodes déterministes consistent à discrétiser les variables spatiales, angulaires, et l'énergie. On résout ensuite l'équation de Boltzmann. Un certain nombre d'approximations sont effectuées : la géométrie est parfois simplifiée, on approxime l'opérateur de transport par l'opérateur de diffusion pour un réacteur complet, on traite l'énergie selon le formalisme multigroupe, on utilise une expansion des sections efficaces en polynômes de Legendre pour traiter l'anisotropie des chocs. Après simulation on connait l'état global des différents paramètres tels que le flux ou les taux de réaction dans l'espace des phases, aux erreurs numériques et de modélisation près.

L'approche stochastique est très différente. Les méthodes dites de Monte Carlo procèdent par simulation aléatoire du comportement individuel d'un très grand nombre de neutrons et par encaissement de certains événements. Leur comportement moyen est alors déduit par application du théorème central limite. À la fin de la simulation Monte Carlo on ne connait que les grandeurs qu'on a choisi de calculer. Celles-ci sont des variables aléatoires et sont associées à un écart type, donc à une erreur statistique.

Chacune de ces approches possède ses avantages et ses inconvénients. Les méthodes déterministes sont limitées sur la précision des calculs du fait de la discrétisation de l'espace des phases. Leurs performances peuvent s'avérer limitées sur des géométries très complexes où une bonne précision des calculs sera plus difficile à atteindre. Elles offrent cependant de bonnes performances concernant le temps de calcul. Les méthodes Monte Carlo permettent

d'éviter toute discrétisation de l'espace des phases, et donc de traiter plus facilement et plus précisément des géométries complexes, ainsi que de conserver la qualité des modèles physiques tels que les sections efficaces ou les lois d'interaction entre les neutrons et la matière. Cependant, il est nécessaire de simuler un très grand nombre de particules pour atteindre une bonne précision sur les grandeurs calculées. L'approche stochastique est donc très couteuse en temps de calcul.

Dans le cadre d'une utilisation industrielle du calcul de réacteurs, on favorise donc les codes déterministes pour simuler dans un premier temps une cellule ou un assemblage élémentaire, puis après homogénéisation de cette géométrie et une condensation à peu de groupes des données nucléaires, un réacteur complet. Cette procédure permet les calculs de conception et de suivi de réacteurs. On utilise des codes Monte Carlo pour réaliser des calculs de référence, et valider la précision des modèles déterministes considérés. Cependant, la précision et les possibilités de traiter des géométries plus complexes sont des arguments pour tenter d'accélérer les algorithmes Monte Carlo, leur principal point faible, et ainsi augmenter leur utilisation. Des méthodes de réduction de variance, qui permettent d'accélérer la convergence des calculs stochastiques, sont développées dans les codes Monte Carlo. Certaines d'entre-elles consistent en un couplage avec un code déterministe, afin de tirer profit des performances des deux types de méthodes, dans le cadre d'un biaisage Monte Carlo (Giffard (2000); Wagner et Haghighat (1998)) ou de l'accélération de la convergence des sources dans un calcul de criticité (Yun et Cho (2010); Jinaphanh et Miss (2012)).

Ce mémoire s'inscrit dans cette perspective de recherche. Il vise à mettre en place un chainage reliant le code de cellule déterministe DRAGON (Marleau *et al.* (2008)) et le code Monte Carlo TRIPOLI (Petit *et al.* (2008)). L'objectif de ce chainage est le suivant : d'une part il s'agit d'utiliser le flux adjoint déterministe calculé par DRAGON comme fonction d'importance dans un calcul TRIPOLI biaisé, et d'autre part d'utiliser les taux de production de neutrons donnés par DRAGON pour initialiser la distribution de sources de neutrons dans TRIPOLI.

1.2 Problématique

Les considérations précédentes permettent d'établir la problématique suivante :

> L'utilisation du flux adjoint calculé par DRAGON comme fonction d'importance et la distribution des taux de fission donnée par DRAGON comme distribution de sources initiales de neutrons permettent-elles d'accélérer de manière significative la convergence d'un calcul TRIPOLI ?

Le chainage envisagé met en place deux méthodes différentes, et chacune d'elle répond à des problématiques différentes.

- Les taux de productions de neutrons pour initialiser la distribution de sources est une solution envisagée pour traiter du problème de la convergence des sources de fission dans des calculs de criticité en milieu multiplicateur. Cette méthode doit permettre d'augmenter la précision des grandeurs d'intérêt lors des premiers cycles d'un calcul Monte Carlo de criticité, symbole d'une convergence plus rapide des sources de fission.
- L'utilisation du flux adjoint déterministe comme fonction d'importance d'un calcul Monte Carlo biaisé s'applique à des problèmes de radioprotection, où l'on cherche à connaitre la réponse de détecteurs éloignés des sources de particule. La mise en place de cette méthode doit permettre d'accélérer la convergence d'un calcul Monte Carlo tout en trouvant un meilleur compromis entre précision et temps du calcul, c'est-à-dire en augmentant la valeur d'une grandeur appelée facteur de qualité.

1.3 Structure du document

On traite dans le chapitre 2 des éléments théoriques qui permettent la compréhension des travaux réalisés dans ce mémoire : l'équation de Boltzmann, les méthodes Monte Carlo et les techniques de réduction de variance, les méthodes déterministes et leurs approximations.

Le chapitre 3 introduit plus en détail les codes de calculs utilisés lors de ce projet : le code Monte Carlo TRIPOLI et le code déterministe DRAGON. Le principe et la mise en place du couplage entre ces deux codes est ensuite exposée.

Dans le chapitre 4, nous présentons le problème source-détecteur étudié pour le test de la méthode de biaisage par l'adjoint déterministe. Après une étude comparative et une vérification de la cohérence des modèles réalisés sur DRAGON et TRIPOLI, les résultats des tests de la méthode sur cette géométrie sont analysés.

Le chapitre 5 suit la même logique que le précédent et présente l'assemblage REP utilisé pour le test et la validation de la méthode d'accélération de la convergence des sources de neutrons en utilisant une distribution initiale donnée par DRAGON.

Finalement, au chapitre 6 nous concluons et discutons des modifications futures qui pourront être considérées afin d'améliorer le chainage que nous avons proposé.

CHAPITRE 2

THÉORIE ET SIMULATION DU TRANSPORT NEUTRONIQUE

Le but de ce chapitre est de donner quelques rappels théoriques sur la simulation en physique des réacteurs. Nous présenterons dans un premier temps le flux neutronique et l'équation de Boltzmann qui décrit le transport des neutrons dans le réacteur. Nous introduirons ensuite les deux grandes familles de méthodes permettant de résoudre cette équation : les méthodes stochastiques et les méthodes déterministes.

2.1 Équation de transport et flux neutronique

2.1.1 Le flux neutronique

On représente de façon statistique la population neutronique dans un espace à 7 dimensions. Chaque neutron est représenté dans l'espace des phases à 6 dimensions par (Hébert (2009)) :

- sa position, décrite par le vecteur $\vec{r}$,
- sa vitesse, décrite par le vecteur $\vec{V_n}$. On utilise généralement la variable énergie $E = \frac{1}{2}m\|\vec{V_n}\|^2$ et la direction de propagation dans l'espace $\vec{\Omega} = \frac{\vec{V_n}}{V_n}$,

La septième dimension est le temps t, qui n'est pas pris en compte dans les calculs stationnaires tels que ceux qui seront présentés dans ce mémoire.

On représente ainsi comme une distribution la densité de neutrons $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$, telle que $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)d^3rdEd^2\Omega$ représente le nombre de neutrons au temps t compris dans le volume élémentaire d^3r autour du point $\vec{r}$, ayant une énergie comprise entre E et $E + dE$ et ayant la direction $\vec{\Omega}$ à l'angle solide $d^2\Omega$ près.

Afin de simplifier les choses, on utilise couramment en physique nucléaire une autre quantité : le flux neutronique angulaire défini comme :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = V_n.n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \sqrt{\frac{2E}{m}}n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \tag{2.1}$$

Le flux neutronique n'est pas une quantité mesurable en tant que telle. Il s'agit d'un outil mathématique qui permet de simplifier les équations de la neutronique. Il correspond à une distribution par rapport aux variables $\vec{r}$, E et $\vec{\Omega}$ et une fonction par rapport au temps t.

2.1.2 Équation de Boltzmann

L'équation de transport neutronique, ou équation de Boltzmann, est obtenue à l'état d'équilibre par un bilan de la population neutronique dans l'hyper-volume $d^3rdEd^2\Omega$ autour du point ($\vec{r}$, E, $\vec{\Omega}$) de l'espace des phases. Elle s'écrit de la manière suivante (Hébert (2009)) :

$$\Sigma(\vec{r},E)\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) + \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = Q(\vec{r},E,\vec{\Omega}) \tag{2.2}$$

- $\Sigma(\vec{r},E)\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega})$ correspond au nombre de neutrons quittant l'élément d'hyper-volume par l'ensemble des interactions possibles avec la matière,
- $\vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega})$ représente le terme de fuite des neutrons hors de l'élément de volume d^3r autour de $\vec{r}$,
- $Q(\vec{r},E,\vec{\Omega})$ représente l'ensemble des sources de neutrons. Il est composé d'un terme de diffusion, d'un terme de fission et éventuellement d'une source extérieure :

$$Q(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = Q_{\text{diffusion}}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) + Q_{\text{fission}}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) + S_{\text{ext}}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) \tag{2.3}$$

Le premier terme est appelé terme de diffusion. Il correspond aux collisions, sommées sur toutes les contributions possibles, qui aboutissent à l'arrivée d'un neutron dans l'hyper-volume. Il comprend les diffusions élastiques, inélastiques et inclut parfois les réactions (n,xn). Il s'écrit comme :

$$Q_{\text{diffusion}}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE'\Sigma_s(\vec{r},E\leftarrow E',\vec{\Omega}.\vec{\Omega}')\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}') \tag{2.4}$$

Le deuxième terme correspond aux neutrons produits par fission et est défini par :

$$Q_{\text{fission}}(\vec{r},E,\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J} \chi_j(E) \int_0^\infty dE'\nu\Sigma_{f,j}(\vec{r},E')\phi(\vec{r},E') \tag{2.5}$$

Ce terme de fission fait apparaitre plusieurs éléments :

- $\chi_j(E)$ représente le spectre de fission. Il s'agit de la densité de probabilité qu'une fission de l'isotope j produise un neutron d'énergie comprise en E et $E+dE$,
- $\nu\Sigma_{f,j}(\vec{r},E')$ est le produit du nombre moyen de neutrons produits par fission avec la section efficace macroscopique de fission de l'isotope j,
- $\phi(\vec{r},E')$ correspond au flux neutronique intégré sur toutes les directions $\vec{\Omega}$ en raison de l'isotropie des sources de fission,
- k_{eff} est le facteur de multiplication effectif par lequel on doit diviser le terme de fission pour conserver l'état stationnaire, en l'absence de source externe (il vaut 1 si des sources externes sont présentes).

Le facteur de multiplication effectif k_{eff} est le rapport entre les neutrons produits par fission en milieu fissile et les neutrons perdus par absorption ou fuite :

$$k_{\text{eff}} = \frac{\text{productions par fission}}{\text{absorptions+fuites}} \tag{2.6}$$

Avec :

- $k_{\text{eff}} < 1$: le milieu est dit sous-critique,
- $k_{\text{eff}} = 1$: le milieu est dit critique,
- $k_{\text{eff}} > 1$: le milieu est dit sur-critique.

L'équation de transport sans sources externes est une équation aux valeurs propres. Le facteur de multiplication effectif correspond à l'inverse de cette valeur propre. Le flux neutronique est le vecteur propre associé.

2.1.3 L'équation adjointe de transport

Il est possible de définir mathématiquement un problème adjoint possédant les mêmes valeurs propres que celles du problème original ou "direct" que nous venons de développer. À chaque opérateur de l'équation de transport directe stationnaire (2.2) on peut associer un opérateur adjoint. Les règles générales permettant de créer un opérateur adjoint à partir de son homologue direct sont :

- la transposition des matrices,
- le changement de signe des opérateurs différentiels,
- la permutation des arguments du noyau des opérateurs intégraux.

L'application de ces règles à l'équation (2.2) donne l'équation de transport adjointe suivante :

$$\Sigma(\vec{r}, E)\phi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \tag{2.7}$$

La densité de source adjointe est donnée par :

$$\begin{aligned} Q^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = &\int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}.\vec{\Omega}', E' \leftarrow E)\phi^*(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \\ &+ \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{N_j} \nu\Sigma_{f,j}(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \chi_j(E')\phi^*(\vec{r}, E') + S^*_{\text{ext}} \end{aligned} \tag{2.8}$$

où N_j est le nombre d'isotopes fissiles, et S^*_{ext} l'adjoint de l'éventuelle source externe de neutrons.

De même que dans le cas direct, k_{eff} vaut 1 en présence de sources externes, et l'équation adjointe est un problème à valeurs propres lorsqu'il n'y a pas de source externe de neutrons. Sa résolution est principalement utilisée pour deux applications : la théorie des perturbations et le biaisage Monte Carlo. Dans les deux cas, le flux adjoint est utilisé comme fonction d'importance neutronique, c'est-à-dire qu'il caractérise la contribution des neutrons de l'espace des phases à la réponse d'un détecteur. Notre étude porte notamment sur la deuxième application, la première n'entre en revanche pas dans le cadre de ce document, elle ne sera donc pas développée. Nous détaillons dans la suite de ce chapitre le principe des méthodes Monte Carlo et le biaisage, la démonstration de l'utilisation du flux adjoint dans ce cadre est donnée à la section (3.2.2).

2.2 Résolution stochastique de l'équation de transport

Les méthodes de Monte Carlo ont vu le jour en même temps que les premiers ordinateurs avec les travaux de Von Neumann, Ulman, Fermi, Metropolis et autres à Los Alamos (Metropolis (1987)). Cette approche s'adapte très bien à la modélisation de phénomènes stochastiques, comme le transport de particules. Elle s'est ensuite généralisée en une technique d'intégration très robuste. Outre le transport neutronique, on retrouve des algorithmes Monte Carlo dans de nombreux autres domaines tels que l'astrophysique, la mécanique des fluides, les mathématiques appliquées à la finance, la météorologie ou la chimie quantique. Lux et Koblinger (1990) définissent une méthode Monte Carlo comme étant une "technique numérique faisant intervenir la construction d'un modèle stochastique pour lequel l'espérance d'une variable aléatoire est équivalente à une grandeur physique que l'on cherche à déterminer".

Les méthodes Monte Carlo appliquées à la physique des réacteurs nucléaires consistent à modéliser un système grâce à ses caractéristiques géométriques et nucléaires, et à simuler son comportement moyen par l'observation des résultats d'un jeu aléatoire modélisant les phénomènes physiques. La simulation est basée sur une séquence de nombres aléatoires et sur l'échantillonnage statistique. On simule le parcours d'un grand nombre de neutrons (ou d'autres particules), à partir de leur émission (fission ou source fixe) jusqu'à leur mort par capture, fission ou fuite du système. Leur parcours et les lois d'interactions avec la matière sont simulés par tirage aléatoire, jusqu'à convergence statistique des résultats, grâce aux sections efficaces et aux distributions angulaires qui sont reliées à des probabilités.

Cette section est la synthèse des concepts développés dans Lux et Koblinger (1990), Martin (2011) et Métivier (2006), et décrit les principes théoriques des méthodes Monte Carlo appliquées à la neutronique.

2.2.1 Quelques rappels mathématiques

Dans cette sections nous présentons quelques notions statistiques utiles pour la compréhension de la méthode Monte Carlo.

Soit ξ une variable aléatoire définie sur un domaine D. La fonction $\xi \longrightarrow f(\xi)$ est de ce fait également une variable aléatoire. L'espérance de $E[f(\xi)]$ est définie en fonction de la densité de probabilité $p(\xi)$ telle que $p(\xi)d\xi$ représente la probabilité qu'a la variable aléatoire ξ d'avoir une valeur comprise entre ξ et $\xi + d\xi$:

$$E[f(\xi)] = \int_D d\xi p(\xi) f(\xi) \tag{2.9}$$

La variance de la fonction $f(\xi)$ est donnée par :

$$\mathrm{VAR}[f(\xi)] = \int_D d\xi p(\xi) \left(f(\xi) - E[f(\xi)]\right)^2 \tag{2.10}$$

L'écart type associé est : $\sigma(f(\xi)) = \sqrt{\mathrm{VAR}[f(\xi)]}$. Nous pouvons également définir la fonction de répartition $P(\xi)$ telle que la probabilité que la variable aléatoire ξ ait une valeur plus petite que x sera donnée par :

$$P(x) = P(\xi < x) = \int_{-\infty}^{x} d\xi p(\xi) \tag{2.11}$$

Ainsi on a :

$$p(\xi)d\xi = dP(\xi) \tag{2.12}$$

En effectuant ce changement de variable nous pouvons écrire l'espérance et la variance en fonction de $P(\xi)$:

$$E[f(\xi)] = \int_D dP(\xi) f(\xi) \tag{2.13}$$

et

$$\mathrm{VAR}[f(\xi)] = \int_D dP(\xi) \left(f(\xi) - E[f(\xi)]\right)^2 \tag{2.14}$$

Le processus de sélection de valeurs aléatoires de $f(\xi)$ à partir de la densité de probabilité $p(\xi)$ est appelé statistique ou tirage aléatoire. Il s'agit de l'étape clé de la méthode Monte Carlo. L'approche la plus simple consiste à échantillonner la variable ξ en se servant de la fonction de répartition. On l'appelle méthode d'inversion.

Dans un premier temps on sélectionne un nombre aléatoire r uniformément réparti dans l'intervalle $[0; 1[$. Ce nombre est rendu égal à la fonction de répartition de cet événement. On

peut ainsi retrouver la valeur de ξ en inversant la fonction :

$$P(\xi) = r \Longleftrightarrow \xi = P^{-1}(r) \tag{2.15}$$

Les valeurs de la variable aléatoire ξ échantillonnées à l'aide de cette technique sont distribuées suivant la densité de probabilité $p(\xi)$. L'espérance devient alors :

$$E[f(\xi)] = \lim_{N \to +\infty} E_N[f(\xi)] \tag{2.16}$$

avec :

$$E_N[f(\xi)] = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} f(P^{-1}(r_n)) \tag{2.17}$$

et N correspond au nombre de tirages. Typiquement il est nécessaire d'échantillonner entre quelques milliers et quelques millions de valeurs, suivant le cas étudié. En effet, la convergence des méthodes Monte Carlo, que l'on détaille à la section 2.2.4 est basée sur la loi des grands nombres, et l'écart-type associé au calcul d'une grandeur d'intérêt décroit en $\frac{1}{\sqrt{N}}$. L'écart type associé à l'espérance $E_N[f(\xi)]$ devient :

$$\sigma(f(\xi)) = \lim_{N \to +\infty} \sigma_N(f(\xi)) \tag{2.18}$$

avec :

$$\sigma_N(f(\xi)) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left(f(P^{-1}(r_n)) - E_N[f(\xi)]\right)^2} \tag{2.19}$$

2.2.2 L'algorithme Monte Carlo appliqué à la physique des réacteurs

Nous présentons ici le déroulement d'une simulation Monte Carlo. Un calcul Monte Carlo se décompose en cycles de particules appelés batchs. Travailler par batchs successifs permet la mise en place de l'algorithme d'itération de puissance dans les calculs de criticité (voir section 3.2.1). Cela permet également, en criticité comme en protection, de disposer de résultats intermédiaires et de pouvoir calculer l'écart-type des grandeurs calculées (équation (2.40)). On note n le nombre de batchs et N le nombre de neutrons que comporte un batch. Pour chaque batch on estime les grandeurs d'intérêt telles que le flux ou un taux de réaction. Ces résultats sont cumulés avec ceux des cycles précédents, et leur moyenne est calculée ainsi que l'écart-type associé. Le calcul de ces grandeurs et l'estimation de l'écart type seront développés à la section 2.2.4.

L'illustration de la simulation d'une particule de sa naissance à sa mort est présentée

à la figure 2.1. Une particule nait en un point de l'espace selon les distributions spatiale,

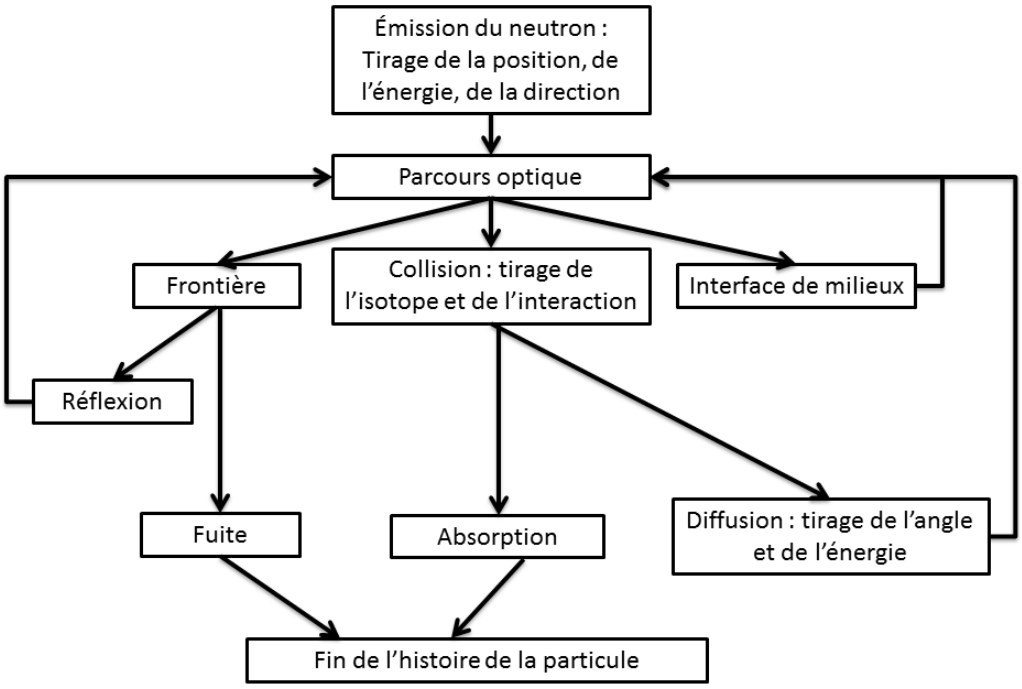


Figure 2.1 Principe d'une simulation Monte Carlo de la vie d'un neutron

angulaire et énergétique de la source préalablement définie. Elle va subir une succession de trajets et de collisions jusqu'à disparaitre par absorption ou en fuyant le système. Le code ne garde en mémoire que les informations nécessaires au calcul des grandeurs désirées et de leur écart-type.

Pour effectuer une simulation, le code utilise les lois physiques exprimées sous forme de probabilités et de densités de probabilités P pour déterminer à l'aide de nombres aléatoires les caractéristiques de la particule et le type d'évènements qu'elle subit : on échantillonne une grandeur selon une loi connue.

Le processus comporte principalement trois étapes. La première consiste à déterminer les caractéristiques de la particule source selon :

$$P = \frac{S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\int_V \int_E \int_{4\pi} S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dr^3 d\vec{\Omega} dE} \tag{2.20}$$

La source S peut être définie comme source externe dans un calcul de protection, ou issue

du batch précédent dans un calcul de criticité.

La deuxième étape concerne le transport de la particule. La probabilité qu'a le neutron de subir une première collision avec la matière après avoir parcouru une distance ρ est donnée par :

$$P = e^{-\Sigma_t(E)\rho}\Sigma_t(E) \tag{2.21}$$

On calcule cette distance, appelée parcours optique, de la manière suivante : on génère un nombre aléatoire ξ compris entre 0 et 1. Entre chaque choc le code calcule, pour un neutron d'énergie E dans un milieu homogène de section efficace totale $\Sigma_t(E)$, la longueur de son trajet grâce à la relation :

$$\rho = -\frac{1}{\Sigma_t(E)} ln(1-\xi) \tag{2.22}$$

Dans le cas où le neutron arrive dans un nouveau milieu, un nouveau chemin optique est calculé de la même façon.

La troisième étape a pour but de déterminer les caractéristiques des collisions. On détermine tout d'abord la probabilité de choc entre l'isotope i du milieu considéré et le neutron :

$$P = \frac{\Sigma_{t_i}(E)}{\Sigma_t(E)} \tag{2.23}$$

On calcule ensuite la probabilité pour que la réaction j se produise lors de cette collision :

$$P = \frac{\Sigma_{j_i}(E)}{\Sigma_{t_i}(E)} \tag{2.24}$$

En cas d'absorption, la simulation de cette particule s'arrête, et le code recommence le processus pour une nouvelle particule. Sinon il attribue une nouvelle direction à la particule et en déduit sa nouvelle énergie, avant d'exécuter de nouveau les deuxième et troisième étapes du processus.

2.2.3 Les estimateurs Monte Carlo

Il est possible de définir plusieurs estimateurs Monte Carlo des grandeurs neutroniques telles que le coefficient de multiplication effectif, le flux intégré ou un taux de réaction. L'algorithme Monte Carlo permet de connaitre n'importe quelle quantité intégrale du type :

$$R = \int_V \int_E f(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dr^3 d^2\vec{\Omega} dE \tag{2.25}$$

où $f(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ est la fonction réponse. Si $f = 1$ on calcule le flux intégré, si $f = \Sigma_i$ on calcule le taux de réaction i pour le milieu considéré. L'idée est de placer des détecteurs fictifs dans l'espace dr^3dE et d'y compter les événements.

Lorsqu'on simule l'histoire d'une particule, on lui associe un poids W. Celui-ci correspond à la contribution de la particule à la population totale dans l'espace des phases considéré. Ce poids est recalculé à chaque nouvel événement, selon la relation de récurrence suivante :

Le poids initial du neutron est fixé à 1 :

$$W_0 = 1 \tag{2.26}$$

Le poids de la particule est ensuite déterminé après tirage à partir de la source comme :

$$W_1 = W_0 \int_D S_1(P_1) dP_1 \tag{2.27}$$

et après le passage du point P_1 au point P_2 de l'espace des phases, le poids devient :

$$W_2 = W_1 \int_D K(P_1 \to P_2') dP_2' \tag{2.28}$$

qui se généralise à :

$$W_n = W_{n-1} \int_D K(P_{n-1} \to P_n') dP_n' \tag{2.29}$$

où $K(P \to P')$ est défini comme le noyau de transport entre le point P et le point P'. On peut donc avoir en tout point de l'espace des phases le poids $W(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ du neutron considéré.

Pour le calcul du flux ou d'un taux de réaction, on peut définir deux estimateurs volumiques : les estimateurs corde (2.30) et collision (2.31) :

$$f(V, E)\phi(V, E) = W(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) f(V, E) l(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \tag{2.30}$$

$$f(V, E)\phi(V, E) = \frac{W(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) f(V, E)}{\Sigma_t(V, E)} \tag{2.31}$$

Avec :

- $l(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ le parcours de la particule dans le volume V
- $\Sigma_t(V, E)$ la section efficace totale du milieu traversé

Ces estimateurs volumiques donnent les valeurs du flux ou des taux de réaction en encaissant les valeurs des estimateurs lors de chaque événement survenu dans le volume V. Ces estimateurs ne conviennent pas à des volumes trop petits. De même, l'estimateur collision n'est pas défini pour les milieux vides c'est-à-dire lorsque $\Sigma_t = 0$.

On utilise principalement trois estimateurs pour le calcul du facteur de multiplication effectif. L'estimateur corde (appelé KTRACK dans TRIPOLI) calcule pour chaque trajet dans un milieu fissile i, avec N_j le nombre de milieux fissiles :

$$K = l(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \sum_{i=1}^{N_j} \nu(i) \Sigma_f(i) \tag{2.32}$$

L'estimateur collision (KCOLL dans TRIPOLI) calcule le nombre moyen de neutrons produits par fission lors de chaque interaction dans un milieu quelconque i :

$$K = \nu(i) \frac{\Sigma_f(i)}{\Sigma_t(i)} \tag{2.33}$$

L'estimateur "k_{eff} at step" (KSTEP dans TRIPOLI) donne le nombre de neutrons que le code est supposé produire à chaque étape :

$$K = \nu \tag{2.34}$$

En théorie, tous les estimateurs d'une même grandeur sont statistiquement équivalents, c'est-à-dire qu'ils convergent tous vers la même valeur.

2.2.4 La convergence d'un calcul Monte Carlo

La méthode Monte Carlo repose principalement sur deux théorèmes mathématiques : la loi forte des grands nombres et le théorème central limite. Associons à chaque cycle n une grandeur estimée X_n. La valeur finale échantillonnée est obtenue par :

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_n \tag{2.35}$$

où N est le nombre d'événements. On note $\mu = E[X]$ l'espérance de la variable aléatoire X. D'après la loi forte des grands nombres, $\bar{X}_N$ converge vers μ si N est grand :

$$\forall \epsilon > 0, P(\lim_{N \to +\infty} |\bar{X}_N - \mu| > \epsilon) = 0 \tag{2.36}$$

Le théorème limite central assure que la somme d'un très grand nombre de variables aléatoires est elle-même une variable aléatoire, distribuée selon une loi normale. On peut donc l'appliquer pour la distribution de X_N :

$$\lim_{N \to +\infty} P\left((\mu - a) \frac{\sigma}{\sqrt{N}} < \bar{X}_N < (\mu + a) \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{a} e^{-t^2} dt \tag{2.37}$$

Si les $\bar{X}_N$ sont indépendants, l'erreur statistique associée à l'évaluation des X_n est :

$$\mathrm{VAR}[\bar{X}_N] = \frac{\mathrm{VAR}[X]}{N} \tag{2.38}$$

Comme VAR$[X]$ est inconnu, on utilise un estimateur *non biaisé* :

$$S_{\bar{X}_N} = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{n=1}^{N} X_n^2 - \bar{X}_N^2} \tag{2.39}$$

L'estimateur de l'écart type est donc :

$$\sigma(\bar{X}_N) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)}\left((\sum_{n=1}^{N} X_n^2) - N\bar{X}_N^2\right)} \tag{2.40}$$

On note que seuls les ΣX_n et les ΣX_n^2 sont nécessaire à l'estimation de l'écart-type d'une variable aléatoire lors d'un calcul Monte Carlo. L'erreur statistique relative est donnée par :

$$\bar{\epsilon}(\bar{X}_N) = \frac{\sigma(\bar{X}_N)}{\bar{X}_N} \tag{2.41}$$

Rappelons ensuite l'expression de la densité de probabilité d'une loi normale d'espérance μ et d'écart-type σ :

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2} \tag{2.42}$$

et celle de la fonction erreur qui sera utile par la suite pour le calcul d'un intervalle de confiance des résultats obtenus :

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \tag{2.43}$$

La fonction de distribution cumulative F associée à une loi normale peut s'exprimer à l'aide de la fonction erreur :

$$F(x) = \frac{1}{2}[1 + \mathrm{erf}(\frac{x-\mu}{\sqrt{2}\sigma})] \tag{2.44}$$

Les résultats distribués suivant une loi normale sont inclus dans un intervalle de confiance, généralement $[(\mu - a)\frac{\sigma}{N}; (\mu + a)\frac{\sigma}{N}]$, qui peut être exprimé en fonction de F. On définit $P\left((\mu - a)\frac{\sigma}{N} < x < (\mu + a)\frac{\sigma}{N}\right)$ la probabilité que x soit à une certaine distance de la vraie valeur. Elle s'exprime par :

$$P((\mu - a)\frac{\sigma}{N} < x < (\mu + a)\frac{\sigma}{N}) = \mathrm{erf}(\frac{a}{\sqrt{2}}) \tag{2.45}$$

On utilise généralement trois valeurs de a conduisant à 3 intervalles de confiance :

- $a = 1$ la probabilité que la grandeur échantillonnée soit égale à la vraie valeur à 1σ près est de 68%
- $a = 2$ la probabilité que la grandeur échantillonnée soit égale à la vraie valeur à 2σ près est de 95.4%
- $a = 3$ la probabilité que la grandeur échantillonnée soit égale à la vraie valeur à 3σ près est de 99.7%

L'erreur statistique décroit en $\frac{1}{\sqrt{N}}$. La méthode Monte Carlo est donc une méthode d'intégration convergeant en $O(n^{\frac{1}{2}})$. Pour diminuer l'erreur statistique d'un facteur N il faut donc augmenter le nombre de simulations d'un facteur N^2. De ce fait, une simulation Monte Carlo peut être extrêmement couteuse en temps de calcul pour atteindre une précision suffisante du calcul des grandeurs d'intérêt. Il a donc été nécessaire de développer des méthodes de réduction de variance pour contourner ce problème. Nous allons développer le principe de ces méthodes dans la prochaine partie.

2.2.5 Les techniques de réduction de variance

Nous venons de mettre en évidence le principal inconvénient de la méthode Monte Carlo : la vitesse de convergence et son impact sur le temps de calcul. Pour des calculs de type radioprotection, mettant en jeu une source fixe de neutrons et une volonté de connaitre les interactions entre les particules et la matière de l'autre côté d'un écran de protection, où de fortes atténuations de flux de particule sont en jeu, un faible nombre de neutrons est capable de traverser un milieu fortement absorbant pour se rendre à un détecteur situé loin de la source de particules, et donc contribuer à sa réponse. Ceci engendre de grandes incertitudes statistiques sur cette réponse, l'écart-type associé est plus important que celui d'un détecteur proche de la source. En effet la dispersion des résultats est grande si le nombre d'encaissements est trop faible (cf équation 2.39). Une bonne précision des grandeurs calculées loin de la source neutronique est donc beaucoup plus longue à obtenir. On peut observer par exemple une atténuation de flux de l'ordre d'une dizaine de décades entre le coeur d'un réacteur nucléaire et un point situé à l'extérieur du bâtiment réacteur. De ce fait, il faut simuler plusieurs milliards de neutrons pour être capable d'en comptabiliser un qui traverse complètement la barrière radiologique du réacteur. Atteindre une convergence statistique dans ces conditions prendrait un temps considérable et non acceptable. C'est pourquoi on a développé des techniques de réduction de variance dites de "biaisage" qui permettent d'obtenir une erreur statistique satisfaisante associée aux grandeurs physiques calculées en un temps acceptable. Une simulation utilisant ces techniques est appelée simulation non-analogue, en

opposition aux simulations analogues qui ont été présentées dans les sections précédentes.

Le principe du biaisage consiste à modifier les lois d'interaction entre les neutrons et la matière de manière à favoriser les évènements qui contribuent significativement au résultat recherché. Pour ce faire, on associe à la particule un poids, et l'espace des phases est affecté d'une importance, l'inverse du poids. L'importance neutronique caractérise la contribution d'un neutron situé en un point de l'espace des phases à la réponse d'un détecteur.

Par définition, l'espérance $E[X]$ de la variable aléatoire X, où $f(X)$ est une densité de probabilité, est donnée par :

$$E[X] = \int X f(X) dX \tag{2.46}$$

Il est possible de conserver cette égalité en utilisant une densité de probabilité arbitraire $f^*(X)$ de la manière suivante :

$$E[X] = \int X \frac{f(X)}{f^*(X)} f^*(X) dX \tag{2.47}$$

C'est la présence du rapport $\frac{f(X)}{f^*(X)}$ qui introduit la variable poids W. Dans une simulation analogue, $f^*(X) = f(X)$, et le poids est égal à 1. Dans une simulation non-analogue, les lois f et f^* sont reliées selon :

$$f(X) = W \times f^*(X) \tag{2.48}$$

Le poids correspond alors au nombre réel de particules que le neutron représente. Par exemple, un poids de 0.25 signifie simuler un quart de particule. Ainsi, simuler 4 particules de poids 0.25 revient à simuler un seul vrai neutron. Les lois f sont des densités de probabilités. En augmentant la valeur de f, on augmente le nombre de particules et on diminue leur poids.

Le biaisage Monte Carlo se base sur l'utilisation de cartes d'importances, qui permettent d'obtenir un poids de référence, que l'on peut comparer aux poids des neutrons simulés donnés par l'équation (2.29), et de définir les deux techniques de biaisage principalement utilisées : le Splitting et la Roulette Russe.

La Roulette Russe est une technique visant à ne pas simuler les particules de poids trop faible. On définit un poids minimal W_{min} (égal à $0,5$ dans TRIPOLI). On considère le rapport $\frac{W(P)}{W_{ref}(P)}$, où $W(P)$ est le poids de la particule et $W_{ref}(P)$ le poids de référence donné par la carte d'importance au point P de l'espace des phases. Si ce rapport est inférieur au poids minimal W_{min}, la particule est tuée. Cette technique permet de gagner en temps de calcul en ne simulant pas les neutrons jugés inutiles. En contrepartie elle dégrade la précision du calcul en augmentant l'écart-type puisque moins d'encaissements sont enregistrés.

Le Splitting est la technique inverse. On définit un poids maximal W_{max} (égal à 2 dans TRIPOLI). Si $\frac{W(P)}{W_{ref}(P)} > W_{max}$, on note $n = \frac{W(P)}{W_{max}}$ et on remplace cette particule par n particules de poids égaux à W_{max}. Cette technique augmente donc le nombre de neutrons, et permet de ce fait de diminuer l'écart-type en permettant à plus de neutrons de contribuer à la réponse du détecteur. Le temps de calcul est en revanche augmenté.

La Roulette Russe et le Splitting sont donc deux techniques complémentaires. Leur combinaison doit être optimisée afin d'obtenir le meilleur compromis possible entre précision et temps de calcul. Cette combinaison dépend directement de la carte d'importances du système. Une mauvaise carte peut conduire à trop de Splitting, et donc à des temps de calculs trop importants, ou au contraire à une utilisation excessive de la Roulette Russe qui risque de limiter la précision de la simulation. Une mauvaise carte d'importances peut donc donner des résultats en contradiction totale avec l'effet souhaité de l'utilisation du biaisage. Au contraire, une carte optimisée et adaptée peut se révéler très efficace et réduire à la fois l'écart-type et le temps de calcul d'une simulation. Une partie de l'étude présentée dans ce mémoire vise à produire une carte d'importances à partir d'un code déterministe. Nous détaillerons cette approche dans le chapitre suivant.

2.3 Résolution déterministe de l'équation de transport

2.3.1 Formalisme multigroupe

Lorsqu'on veut résoudre numériquement l'équation de transport (2.2), on utilise généralement une discrétisation multigroupe en énergie. Cette approche vise à subdiviser le domaine d'énergie continue en G régions d'énergie (qu'on nomme groupes) dans lesquels les neutrons sont considérés comme monocinétiques. On considère alors les sections efficaces constantes pour chaque groupe. En général, on utilise la variable léthargie $u = \ln(\frac{E_0}{E})$ sur le domaine d'énergie $[0, E_0]$ avec :

$$W_g = \{u; u_{g-1} \leq u < u_g\} = \{E; E_g < E \leq E_{g-1}\}; \qquad g = 1, G \tag{2.49}$$

Pour chaque énergie E_g, la léthargie associée est définie comme $u_g = \ln(\frac{E_0}{E_g})$ avec E_0 l'énergie la plus haute considérée qui correspond à $u_0 = 0$. Chaque groupe correspond à un intervalle $]u_{g-1}, u_g[$ ou $]E_g, E_{g-1}[$. Dans le formalisme multigroupe, l'équation de transport (2.2) s'écrit :

$$\Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega}.\vec{\nabla}\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \tag{2.50}$$

Le terme source (2.3) est lui aussi considéré en utilisant ce formalisme :

$$\begin{aligned} Q_g(\vec{r},\vec{\Omega}) = \sum_{h=1}^{G} \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_{s,g\leftarrow h}(\vec{r},\vec{\Omega}.\vec{\Omega}')\phi_h(\vec{r},\vec{\Omega}') \\ + \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J} \chi_{j,g} \sum_{h=1}^{G} \nu\Sigma_{f,j,h}(\vec{r})\phi_h(\vec{r}) \end{aligned} \tag{2.51}$$

Cette approche facilite la résolution de l'équation de transport mais fait apparaître une difficulté concernant l'évaluation des sections efficaces multigroupes. On met en évidence la problématique de l'autoprotection des résonances, qui est un traitement des pics de résonances de certaines sections efficaces au sein d'un même groupe énergétique. Ces sections efficaces sont définies de telle sorte qu'elles préserveront les taux de réactions dans le groupe d'énergie considéré :

$$\Sigma_{s,g\leftarrow h}(r,\vec{\Omega}.\vec{\Omega}') = \frac{1}{\phi_h(r,\vec{\Omega})} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du \int_{u_{h-1}}^{u_h} du' \Sigma_s(r, u \leftarrow u', \vec{\Omega}.\vec{\Omega}')\phi(r,u,\vec{\Omega})du \tag{2.52}$$

$$\Sigma_{i,g}(r,\vec{\Omega}) = \frac{1}{\phi_g(r,\vec{\Omega})} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \Sigma_i(r,u,\vec{\Omega})\phi(r,u,\vec{\Omega})du \tag{2.53}$$

L'équation (2.52) est utilisée pour les sections efficaces de diffusion, et l'équation (2.53) est utilisée pour les autres types d'interactions.

Pour résoudre l'équation de transport, on utilise souvent sa forme intégrale. En notant s l'abscisse curviligne, on met l'équation (2.50) sous sa forme dite caractéristique :

$$\Sigma_g(\vec{r}+s\vec{\Omega})\phi_g(\vec{r}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) + \frac{d}{ds}\phi_g(\vec{r}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) = Q_g(\vec{r}+s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) \tag{2.54}$$

Le chemin optique s'écrit :$\tau_g(s) = \int_0^s ds'\Sigma_g(\vec{r}+s'\vec{\Omega})$. Il nous permet de formuler la forme intégrale de l'équation de transport :

$$\phi_g(\vec{r},\vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\vec{r}-s\vec{\Omega},\vec{\Omega}) \tag{2.55}$$

2.3.2 Méthode des probabilités de collision

La méthode des probabilités de collisions résulte de la discrétisation spatiale de la forme intégrale de l'équation de transport multigroupe (2.55). Elle est intégrée par rapport à l'angle solide après le changement de variable : $\vec{r'} = \vec{r} - s\vec{\Omega}$:

$$\phi_g(\vec{r}) = \int_{4\pi} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) d^2\Omega = \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^{\infty} ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(r - s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \int_{\infty} d^3\vec{r} \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\vec{r'}) \quad (2.56)$$

Cette méthode est généralement utilisée sur un espace pavé infini de cellules unitaires. Chacune des cellules est découpée en régions V_i. La notation V_i est utilisée pour représenter toutes les régions V_i du pavage infini. On développe la section efficace de diffusion en polynôme de Legendre, et on ne conserve que le premier terme. L'anisotropie de la diffusion n'est donc pas prise en compte par cette méthode. On suppose que la source Q_i, g est uniforme sur la région V_i . Il est donc nécessaire d'utiliser une discrétisation fine de la cellule.

En multipliant l'équation (2.56) par Σ_g et en intégrant sur chaque région V_i on obtient :

$$\int_{V_j} d^3\Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) = \int_{V_j} d^3\Sigma_g(\vec{r}) \sum_i Q_i, g \int_{V_i} d^3\vec{r'} \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.57)$$

avec :

$$Q_{i,g} = \sum_{h=1}^{G} \frac{\Sigma_{s,0,i,g\leftarrow h}}{4\pi} \phi_{i,h} + \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{N_j} \chi_{i,g} \sum_{h=1}^{G} \Sigma_{f,j,h}\phi_{i,h} \quad (2.58)$$

où N_j est le nombre d'isotopes fissiles. L'équation (2.57) se simplifie sous la forme :

$$\phi_{j,g} = \frac{1}{V_i \Sigma_{j,g}} \sum_i Q_{i,j} V_i P_{ij,g} \quad (2.59)$$

avec :

$$\phi_{j,g} = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3\vec{r} \phi_g(\vec{r}) \quad (2.60)$$

$$\Sigma_{j,g} = \frac{1}{V_i \phi_{j,g}} \int_{V_j} d^3\vec{r} \Sigma_g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) \quad (2.61)$$

La probabilité de collision $P_{ij,g}$ est la probabilité qu'un neutron créé dans une région V_i de l'espace étudié réalise sa première collision avec la matière dans le volume V_j. On considère que les sections efficaces sont constantes dans les régions V_i. Ainsi, on définit $P_{ij,g}$ de la façon suivante :

$$P_{ij,g} = \frac{\Sigma_{j,g}}{4\pi V_i} \int_{\infty} d^3\vec{r} \int_{V_j} d^3\vec{r} \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (2.62)$$

On peut écrire sous forme matricielle la discrétisation de l'équation intégrale de transport en l'absence de sources externes telle que :

$$\phi = P_{vv} R_\lambda \phi \quad (2.63)$$

avec P_{vv} la matrice des probabilités de collision réduite, et :

$$R_\lambda = \Sigma_s + \frac{1}{k_{eff}} \chi (\nu \Sigma_f)^T \tag{2.64}$$

où Σ_s est la matrice des sections efficaces macroscopiques de diffusion, χ est le spectre de fission, et $\nu\Sigma_f$ est la matrice de fission.

Dans le cas d'un problème à source, l'équation (2.63) devient :

$$\phi = P_{vv}(R\phi + S) \tag{2.65}$$

où S est la source externe et :

$$R = \Sigma_s + \chi (\nu \Sigma_f)^T \tag{2.66}$$

La première étape d'un calcul de flux neutronique par cette méthode consiste donc à calculer la matrice de probabilités de collisions. Deux processus sont ensuite superposés. Le premier effectue une itération interne sur les sources de diffusion jusqu'à l'obtention d'un flux multigroupe. Le deuxième réalise une itération externe jusqu'à convergence des sources de fission et du k_{eff} ou des fuites.

La principale limitation de cette méthode de calcul est le nombre de régions n à considérer. En effet, elle implique l'inversion et le stockage de matrices n^2, ce qui se révèle très coûteux en temps de calcul et en espace de stockage lorsque n est trop grand. Généralement il est conseillé de ne pas dépasser le millier de régions pour utiliser cette méthode.

Il existe d'autres méthodes de résolution de l'équation de transport, telles que la méthode des caractéristiques ou la méthode S_N dite des ordonnées discrètes par exemple. N'utilisant que la méthode des probabilités de collisions dans notre étude, nous ne décrivons pas ces autres méthodes dans ce document. Hébert (2009) présente de manière détaillée ces techniques.

2.3.3 Résolution de l'équation adjointe dans DRAGON

Pour résoudre l'équation adjointe de transport, et ainsi calculer le flux adjoint, il est également possible d'avoir recours à la méthode des probabilités de collisions présentée précédemment. Celle ci a été mise en place dans DRAGON par Courau et Marleau (2002). L'équation (2.63) devient dans le cas d'un calcul de flux adjoint :

$$\phi^* = (R_\lambda)^T P_{vv} \phi^* \tag{2.67}$$

On remarque que les équations (2.63) et (2.67) n'ont pas exactement la même structure, les algorithmes de résolutions risquent d'être différents. On a donc introduit une nouvelle inconnue, le flux pseudo-adjoint défini comme :

$$\phi^{+} = P_{vv}\phi^{*} \tag{2.68}$$

Ainsi, en remplaçant l'expression du flux pseudo-adjoint en fonction du flux adjoint dans l'équation (2.67) on obtient :

$$\phi^{+} = P_{vv}(R_{\lambda})^{T}\phi^{+} \tag{2.69}$$

La transposition de la matrice R_{λ} est la seule différence avec l'algorithme de l'équation directe, ce qui simplifie son implantation dans DRAGON. De plus, cette relation revient à résoudre l'équation intégrodifférentielle adjointe. Le flux dit "pseudo-adjoint" est donc le flux adjoint intégrodifférentiel. À partir de celui-ci, on obtient directement le flux adjoint par la relation :

$$\phi^{*} = (R_{\lambda})^{T}\phi^{+} \tag{2.70}$$

Dans le cas d'un problème à source, les équations (2.67), (2.69) et (2.70) deviennent, pour une source adjointe S^{*} donnée :

$$\phi^{*} = (R)^{T}P_{vv}\phi^{*} + S^{*} \tag{2.71}$$

$$\phi^{+} = P_{vv}(R)^{T}\phi^{+} + P_{vv}S^{*} \tag{2.72}$$

$$\phi^{*} = (R)^{T}\phi^{+} + S^{*} \tag{2.73}$$

CHAPITRE 3

PRÉSENTATION DU COUPLAGE ENTRE DRAGON ET TRIPOLI

Dans ce chapitre nous présentons dans un premier temps les deux codes utilisés dans cette étude : le code déterministe DRAGON et le code stochastique TRIPOLI. Nous présentons ensuite les deux approches du couplage réalisé entre ces deux codes.

3.1 Les codes utilisés

3.1.1 DRAGON : code de cellule déterministe

DRAGON (Marleau *et al.* (2008)) est un code de cellule déterministe développé à l'Institut de Génie Nucléaire de l'École Polytechnique de Montréal. Ce type de code permet la résolution de l'équation de Boltzmann pour le calcul du flux neutronique, et est principalement utilisé pour traiter des géométries de type cellule ou assemblage en milieu infini dans un schéma de calcul de réacteurs, mais peut aussi résoudre des problèmes de protection de type source-détecteur. DRAGON traite indifféremment des géométries 1-D, 2-D et 3-D. Il peut aussi résoudre les équations de Bateman pour l'étude de l'évolution isotopique du combustible. Le code est divisé en différents modules qui sont reliés entre eux via le programme de contrôle généralisé du groupe d'analyse nucléaire (GAN generalized driver) (Roy et Hébert (2000)). La version 3.06 de ce logiciel est utilisée pour cette étude. Les principales composantes que nous utilisons sont :

- Les modules de tracking NXT : et SYBILT : permettant d'analyser les géométries et générant des lignes d'intégrations nécessaires à la résolution de l'équation de transport par la méthode des probabilités de collisions (CP) ou la méthode des caractéristiques (MOC). Le module NXT : crée des lignes d'intégration pour un calcul complet de cellule et permet l'utilisation de géométries définies par bloc (Marleau (2006)). Le module SYBILT : génère des lignes d'intégration pour un calcul aux courant d'interfaces en milieu hétérogène.
- Le module SHI : pour l'autoprotection des résonances des sections efficaces. Il s'appuie sur la méthode de Stamml'er et permet la normalisation de Livolant-Jeanpierre (Hébert et Marleau (1991)).
- Le module MAC : permettant notamment de définir une source directe ou adjointe,

pour un calcul de type source-détecteur.
- Le module ASM : calculant les matrices de probabilités de collisions en utilisant les fichiers de tracking (Marleau (2001)).
- Le module FLU : résolvant l'équation de transport par la méthode des probabilités de collisions.
- Le module EDI : pour l'homogénéisation et la condensation des flux et taux de réactions.

Toutes les simulations présentées par la suite sont effectuées en régime stationnaire, c'est pourquoi le module d'évolution EVO : n'est pas mentionné explicitement dans cette liste. DRAGON peut également lire plusieurs formats de bibliothèques de sections efficaces microscopiques incluant :

- MATXS
- WIMS-D4
- WIMS-EACL
- APOLLO

Dans ce projet nous utilisons des bibliothèques issues des évaluations ENDF/B-VI et JEFF3.1 au format WIMS-D4.

3.1.2 TRIPOLI : code Monte Carlo

TRIPOLI est un code Monte Carlo en trois dimensions développé au Commissariat à l'Énergie Atomique (France) (Petit *et al.* (2008)). Il traite du transport de quatre types de particules : neutrons, photons, électrons et positrons. Son principal usage et ses fonctionnalités les plus avancées concernent le transport des neutrons. Il utilise des sections efficaces décrites point par point, c'est-à-dire en énergie continue. Il peut également utiliser des bibliothèques multigroupes. Il est conçu pour simuler deux types de problèmes :

- des problèmes de protection qui mettent en jeu la propagation de neutrons dans un milieu non multiplicatif sur de longues distances avec de fortes atténuations de flux
- des problèmes de neutronique relatifs au comportement des neutrons en milieu fissile

TRIPOLI possède pour les calculs de protection un module interne de biaisage appelé INIPOND. Ce module permet d'initialiser une carte de pondération qui fournit un poids de référence en tout point de l'espace des phases. Cette carte permet la mise en oeuvre des techniques du Splitting et de la Roulette Russe telles que présentées dans le chapitre précédent. La fonction d'importance utilisée dans TRIPOLI est factorisé de la façon suivante :

$$I(r,\Omega,E,t) = I_{\text{spatiale}}(r,E) \times I_{\text{angulaire}}(\Omega) \times I_{\text{énergétique}}(E) \times I_{\text{temporelle}}(t) \qquad (3.1)$$

avec :

$$I_{\text{spatiale}}(r,E) = \sum_{n=1}^{N} I_n(E) exp(-\int_0^{s_{D_n}} ds K^E(\Omega_{D_n}\Omega_0)(r+s\Omega_{D_n})) \tag{3.2}$$

$$I_{\text{angulaire}}(\Omega) = \frac{\Sigma_t(r,\Omega,E)}{\Sigma_t(r,\Omega,E) - (K\Omega\Omega_0)(r,\Omega,E)} \tag{3.3}$$

$$I_{\text{énergetique}}(E) = E^{\alpha} \tag{3.4}$$

$$I_{\text{temporelle}}(t) = 1 + \beta t \tag{3.5}$$

L'importance est définie en fonction de détecteurs de pondération. Ces détecteurs ont pour rôle "d'attirer" les neutrons vers eux. Leur nombre et leur position doivent être choisis par l'utilisateur. Il convient typiquement de les placer dans une zone d'intérêt afin d'augmenter le nombre de neutrons contribuant à la grandeur à calculer, et de rendre le biaisage pertinent. N correspond au nombre de détecteurs de pondération. $I_n(E)$ correspond à l'importance de chaque détecteur, et est de forme identique à I_e^g qui sera définie ci-après.

L'importance est discrétisée en espace et en énergie. L'utilisateur doit définir un maillage spatial (cubique ou cylindrique) et un découpage énergétique (usuellement autour de 5 groupes) de pondération. La composante spatiale est calculée une fois que l'on connait la valeur des coefficients K, appelés opacités ou coefficients de Placzek. Ces coefficients sont propres à chaque matériau et à chaque groupe énergétique de pondération. Ils peuvent être fournis à TRIPOLI par l'utilisateur, ou être obtenus en résolvant l'équation de Placzek multigroupe suivante :

$$\Sigma_{stot}^g I_e^g = \frac{\Sigma_t^g}{2K^g} \ln\left(\frac{\Sigma_t^g + K^g}{\Sigma_t^g - K^g}\right) \sum_{g'} \Sigma_s^{g\to g'} I_e^{g'} \tag{3.6}$$

où :

$$I_e^g = \frac{1}{\beta+1} \frac{(E_{sup}^g)^{\beta+1} - (E_{inf}^g)^{\beta+1}}{E_{sup}^g - E_{inf}^g} \tag{3.7}$$

E_{sup}^g et E_{inf}^g sont les bornes des groupes de pondération. Dans le cas où le problème traité est stationnaire, le temps n'a plus d'impact sur l'importance. De ce fait $\beta = 0$ et l'équation 3.6 devient :

$$\Sigma_{stot}^g = \frac{\Sigma_t^g}{2K^g} \ln\left(\frac{\Sigma_t^g + K^g}{\Sigma_t^g - K^g}\right) \sum_{g'} \Sigma_s^{g\to g'} \tag{3.8}$$

Une fois les coefficients K connus, le code peut calculer les importances spatiale , et accède aux directions d'intérêt Ω_0 en calculant le gradient de la fonction importance. L'utilisateur peut également définir une importance énergétique à l'aide du paramètre α, pour par exemple accentuer l'attraction des neutrons vers un domaine d'énergie. Ce paramètre vaut 1 par défaut.

TRIPOLI est capable d'enregistrer ces cartes de pondération, et de les réutiliser dans des calculs ultérieurs, à condition de ne pas changer la géométrie, les compositions des mélanges et les options de pondération. Il peut de ce fait lire des cartes d'importances produites par d'autres codes.

Pour terminer, les bibliothèques de sections efficaces dont nous disposons pour TRIPOLI ne sont valables que pour une température de 300 Kelvin. Les études qui seront présentées dans ce document ont toutes été réalisées avec des mélanges à 300 K dans TRIPOLI et dans DRAGON.

3.2 Les deux approches d'accélération de convergence du calcul Monte Carlo envisagées

Comme nous l'avons déjà mentionné, le but de ce mémoire est d'accélérer la convergence des calculs TRIPOLI grâce à DRAGON . Il s'agit à la fois de travailler sur la réduction de l'écart-type des grandeurs calculées et sur le temps de calcul des simulations Monte Carlo. Le facteur de qualité Q (figure of merit en anglais, FOM) permet de relier ces deux éléments :

$$Q = \frac{1}{t \times \sigma^2} \tag{3.9}$$

avec :

- t le temps de simulation
- σ^2 la variance de la grandeur calculée

Cette grandeur est un indicateur du compromis trouvé entre précision et vitesse d'un calcul Monte Carlo, et permet de quantifier la qualité de ce compromis. Il est donc intéressant de l'utiliser pour comparer plusieurs simulations. Il faut cependant être vigilant : le facteur de qualité dépend du temps de calcul, et donc de la machine utilisée. Il est donc indispensable de lancer toutes ces simulations sur le même calculateur pour que ces comparaisons soient pertinentes. Plus sa valeur est élevée, plus ce compromis est optimisé. On peut aussi définir le facteur de qualité relatif Q_{relatif} comme :

$$Q_{\text{relatif}} = \frac{Q}{Q_{\text{référence}}} \tag{3.10}$$

avec :

- $Q_{\text{référence}}$ le facteur de qualité de la simulation de référence
- Q le facteur de qualité de la simulation accélérée

Il permet de comparer par exemple un calcul utilisant une technique d'accélération à un calcul de référence, et ainsi de juger des capacités de celle-ci, ou de comparer deux méthodes d'accélération entre elles.
Ces facteurs de qualité seront utilisés pour valider et caractériser les performances des méthodes de chainage que nous allons mettre en place.

Nous avons choisi d'étudier deux méthodes distinctes d'accélération de convergence de calculs Monte Carlo. La première est adaptée à des géométries de type assemblage de réacteur, et concerne la convergence des sources neutronique en calcul de criticité. La deuxième trouve son application à des problèmes de protection de type source-détecteur, et met en jeu une technique de biaisage du calcul Monte Carlo. Nous allons maintenant décrire chacune de ces méthodes.

3.2.1 Accélération de la convergence des sources de neutrons

Nous nous intéressons ici à l'application de la méthode Monte Carlo à des calculs de criticité, dont l'un des objectifs est de déterminer le facteur de multiplication effectif k_{eff}. Nous décrivons plus en détail l'algorithme mis en jeu dans ce type de simulations, introduisons le problème de convergence des sources de fissions et la solution que nous proposons pour améliorer cette convergence.

Reprenons tout d'abord l'équation de transport écrite sous forme matricielle :

$$(L+T)\Phi = S\Phi + \frac{1}{k_{\text{eff}}} M\Phi \tag{3.11}$$

avec :

- L l'opérateur de fuites
- T l'opérateur de collisions
- S l'opérateur de production par diffusion
- M l'opérateur de multiplication par fissions.

Les simulations Monte Carlo en mode critique reposent sur l'utilisation de la technique dite d'itération de puissance. Cette technique consiste à utiliser les neutrons produits par les fissions d'une génération donnée comme sources de la génération suivante. L'équation ci-dessous illustre l'algorithme de l'itération de puissance :

$$(L+T-S)\Phi^{n+1} = \frac{1}{k_{\text{eff}}^{n}} M\Phi^{n} \tag{3.12}$$

La valeur de Φ^0 est donnée par la source initiale de fission, souvent sous forme d'une source

uniformément distribuée ou ponctuelle. Une étape de convergence des sources de fission est nécessaire pour que les grandeurs calculées soient représentatives. En effet, plusieurs itérations sont nécessaires pour que les distributions moyennes de sources soient uniformes d'un cycle à l'autre. Une fois cette étape réalisée, on peut considérer que les cycles suivants sont représentatifs de la source critique, et que la distribution de flux est stationnaire. On peut ainsi commencer à enregistrer les encaissements.

La convergence des sources est un processus qui peut s'avérer parfois très long. En pratique il est parfois nécessaire d'attendre plusieurs dizaines ou centaines de cycles, suivant le problème étudié, avant d'obtenir des encaissements suffisamment représentatifs pour pouvoir être pris en compte. À terme, la façon dont la source initiale est définie n'a pas d'influence sur le résultat final du calcul.

De plus, il est à noter que l'itération de puissance est un processus qui viole les hypothèses du théorème de la limite centrale, notamment celle portant sur l'indépendance des variables aléatoires identiquement distribuées. En effet, cet algorithme implique des corrélations fortes d'un cycle à l'autre. Ainsi le flux calculé à une itération donnée dépend fortement du flux à l'itération précédente. Ces corrélations peuvent engendrer des oscillations sur la distribution de flux, comme le montre la figure 3.1 issue d'un calcul TRIPOLI sur un calcul de crayon REP de 4 mètres de long (Dumonteil et Malvagi (2012)).

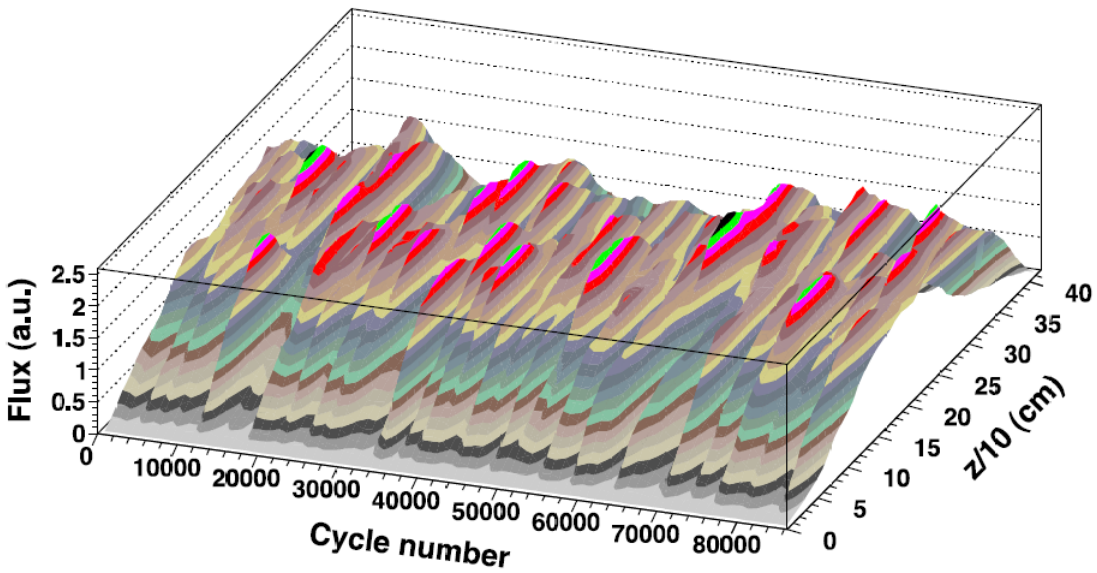


Figure 3.1 Flux dans un crayon REP en fonction du nombre de cycles et de la position en Z (axe de cellule)

Ces corrélations entrainent également un biais sur l'estimation de la variance (elle est

sous-estimée). Ces biais peuvent entrainer une dissymétrie apparente sur les distributions de flux de systèmes symétriques.

L'objet de notre méthode est d'accélérer la convergence des sources de fission, et ainsi limiter les effets des corrélations induites par la méthode d'itération de puissance, et de réduire le nombre de cycles non significatifs. Nous proposons de fournir à TRIPOLI une distribution précise de sources de fissions. On lui donne la forme, la localisation de ces sources, et également leur intensité. En effet, TRIPOLI calcule automatiquement l'intensité des sources de neutrons si celle-ci n'est pas spécifiée. Les codes déterministes, et notamment le code DRAGON sont des outils performants pour résoudre avec précision des problèmes de type criticité. La méthode que nous souhaitons mettre en place consiste à calculer une distribution de sources de fissions et les intensités correspondantes, et de l'implémenter en entrée du calcul TRIPOLI.

Le chapitre 4 présente le détail de cette méthode et sa mise en place dans les deux codes, le problème traité qui permet ensuite de tester et valider cette méthode, et d'en éprouver les capacités et les performances.

3.2.2 Biaisage du calcul Monte Carlo par l'adjoint déterministe

Nous avons décrit au chapitre précédent les techniques de réduction de variance dans le cadre de simulations Monte Carlo non analogues. Ces techniques sont notamment utiles pour simuler un cas de figure de type protection, qui met en jeu des neutrons qui, à partir d'une source, se propagent dans un milieu non multiplicateur et absorbant. La forte atténuation du flux ne permet donc qu'à un faible nombre de neutrons de contribuer à la réponse d'un détecteur placé loin de la source, la réponse de ce détecteur correspondant à une grandeur d'intérêt que l'on souhaite calculer, et donnée par la relation (2.25). Le développement suivant, qui fait référence à (Lewis et Miller Jr (1993)), vise à justifier la notion d'importance du flux adjoint et son utilisation dans le cadre du biaisage d'un calcul Monte Carlo.

En écrivant sous forme matricielle les formes directe et adjointe de l'équation de transport on a, pour un problème à source connue $q(P)$:

$$H\phi(P) = q(P) \tag{3.13}$$

$$H^{+}\phi^{+}(P) = q^{+}(P) \tag{3.14}$$

avec P un point de l'espace des phases, $q^{+}(P)$ la source adjointe et H et H^{+} les opérateurs direct et adjoint de transport, obtenus à partir des équations intégrodifférentielles directe et

adjointe de transport pour un problème à source :

$$H\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) = [\vec{\Omega}.\vec{\nabla} + \sigma(\vec{r},E)]\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E) \\ - \int dE' \int d\vec{\Omega}'\sigma_s(\vec{r},E' \to E, \vec{\Omega}'.\vec{\Omega})\phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E') \tag{3.15}$$

$$H^+\phi^+(\vec{r},\vec{\Omega},E) = [-\vec{\Omega}.\vec{\nabla} + \sigma(\vec{r},E)]\phi^+(\vec{r},\vec{\Omega},E) \\ - \int dE' \int d\vec{\Omega}'\sigma_s(\vec{r},E \to E', \vec{\Omega}.\vec{\Omega}')\phi^+(\vec{r},\vec{\Omega}',E') \tag{3.16}$$

On peut donc relier le flux adjoint, solution de l'équation intégrodifférentielle adjointe et le flux direct par :

$$\langle \phi^+(P), H\phi(P) \rangle = \langle \phi(P), H^+\phi^+(P) \rangle \tag{3.17}$$

On a ainsi la relation liant les flux direct et adjoint et les sources directe et adjointe donnée par :

$$\langle \phi(P), q^+(P) \rangle = \langle \phi^+(P), q(P) \rangle \tag{3.18}$$

$\langle\rangle$ correspond au produit scalaire de deux variables sur l'espace des phases, défini de la manière suivante :

$$\langle \phi(P), q^+(P) \rangle = \int_{\text{Domaine}} \phi(P)q^+(P)dP \tag{3.19}$$

La source adjointe correspond typiquement à la réponse $f(P)$ du détecteur, soit 1 pour un calcul de flux, ou σ_i pour un calcul de taux de réaction. De l'équation 3.18 on peut écrire une nouvelle forme de la réponse du détecteur :

$$R = \int_P \phi^+(P)q(P)dP \tag{3.20}$$

Cette relation donne donc la réponse du détecteur comme l'intégrale de la source pondérée par le flux adjoint. En particulier, supposons une source émettant des particules au point r_0 selon la direction Ω_0 à une énergie E_0 à une intensité d'un neutron par seconde, la source s'écrit :

$$q = \delta(r - r_0)\delta(\Omega.\Omega_0)\delta(E - E_0) \tag{3.21}$$

La réponse du détecteur devient dans ce cas :

$$R = \phi^+(r_0, \Omega_0, E_0) \tag{3.22}$$

On illustre ici le sens physique du flux adjoint comme la contribution d'un neutron situé en

un point $P_0 = (r_0, \Omega_0, E_0)$ de l'espace des phases à la réponse du détecteur. Le flux adjoint est donc une fonction d'importance et peut être utilisé pour le biaisage Monte Carlo que nous avons développé au chapitre précédent.

Le flux adjoint utilisé ici est associé à la source de neutrons. C'est aussi la solution de l'équation de transport adjointe dans sa forme intégrodifférentielle (3.16), dans laquelle intervient l'opérateur adjoint de transport H^+. C'est donc le flux adjoint intégrodifférentiel qui correspond à la fonction d'importance. DRAGON est capable de résoudre les équations directe et adjointe de l'équation de transport par la méthode des probabilités de collisions (Courau et Marleau (2002), que nous avons développé au chapitre précédent. Nous avons montré que DRAGON était capable de calculer les solutions des équations adjointes intégrale et intégrodifférentielle, respectivement ϕ^* et ϕ^+. D'après le raisonnement précédent, c'est le flux pseudo-adjoint ϕ^+, solution de l'équation adjointe dans sa forme intégrodifférentielle, et tel qu'il est appelé dans le cadre de la méthode des probabilités de collision, qui est adapté aux techniques de réduction de variance.

Nous venons de montrer qu'un couplage entre DRAGON et TRIPOLI utilisant le flux pseudo-adjoint de DRAGON comme fonction d'importance dans TRIPOLI est en théorie pertinent. La deuxième méthode que nous allons mettre en place consiste donc à produire à l'aide de DRAGON des cartes d'importances obtenues à partir du flux pseudo-adjoint, et lisibles dans TRIPOLI. Le chapitre 5 présente le détail de cette technique de pondération du calcul Monte Carlo et sa mise en place dans les deux codes, le problème traité qui permet ensuite de tester et valider cette technique, et d'en éprouver les capacités et les performances comparativement à la méthode INIPOND, générateur interne à TRIPOLI de cartes d'importances.

3.3 Conclusion

Nous venons de présenter les deux chainages envisagés entre DRAGON et TRIPOLI. Chaque méthode va faire l'objet du développement dans DRAGON d'un module capable de générer une liste de sources de fissions compatibles avec TRIPOLI d'une part, et des cartes d'importances neutroniques utilisables pour le biaisage d'autre part. Chaque méthode s'appliquant à un type distinct de cas d'études, celles-ci seront mises en places et testées indépendamment l'une de l'autre. Elles ne sont de plus pas destinées à être appliquées simultanément. Nous choisirons pour chaque méthode une géométrie adaptée. Une étape indispensable sera de comparer les modèles DRAGON et TRIPOLI de cette géométrie. En effet, comme nous allons utiliser les données de DRAGON pour initialiser le calcul TRIPOLI, il est nécessaire

que les modèles numériques réalisés avec les deux codes soient cohérents. Le cas contraire risque de conduire à un biais qui peut détériorer la convergence du calcul TRIPOLI, ce qui est l'effet inverse de celui recherché.

CHAPITRE 4

INITIALISATION DES SOURCES DE NEUTRONS MONTE CARLO PAR DES SOURCES DÉTERMINISTES

Dans ce chapitre nous décrivons dans un premier temps la mise en place du couplage entre DRAGON et TRIPOLI concernant l'utilisation de distributions initiales de sources Monte Carlo issues d'un calcul déterministe. Nous présentons ensuite les assemblages REP réduits et complets utilisés pour tester cette méthode, en effectuant une analyse comparative préliminaire des modélisations DRAGON et TRIPOLI. Enfin, après avoir présenté la mise en application de la méthode, nous discutons de résultats obtenus et des performances de la méthode.

4.1 Mise en œuvre de la méthode

Dans les chapitres précédents nous avons discuté de la convergence des sources de neutrons lors d'un calcul de criticité. Nous avons mis l'accent sur la nécessité de ne pas prendre en compte les premiers cycles d'un calcul Monte Carlo de ce type. La méthode que nous proposons consiste à pré-calculer la distribution initiale de sources de neutrons. L'objectif est d'améliorer la qualité des résultats produits par les premiers batchs du calcul en diminuant plus significativement l'écart-type sur ces cycles, ce que ne peut faire une distribution grossière de sources de neutrons. Pour cela, notre méthode consiste à déterminer une distribution de sources précise à la suite d'un calcul déterministe réalisé par DRAGON. Nous faisons le choix de nous adapter à la syntaxe d'un jeu de données TRIPOLI pour produire cette distribution de sources. Ainsi, seul un développement de DRAGON est nécessaire.

4.1.1 Structure de la liste de sources

La description des sources dans TRIPOLI suit une logique bien précise. Pour chacune d'elles on doit définir une distribution spatiale, angulaire, énergétique et temporelle, et le code calcule l'intensité de chaque source à partir de ces informations. On peut aussi imposer une intensité aux sources, la production des neutrons respectera cependant les distributions préalablement définies. Cette fonctionnalité va nous permettre d'utiliser une intensité calculée par DRAGON, comme nous le verrons dans la section suivante. Nous décrivons ici la structure

d'une source dans TRIPOLI, en évoquant principalement les options de définition utiles aux géométries qui serviront à la tester.

La distribution spatiale permet de positionner la source dans la géométrie. La source peut être ponctuelle ou distribuée de manière continue sur un volume donné. Notre méthode vise à définir de manière précise la localisation des sources de neutrons. C'est la deuxième option qui sera implémentée et utilisée. On doit associer la source à un numéro de volume de la géométrie de TRIPOLI. On définit ensuite une distribution sur ce volume. Beaucoup de calculs de criticité concernent des géométries de type cellule, assemblage ou coeur de réacteur. Les sources de neutrons sont localisées dans les crayons de combustible. Nous sommes donc amenés principalement à traiter des sources de forme cylindrique. Pour simplifier la mise en place de la méthode, nous considérerons que chaque source est uniforme sur tout le volume qu'elle occupe. La précision de la distribution dépendra donc du nombre de sources que nous placerons dans un crayon de combustible.

La distribution angulaire définit la direction des trajectoires des neutrons émis par la source. Dans notre étude nous considérons que leur émission est réalisée de manière isotrope (les sources de fission le sont, sauf à très haute énergie). De plus, nous nous intéressons uniquement à des problèmes en régime stationnaire. La source est donc définie comme indépendante du temps.

La distribution énergétique donne l'énergie des neutrons émis. Elle se base en principe sur le spectre de fission des isotopes fissiles. Nous choisissons d'explorer deux approches que nous comparerons par la suite. La première est d'utiliser la discrétisation énergétique du calcul DRAGON. On a une source par groupe où le spectre de fission est non nul. Sur chaque groupe d'énergie, l'émission des neutrons est uniforme. La deuxième option est de d'associer à une source un spectre de fission. L'émission est ainsi pondérée en énergie par ce spectre. Dans TRIPOLI, il est possible d'utiliser un spectre de Watt, défini comme :

$$S(E) = Ce^{-aE}\sinh(\sqrt{bE}) \tag{4.1}$$

avec :

$$C = 2e^{\frac{-b}{4a}}\frac{a^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi b}} \tag{4.2}$$

Le spectre de Watt est une approximation analytique du spectre de fission de l'uranium 235. Pour cet isotope, les paramètres a et b valent : $a = 1.012$ et $b = 2.249$. Il couvre une plage énergétique allant de $10^{-3}MeV$ à $19.64MeV$.

4.1.2 Le module STR :

L'implémentation de notre méthode requiert la création d'un module dans DRAGON qui va générer un fichier contenant une liste de sources de neutrons. Il suffira d'incorporer cette liste dans le jeu de données TRIPOLI pour pouvoir utiliser la méthode. La production de ces sources s'effectue en plusieurs étapes.

La première étape consiste à calculer pour chaque région de la géométrie DRAGON, et pour chaque groupe d'énergie, l'intensité de la source de neutrons correspondante. Cette intensité $I_g(i)$ est calculée comme suit :

$$I_g(i) = \sum_{j=1}^{N_f} \chi_{j,g} \left(\sum_{g'=1}^{N_g} \nu\Sigma_{f,i,j,g'} \Phi_{i,g'} V_i \right) \tag{4.3}$$

avec :

- N_f le nombre d'isotopes fissiles,
- N_g le nombre de groupes,
- $\chi_{g,j}$ le spectre associé à l'isotope j dans le groupe g
- $\nu\Sigma_{f,i,g}\Phi_{i,g}$ le taux de production de neutrons dans la région i pour le groupe g,
- V_i le volume de la région i.

On obtient l'intensité totale $I(i)$ de la région i en sommant les $I_g(i)$ sur l'ensemble des groupes.

Si on utilise un spectre moyen χ pour l'ensemble des isotopes (dans certaines bibliothèques, et notamment la bibliothèque JEFF3.1 utilisée par la suite, les spectres de fissions sont les mêmes pour tous les isotopes fissiles), ou si on souhaite pondérer l'intensité totale par un spectre de Watt, $I(i)$ se calcule désormais comme :

$$I(i) = \sum_{g=1}^{N_g} \nu\Sigma_{f,i,g} \Phi_{i,g} V_i \tag{4.4}$$

Pour obtenir les $I_g(i)$, on pondère l'intensité totale par le spectre de fission multigroupe χ_g considéré. On détermine ainsi, pour chaque région, une intensité pour chaque groupe.

$$I_g(i) = I(i)\chi_g \tag{4.5}$$

Le code identifie les régions pour lesquelles l'intensité totale $I(i)$ est non nulle. L'utilisateur entre ensuite dans le jeu de données DRAGON les numéros de volumes correspondant à la géométrie TRIPOLI et le type de source qu'il souhaite produire. Comme nous l'avons mentionné précédemment, nous souhaitons tester une distribution de sources discrétisée en

énergie d'une part, et une distribution de source pondérée par un spectre de Watt dans TRIPOLI d'autre part. DRAGON associe pour chaque numéro de volume la région fissile correspondante.

Dans les deux cas, le module est capable de générer une liste de source ayant la syntaxe adaptée. Pour la première option il fournit les bornes énergétiques des groupes considérés, utilise $I_g(i)$ comme valeur d'intensité de chaque source, et définit le nombre total de source à partir de l'ensemble des régions fissiles et des groupes où le spectre de fission est non nul.

Pour la deuxième, l'option d'utilisation du spectre de Watt est reprise, l'intensité de la source correspond à la valeur $I(i)$ donnée par l'équation 4.4, et le nombre de sources est le nombre de régions fissiles. La pondération de l'intensité par le spectre se fait en interne de TRIPOLI. Le spectre de Watt étant ici utilisé en énergie continue, l'équation 4.5 ne s'applique pas dans ce cas.

On note que la première option génère un nombre beaucoup plus élevé de sources que la deuxième. Ce nombre est d'autant plus élevé que la discrétisation énergétique est fine. Dans les deux cas, le nombre de sources augmente avec le nombre de régions fissiles.

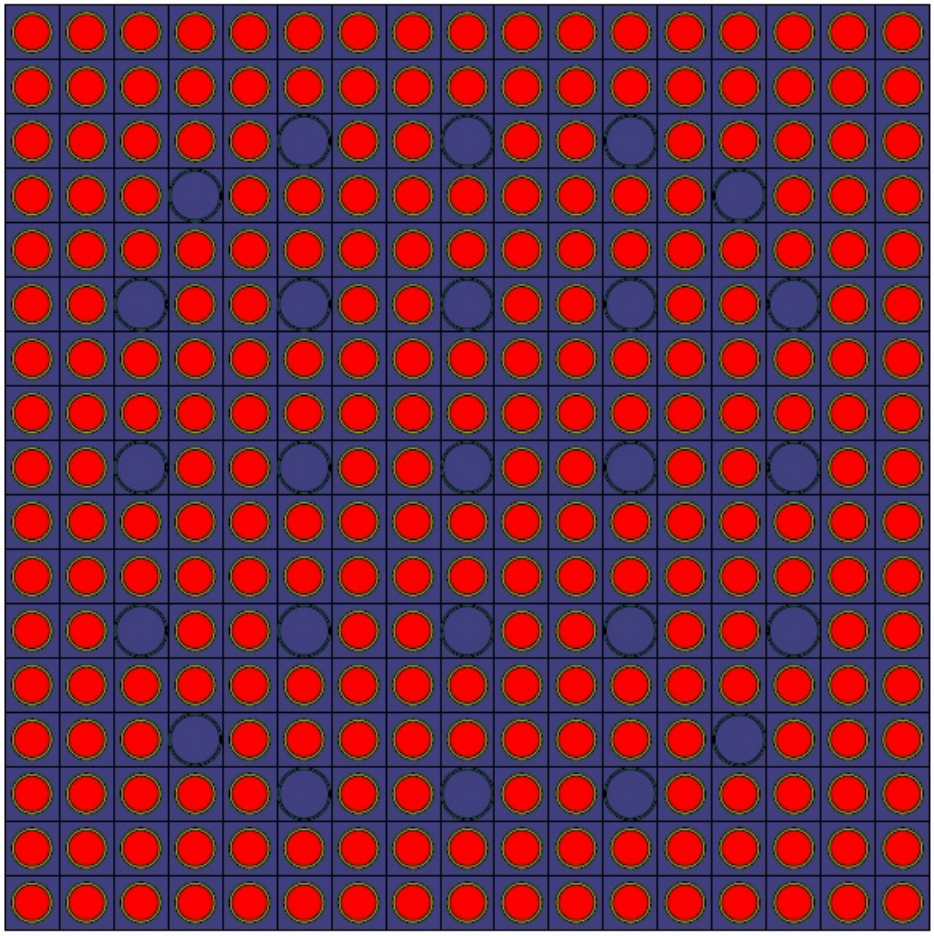
4.2 Présentation du problème traité : l'assemblage REP-UOX

4.2.1 Les assemblages REP-UOX complet et réduit

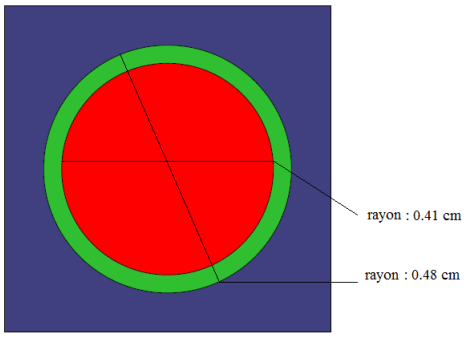
Notre méthode vise à améliorer les performances d'un calcul Monte Carlo en mode criticité, c'est-à-dire pour des problèmes en milieu multiplicateur. Nous avons choisi un assemblage de REP-UOX pour tester ses performances. Il s'agit d'un assemblage classique de 17×17 cellules. 264 cellules contiennent un crayon de combustible, et les 25 autres sont des trous d'eau et ne contiennent que du modérateur et le tube guide des barres absorbantes. Ses caractéristiques sont inspirées des modèles développés par (Le Mer (2007)) et (Barreau (2008)). La figure 4.1 illustre la géométrie de l'assemblage.

Le combustible est constitué d'oxyde d'uranium enrichi à 3,7%. Le modérateur est de l'eau légère qui contient 1100 ppm (parties par million) de bore naturel.

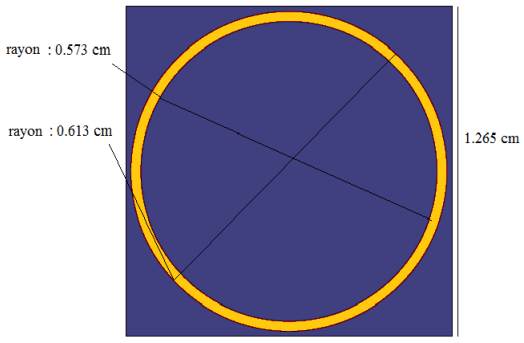
Nous rappelons que tous les mélanges ont une température de 300 K.



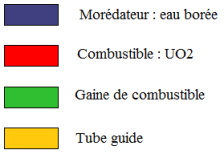
(a) Assemblage REP



(b) Cellule de combustible



(c) Trou d'eau



(d) Mélanges

Figure 4.1 Géométrie de l'assemblage REP

Nous avons également choisi de modéliser un assemblage réduit de 3×3 cellules. La cellule du centre est un trou d'eau et les 8 autres contiennent du combustible. Les dimensions et les compositions des mélanges sont les mêmes que pour l'assemblage entier. Il s'agit donc d'une portion de l'assemblage complet. La figure 4.2 illustre l'assemblage réduit.

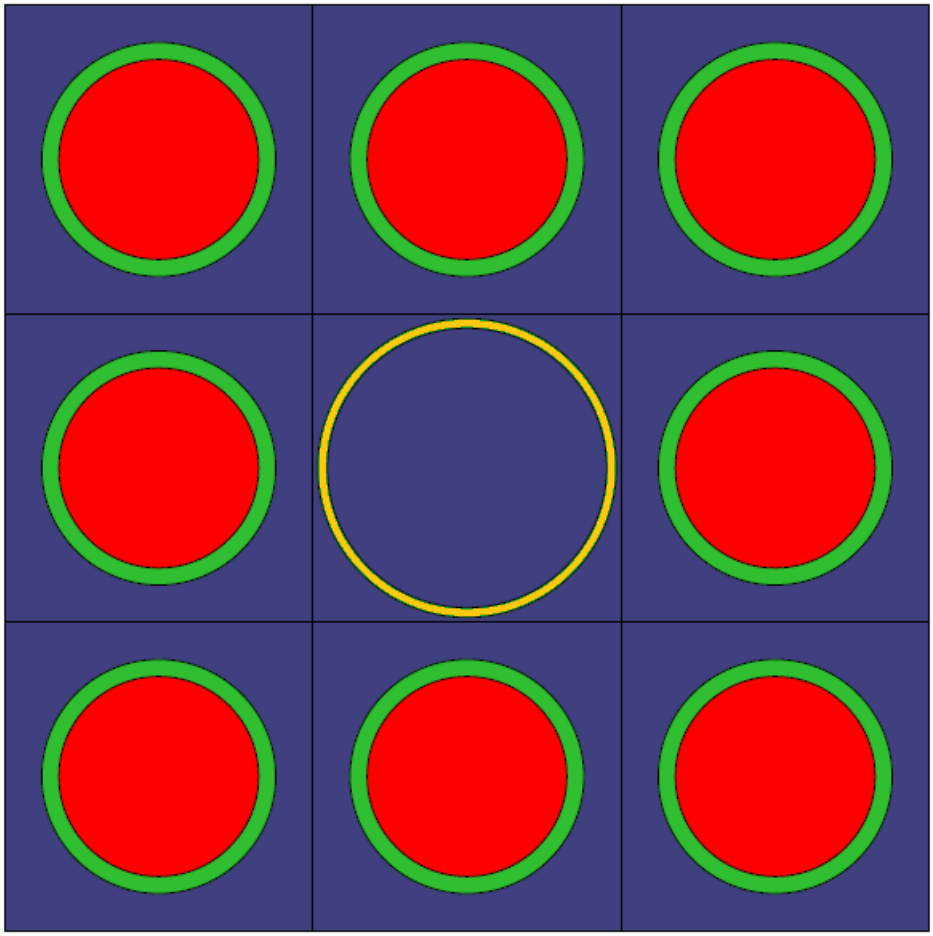


Figure 4.2 Géométrie de l'assemblage réduit

Le choix de l'assemblage réduit a été fait pour faciliter les premiers tests de la méthode d'accélération de convergence. En effet, les calculs sont plus courts sur l'assemblage réduit que sur l'assemblage complet (une analyse de ces temps de calculs sera présentée plus tard dans le document). Les tests sont donc plus rapides, et des conclusions peuvent être tirées assez rapidement. L'assemblage complet permet ensuite de tester les performances de la méthode sur une géométrie plus grosse, donc comportant un nombre de sources plus élevé. L'impact du nombre de sources sur le temps de calcul peut aussi être évalué en comparant le rapport entre le temps d'initialisation des sources et le temps total de simulation dans les 2 cas.

4.2.2 Discussions à propos des choix de modélisation

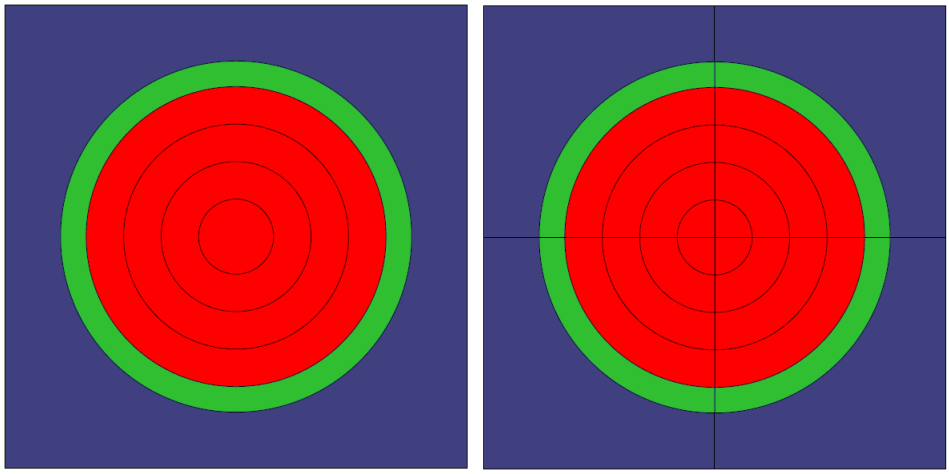
Dans cette section nous discutons des choix effectués pour modéliser en utilisant DRAGON et TRIPOLI les assemblages REP complet et réduit. Nous détaillons ces choix pour l'assemblage complet. On crée à partir de celui-ci les modèles de l'assemblage réduit qui comporte les mêmes options.

Concernant le calcul effectué dans DRAGON, nous choisissons de résoudre l'équation de transport par la méthode des probabilités de collisions. Nous utilisons le module SHI : (Hébert et Marleau (1991)) pour l'autoprotection des résonnances, qui s'appuie sur la méthode de Stamm'ler et utilise la normalisation de Livolant-Jeanpierre. Nous utilisons le module NXT : pour effectuer le tracking de la géométrie. Ce module permet de définir l'assemblage par bloc : chaque cellule (combustible ou trou d'eau) est définie à l'aide de l'option "CELL". On peut de ce fait récupérer plus facilement les données géométriques dans le module STR :. Cette option permet de rassembler automatiquement toutes les régions contenues dans une cellule lors de l'homogénéisation tout en ayant une syntaxe moins lourde que l'homogénéisation par région classique. Nous utiliserons cette commande pour obtenir des flux et taux de réactions moyennés sur chaque cellule dans l'analyse de nos résultats.

Dans le but d'être le plus précis possible, nous découpons radialement les cellules. Nous considérons également une découpe cartésienne de la cellule, que l'on appelle plus communément splitting. La figure 4.3 illustre ces discrétisations spatiales.

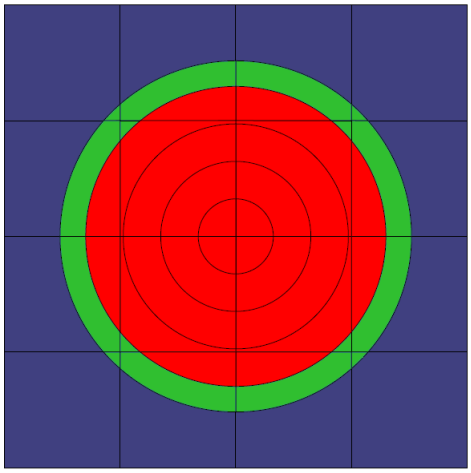
Le choix d'un splitting cartésien permet notamment une simulation plus fine des trous d'eau et de la diffusion des neutrons dans ces milieux. Ces découpages entrainent donc une augmentation significative du nombre de régions, et ont donc un impact important sur le temps de calcul. Pour atténuer cet effet, nous choisissons de ne simuler qu'un huitième d'assemblage en tirant partie des propriétés géométriques de symétrie. Nous appliquons donc des conditions de symétries aux frontières concernées. De ce fait, les lignes de tracking du huitième d'assemblage correspondent à un pliage de la géométrie initiale, ce qui rend les deux modèles identiques. La taille des matrices de probabilités de collisions est réduite. On obtient ainsi les mêmes résultats dans les deux cas, mais le huitième d'assemblage permet d'accélérer la simulation. Cette dernière option n'est pas utile pour l'assemblage réduit qui ne comporte que neuf cellules, le nombre de régions étant de base suffisamment faible pour que le temps de simulation soit court.

Dans TRIPOLI, nous sommes contraints de simuler l'assemblage entier car ces simplifications ne sont pas disponibles. Le nombre de neutrons à simuler a un impact sur le temps de simulation et sur la précision du calcul. De ce fait il est important de trouver un nombre



(a) Découpage radial

(b) Découpage radial et splitting cartésien 2×2



(c) Découpage radial et splitting cartésien 4×4

Figure 4.3 Découpages spatiaux d'une cellule

adéquat permettant de trouver le meilleur compromis possible entre ces deux aspects. Nous analysons ci-après l'influence de ce nombre de neutrons sur la qualité de la modélisation et des résultats.

Nous avons enfin sélectionné trois distributions initiales de sources de neutrons : une source ponctuelle située au coin de l'assemblage, une source ponctuelle située au centre de l'assemblage, et une source distribuée uniformément sur les cellules de combustible. Nous allons étudier l'impact de la source initiale sur les résultats finaux.

Nous vérifions la cohérence de nos modèles en utilisant des sections efficaces issues de l'évaluation ENDF/B-VI. Des bibliothèques à 69 et 172 groupes sont utilisées pour DRA-

GON, c'est l'occasion d'analyser l'impact de la discrétisation en énergie. Pour TRIPOLI nous utilisons des données nucléaires définies de manière continue en énergie, afin d'être le plus proche possible de la réalité. Nous vérifions ensuite ces modèles en utilisant l'évaluation JEFF3.1.

4.2.3 Étude comparative des modèles DRAGON et TRIPOLI

Nous présentons ici les résultats des simulations de l'assemblage REP menées avec DRAGON et TRIPOLI. Nous nous intéressons au calcul du facteur de multiplication effectif, des distributions du flux et du taux de collision sur l'assemblage. Une fois la cohérence des modèles de l'assemblage complet démontrée, nous vérifions que les modèles de l'assemblage réduit construits à partir de ceux de l'assemblage entier sont aussi cohérents.

Étude du facteur de multiplication effectif

Pour le calcul du k_{eff} par TRIPOLI, nous nous intéressons aux résultats fournis par les estimateurs décrits dans le chapitre 2 : KTRACK (2.32), KCOLL (2.33) et KSTEP (2.34). Ils sont tous les trois utilisés automatiquement lors d'une simulation TRIPOLI. Leur écart-type n'est pas supposé décroitre à la même vitesse, mais le temps de calcul est le même pour une simulation donnée. L'évaluation ENDF/B-VI est tout d'abord utilisée.

Le tableau 4.1 donne les valeurs du k_{eff} pour une simulation de 1 000 cycles de 10 000 neutrons pour les trois options d'initialisation de source. Les écart-types sont donnés en pcm (10^{-5}).

Tableau 4.1 k_{eff} pour différentes sources initiales (10 000 neutrons par cycle)

Estimateur	Source au coin		Source au centre		Source uniformément distribuée	
Grandeur	k_{eff}	Écart-type (pcm)	k_{eff}	Écart-type (pcm)	k_{eff}	Écart-type (pcm)
KSTEP	1,23953	37	1,23859	37	1,23999	38
KCOLL	1,23949	36	1,23856	36	1,23969	36
KTRACK	1,23949	49	1,23951	48	1,23856	49

On remarque que l'estimateur KCOLL est le plus rapide à converger. On observe cependant des différences d'environ 100 pcm entre deux simulations, alors que l'écart-type vaut environ 50 pcm. La distribution initiale de sources n'est pas supposée avoir d'impact sur le résultat final. Il est donc nécessaire d'affiner ces résultats.

En augmentant le nombre de neutrons par cycle (100 000 au lieu de 10 000 précédemment), nous obtenons les résultats donnés par le tableau 4.2.

Tableau 4.2 k_{eff} pour différentes sources initiales (100 000 neutrons par cycle)

Estimateur	Source au coin		Source au centre		Source uniformément distribuée	
Grandeur	k_{eff}	Écart-type (pcm)	k_{eff}	Écart-type (pcm)	k_{eff}	Écart-type (pcm)
KSTEP	1,23897	12	1,23910	12	1,23903	12
KCOLL	1,23894	11	1,23909	11	1,23904	11
KTRACK	1,23893	15	1,23918	15	1,23886	15

L'estimateur KCOLL est toujours le plus précis, et l'écart type a été divisé par $\sqrt{10}$, ce qui correspond à multiplier par 10 le nombre d'histoires simulées. Les k_{eff} calculés par les 3 estimateurs sont plus proches les uns des autres avec 100 000 neutrons par cycle par rapport à 10 000 neutrons par cycle. Pour deux sources initiales différentes, la différence maximale entre deux simulations est de 16 pcm, soit équivalente aux écart-types observés. On peut donc négliger cette différence, et considérer que la distribution initiale de source n'influe pas sur la valeur finale du k_{eff}, à condition de simuler suffisamment de neutrons.

Comparons maintenant les valeurs de k_{eff} obtenues avec DRAGON et TRIPOLI. L'estimateur KCOLL étant le plus précis, nous utilisons sa valeur pour la comparer à DRAGON.

Tableau 4.3 Comparaison des k_{eff} calculés par DRAGON et TRIPOLI (ENDF/B-VI)

Estimateur	Source au coin		Source au centre		Source uniformément distribuée	
Grandeur	k_{eff}	Différence (pcm)	k_{eff}	Différence (pcm)	k_{eff}	Différence (pcm)
TRIPOLI (KCOLL)	1,23894	-	1,23909	-	1,23904	-
DRAGON (69 groupes)	1,23770	-124	1,23770	-140	1,23770	-134
DRAGON (172 groupes)	1,24066	172	1,24066	153	1,24066	162

On observe une différence d'environ 150 pcm entre les deux codes. En utilisant une bibliothèque à 69 groupe, DRAGON sous-estime le k_{eff} par rapport à TRIPOLI. Cet effet est inversé avec une bibliothèque DRAGON à 172 groupes, ce qui entraine une différence de 300 pcm entre les calculs DRAGON menés avec ces deux bibliothèques. Comme nous le montrons par la suite, nous observons ce même phénomène avec l'évaluation JEFF3.1. Il semble s'agir d'un effet systématique. Nous aurions pu nous attendre à avoir des valeurs calculées par TRIPOLI plus proches de celles calculées à 172 groupes qu'à 69 par DRAGON, alors qu'elles sont finalement comprises entre les deux. Cela pourrait indiquer une compensation d'erreur de la part de DRAGON. Le traitement de l'autoprotection des résonances peut aussi être une des causes de cet écart. Cependant, ces écarts restent relativement faibles, et peuvent être considérés comme acceptables. Les modèles DRAGON et TRIPOLI de l'assemblage REP semblent être cohérents pour le calcul du k_{eff}. Nous vérifions cette cohérence en réitérant ces calculs en utilisant l'évaluation JEFF3.1. Nous ne montrons ici (tableau 4.4) que les résultats pour un calcul TRIPOLI à 100 000 neutrons par cycle, avec une source initiale placée au centre de l'assemblage.

Tableau 4.4 Comparaison des k_{eff} calculés par DRAGON et TRIPOLI (JEFF3.1)

Grandeur	k_{eff}	Différence (pcm)
TRIPOLI (KCOLL)	1,23858	-
DRAGON (69 groupes)	1,23703	-151
DRAGON (172 groupes)	1,24005	151

On retrouve avec JEFF3.1 les différents écarts observés avec ENDF/B-VI. L'évaluation des données nucléaires ne semble donc pas avoir d'influence sur les écarts observés sur le k_{eff}. La cohérence des modèles DRAGON et TRIPOLI est donc démontrée pour le calcul du k_{eff}. Notons aussi que les deux évaluations donnent le même k_{eff} à 50 pcm près.

De la même façon, on simule pour les évaluations ENDF/B-VI et JEFF3.1 l'assemblage réduit. On peut considérer comme acquis que 100 000 neutrons par cycle permettent de négliger l'influence de la distribution initiale de source. Ayant également observé une convergence meilleure de l'estimateur KCOLL, celui-ci est le seul présent dans le tableau 4.5 qui répertorie les résultats :

Tableau 4.5 Comparaison des k_{eff} calculés par DRAGON et TRIPOLI (JEFF3.1)

Grandeur	k_{eff}	Différence (pcm)
TRIPOLI (KCOLL)	1,230381	-
DRAGON (69 groupes)	1,22880	-163
DRAGON (172 groupes)	1,231955	157

Comme pour l'assemblage complet, on observe autour de 150 pcm d'écart entre les k_{eff} de DRAGON et TRIPOLI, celui de TRIPOLI étant toujours situé au centre des valeurs calculées par DRAGON pour 69 et 172 groupes d'énergie. L'écart de l'ordre de 300 pcm entre les calculs DRAGON à 69 et 172 groupes se retrouve pour tous les calculs réalisés avec le même schéma de calcul, dans lequel on procède à l'autoprotection des résonances avant de résoudre l'équation de transport par la méthode des probabilités de collision. On peut de la même façon que pour l'assemblage complet considérer que les modèles DRAGON et TRIPOLI de l'assemblage réduit sont cohérents pour le calcul du k_{eff}.

Étude du flux neutronique

Le flux scalaire auquel nous allons nous intéresser est homogénéisé par cellule et condensé à deux groupes d'énergie : un groupe rapide et un groupe thermique, la frontière entre les deux placée à une énergie de 0.625 eV. Avant de comparer les flux calculés par DRAGON et TRIPOLI, nous devons normaliser le flux de DRAGON par rapport à celui de TRIPOLI. En effet, dans le cadre d'une simulation en mode critique en milieu multiplicateur, le flux

est le vecteur propre associé à la valeur propre de l'équation de transport. Dans DRAGON le flux est normalisé à 1 neutron de fission dans l'assemblage. La normalisation du flux de DRAGON par rapport à celui de TRIPOLI est obtenue par la formule suivante :

$$\phi_{i,g}^{\text{normalisé}}(\text{DRAGON}) = \phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{DRAGON}) \frac{\sum_i \sum_g V_i(\text{TRIPOLI}) \phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{TRIPOLI})}{\sum_i \sum_g V_i(\text{DRAGON}) \phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{DRAGON})} \quad (4.6)$$

avec :

- $\phi_{i,g}^{\text{normalisé}}(\text{DRAGON})$ le flux de DRAGON normalisé
- $\phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{DRAGON})$ le flux calculé par DRAGON
- $\phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{TRIPOLI})$ le flux calculé par TRIPOLI
- $V_i(\text{DRAGON})$ le volume de la région i considérée dans DRAGON
- $V_i(\text{TRIPOLI})$ le volume de la région i considérée dans TRIPOLI

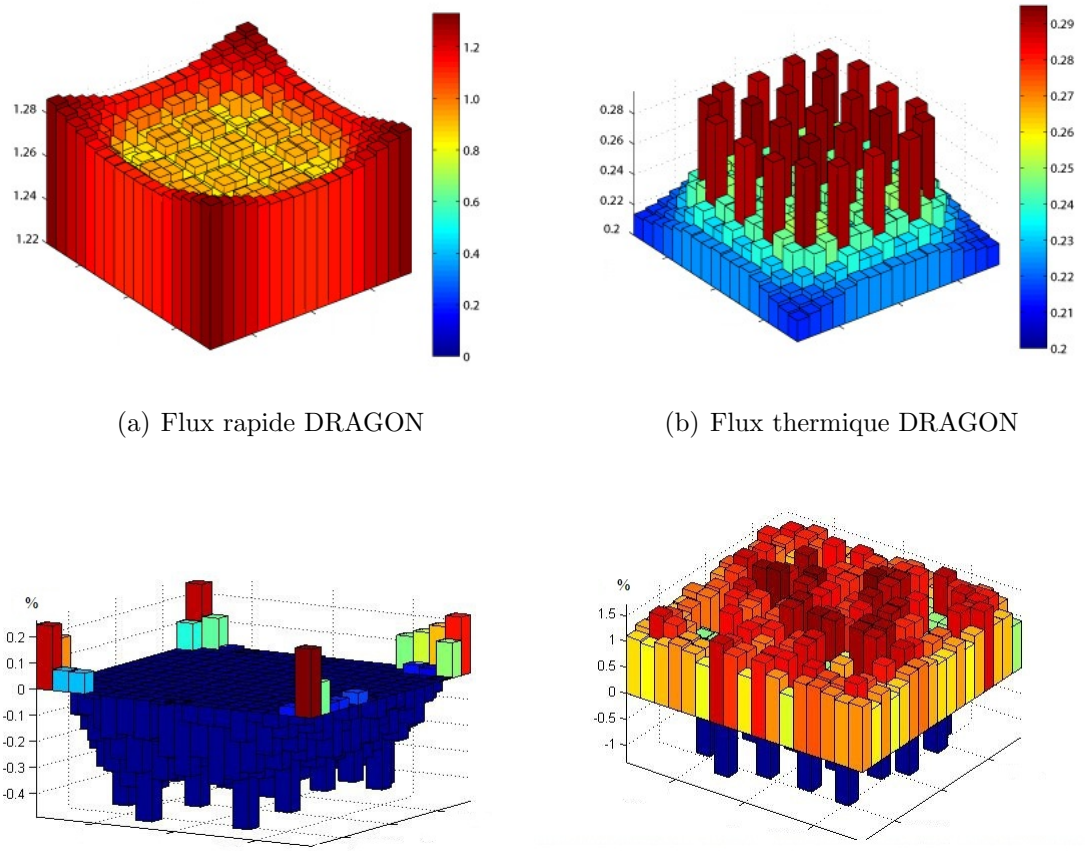
On calcule ensuite les différences relatives entre les flux de DRAGON et TRIPOLI pour chaque cellule de l'assemblage :

$$\Delta\phi_{i,g}(\%) = 100 \frac{\phi_{i,g}^{\text{normalisé}}(\text{DRAGON}) - \phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{TRIPOLI})}{\phi_{i,g}^{\text{calculé}}(\text{TRIPOLI})} \quad (4.7)$$

Les calculs effectués par DRAGON montrent que le découpage énergétique a une influence mineure sur la distribution du flux sur l'assemblage : le passage de 69 à 172 groupes n'a pas un impact significatif sur les différences observées entre DRAGON et TRIPOLI. Nous avons également observé que les évaluations des données nucléaires disponibles fournissaient des distributions et des écarts de flux très proches. La cohérence de nos modèles semble donc indépendante de l'évaluation choisie.

On illustre en figure 4.4 les distributions de flux sur l'assemblage dans les domaines rapide et thermique, ainsi que les distributions des erreurs entre DRAGON et TRIPOLI, pour l'évaluation ENDF/B-VI. Les flux de DRAGON sont ici présentés pour une simulation à 172 groupes d'énergie.

On observe que les flux rapides calculés par DRAGON et TRIPOLI sont très proches à travers l'assemblage. Une sous-estimation maximale de TRIPOLI de 0.4% est à noter. Les différences sont plus marquées au niveau du flux thermiques : elles atteignent un maximum de 1.5% au niveau des cellules de combustible. À noter que l'incertitude maximale sur le flux calculé par TRIPOLI vaut 0.07% dans le domaine rapide, et 0.17% dans le domaine thermique. L'utilisation du splitting cartésien des cellules de combustible n'a quasiment pas d'effet. Le combustible ne semble pas être sensible à ce type de discrétisation spatiale.



(a) Flux rapide DRAGON

(b) Flux thermique DRAGON

(c) Écart relatif sur les flux rapides

(d) Écart relatif sur les flux thermiques

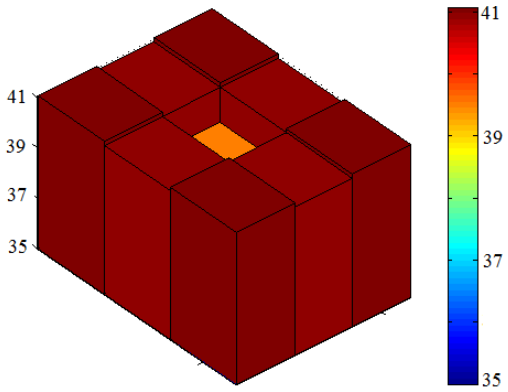
Figure 4.4 Distribution des flux et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage REP

En revanche, on observe une sensibilité notable des trous d'eau au recours au splitting cartésien. Sans splitting, l'écart entre DRAGON et TRIPOLI est proche de 1,7%. Il décroit lorsque l'on affine le splitting cartésien, et ne vaut plus que 1% en utilisant une discrétisation cartésienne de 4×4 régions combinée à la discrétisation radiale initiale, pour un passage de 6 à 52 régions par trou d'eau. Ce comportement est compréhensible puisque ces cellules contiennent principalement de l'eau légère, dont le pouvoir de ralentissement des neutrons est important. De plus, la méthode des probabilités de collisions ne tient pas compte de l'anisotropie de la diffusion. De fait il faut, pour compenser cette approximation, considérer des régions plus petites.

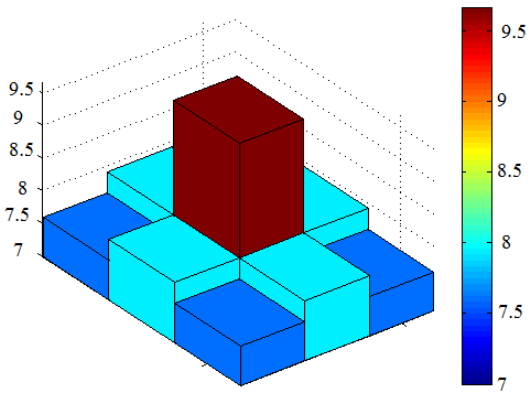
Nous avons donc trouvé les paramètres permettant d'obtenir des modèles cohérents de l'assemblage REP. Un modèle DRAGON utilisant une discrétisation spatiale uniquement radiale pour les cellules de combustible est suffisant, et la combinaison d'une discrétisation

radiale et d'une discrétisation cartésienne pour les trous d'eau est nécessaire.

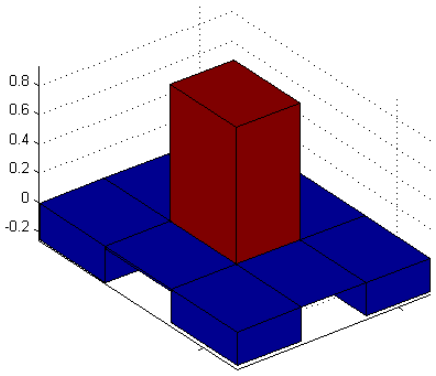
En appliquant ces options sur le modèle DRAGON de l'assemblage réduit, on obtient de la même façon les distributions du flux et de l'erreur entre DRAGON et TRIPOLI. (figure 4.5)



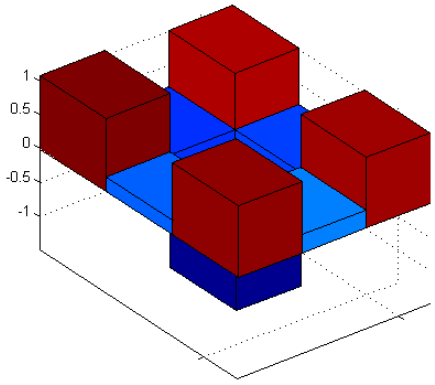
(a) Flux rapide DRAGON



(b) Flux thermique DRAGON



(c) Écart relatif sur les flux rapides



(d) Écart relatif sur les flux thermiques

Figure 4.5 Distribution des flux et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage réduit

On observe des écarts équivalents à ceux calculés pour l'assemblage complet. Ces faibles écarts montrent que l'assemblage réduit a été correctement construit à partir de l'assemblage complet.

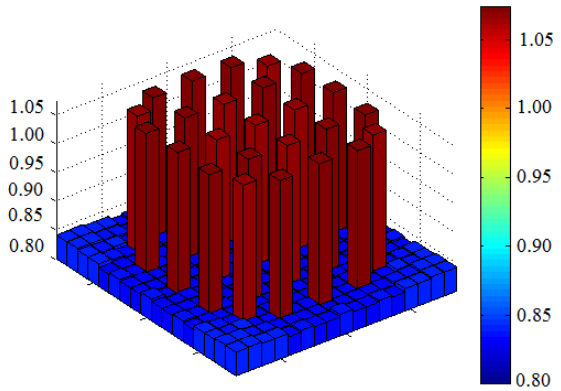
Étude du taux de collision

Nous nous intéressons enfin au taux de collision des neutrons avec la matière dans l'assemblage. On rappelle la formule du taux de collision.

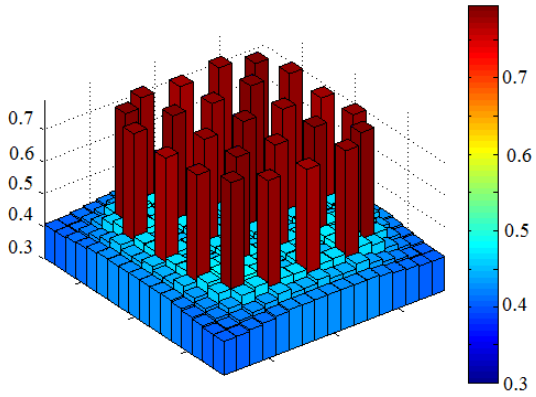
$$\tau_{collision} = \Sigma_t \phi \tag{4.8}$$

Le taux de collision dépendant du flux, les choix de simulations déterminés précédemment sont supposés être valables pour vérifier la cohérence du calcul d'un taux de réaction. Il faut selon le même principe que pour le flux, normaliser le taux de collision calculé par DRAGON par rapport à celui calculé par TRIPOLI. On remplace ainsi dans l'équation 4.6 les flux par les taux de réaction.

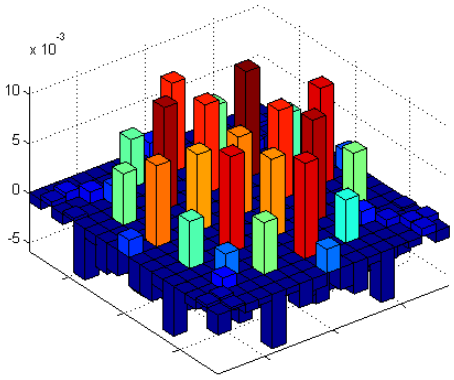
On trace de la même façon que précédemment les distributions des taux de réaction et des erreurs entre DRAGON et TRIPOLI calculées de manière équivalente à l'équation 4.7.



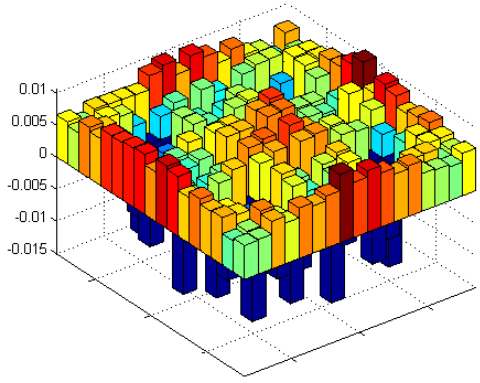
(a) Taux de collision rapide DRAGON



(b) Taux de collision thermique DRAGON



(c) Écart relatif sur les taux de collision rapides

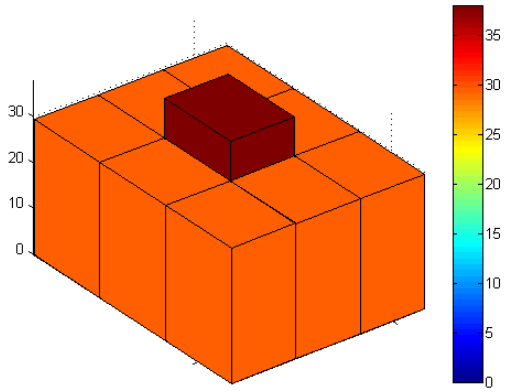


(d) Écart relatif sur les taux de collision thermiques

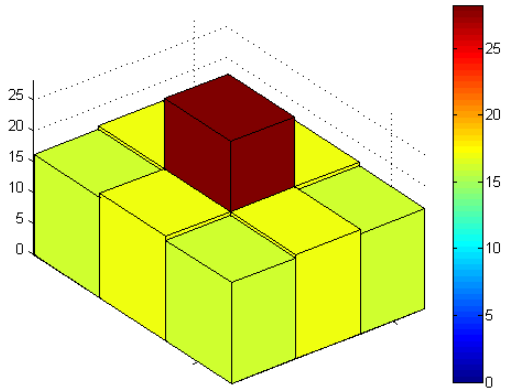
Figure 4.6 Distribution des taux de collision et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage REP

Les écarts observés sur les taux de collision sont extrêmement faibles : de l'ordre de 0.003% dans le domaine rapide, et de l'ordre de 0.01% dans le domaine thermique. L'étude du taux de collision fournit donc d'excellents résultats et confirme la cohérence des modèles observée sur le flux et le k_{eff}. Ces écarts sont même très inférieurs à ceux calculés sur le flux. L'usage du splitting cartésien sur les trous d'eau permet d'avoir des écarts comparables à ceux observés sur les crayons de combustible.

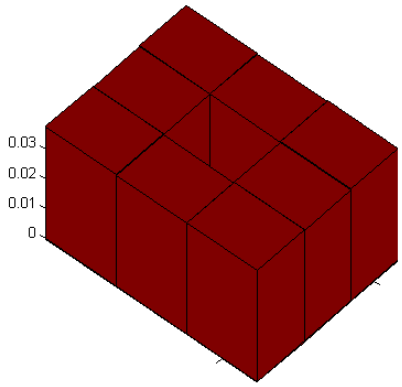
De même, on obtient pour l'assemblage réduit des distributions de taux de collision très proches (figure 4.7)



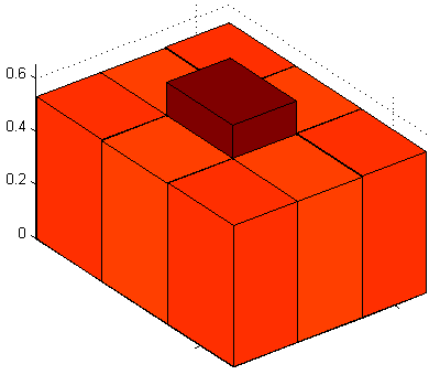
(a) Taux de collision rapide DRAGON



(b) Taux de collision thermique DRAGON



(c) Écart relatif sur les taux de collision rapides



(d) Écart relatif sur les taux de collision thermiques

Figure 4.7 Distribution des taux de collision et des écarts relatifs entre DRAGON et TRIPOLI sur l'assemblage réduit

L'observation du taux de collision valide donc la cohérence des modèles DRAGON et TRIPOLI des assemblages REP complet et réduit.

Conclusion

Cette étude préalable a permis de définir les options de calcul à appliquer aux modèles DRAGON et TRIPOLI des assemblages REP complet et réduit. Dans TRIPOLI, il est nécessaire de simuler 1000 cycles de 100 000 neutrons chacun pour obtenir des résultats suffisamment convergés. Dans DRAGON, une discrétisation cartésienne, additionnelle à la discrétisation radiale effectuée sur toutes les cellules, opérée sur les trous d'eau permet d'obtenir des cartes de flux et de taux de collision très proches entre DRAGON et TRIPOLI. Nous pouvons donc affirmer que les modèles DRAGON et TRIPOLI des assemblages REP sont cohérents.

Il est donc pertinent de tester sur ces géométries les distributions de sources produites par le nouveau module STR : de DRAGON en entrée d'un calcul TRIPOLI.

4.3 Test et validation de la méthode

Dans cette section nous utilisons les distributions de sources produites par le module STR : pour initialiser les calculs Monte Carlo. Nous nous intéressons principalement au calcul du k_{eff} et du flux. Les taux de réaction étant reliés au flux par les sections efficaces, toutes ces grandeurs sont supposées présenter les mêmes comportements de convergence pour une bibliothèque de données nucléaires donnée. Pour le k_{eff} puis pour le flux, nous présentons tout d'abord les résultats des tests menés sur l'assemblage réduit, puis nous validons nos observations par des tests sur l'assemblage complet.

Notre méthode vise à améliorer la qualité des conditions initiales de l'algorithme d'itération de puissance, et donc la convergence des sources. Nous allons donc observer dans cette section l'évolution des écarts type au fil des batchs.

4.3.1 Choix sur les distributions de sources

Nous choisissons de découper radialement les crayons de combustible en 4 couronnes. Nous produisons dans DRAGON nos sources à partir de la bibliothèque à 172 groupes basée sur l'évaluation JEFF 3.1. Les premiers tests sont menés sur l'assemblage réduit. Nous testons deux types de sources : une source par région pondérée par un spectre de Watt (donné par l'équation 4.1), avec autant de sources par région que de groupes où le spectre de fission est non nul. Dans notre cas, le spectre de fission donné par l'évaluation est non nul sur 92 groupes d'énergie. De ce fait, la deuxième option implique l'utilisation de 92 sources par région. On a donc une source ponctuelle pour le cas de référence, 32 sources distribuées en énergie selon

un spectre de Watt pour lesquelles l'intensité est donnée par l'équation (4.4), et 2944 sources uniformes avec une intensité calculée grâce à l'équation (4.5).

Ces choix ont des conséquences sur le temps d'initialisation du calcul TRIPOLI. En effet, avant de lancer la simulation du premier batch, ce code initialise les réponses à calculer et les sources de neutrons. Pour l'assemblage réduit, l'utilisation d'une source unique par région distribuée selon un spectre de Watt ne change pas ce temps d'initialisation (de l'ordre de 3 secondes), et l'augmente légèrement pour des sources discrétisées en énergie (environ 4 minutes). Un allongement de l'initialisation du calcul était à prévoir, celui-ci reste négligeable comparativement au temps de simulation des batchs (de l'ordre de quelques heures à plus d'une journée en fonction du nombre de grandeurs calculées).

Pour l'assemblage REP-UOX complet, l'utilisation de 4 régions par crayon de combustible donne un nombre de 1064 sources pour la distribution à une source par région pondérée par un spectre de Watt, et plus de 97 000 sources pour des sources multigroupe (46 000 si la bibliothèque utilisée dans DRAGON est à 69 groupes au lieu de 172). L'utilisation d'une source multigroupe dans ces conditions semble incohérent. Ce nombre de sources est trop grand et trop lourd à mettre en place dans TRIPOLI. Même une solution d'une région par crayon et avec calcul DRAGON à 69 groupes amènerait le total des sources à 12 000. Les jeux de données resteraient beaucoup trop gros et trop lourds à prendre en charge par le code. Notre méthode semble donc limitée au niveau du nombre de sources initiales, et donc au niveau de la complexité du problème à traiter. De ce fait, pour travailler avec l'assemblage complet nous ne testerons que la source unique par région pondérée par le spectre de Watt.

4.3.2 Tests de la méthode sur le facteur de multiplication effectif

Nous réalisons les premiers tests de notre méthode sur le k_{eff} de l'assemblage réduit. Nous traçons tout d'abord l'évolution de l'écart type en fonction du batch pour quelques simulations indépendantes du même problème (ici il s'agit de l'assemblage réduit avec une source initiale ponctuelle) : pour chaque simulation, la premier nombre aléatoire de la séquence est différent, ce qui rend les simulations indépendantes.

On note que toutes ces simulations convergent vers la même valeur, mais que leurs évolutions ne sont pas exactement les mêmes. La courbe en gras représente la valeur moyenne des écarts types observés. Les résultats qui vont suivre sont issus de la moyenne de plusieurs simulations indépendantes pour chaque distribution de sources.

La figure 4.9 illustre l'évolution batch par batch du k_{eff}, et des différences entre l'écart-type du cas de référence et celui de la simulation utilisant une distribution de source avec

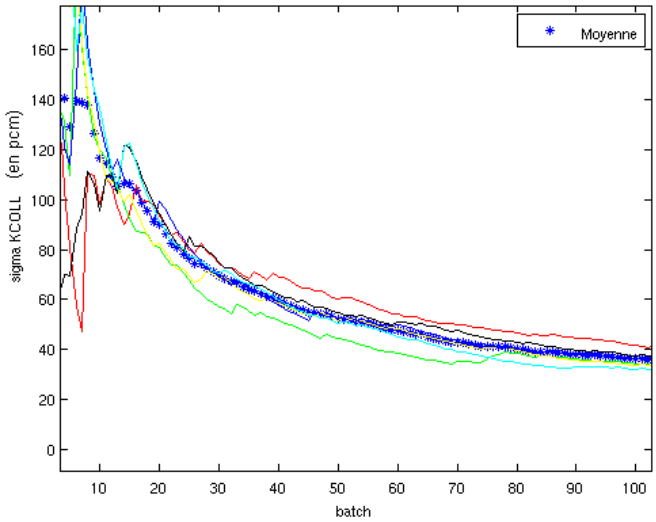
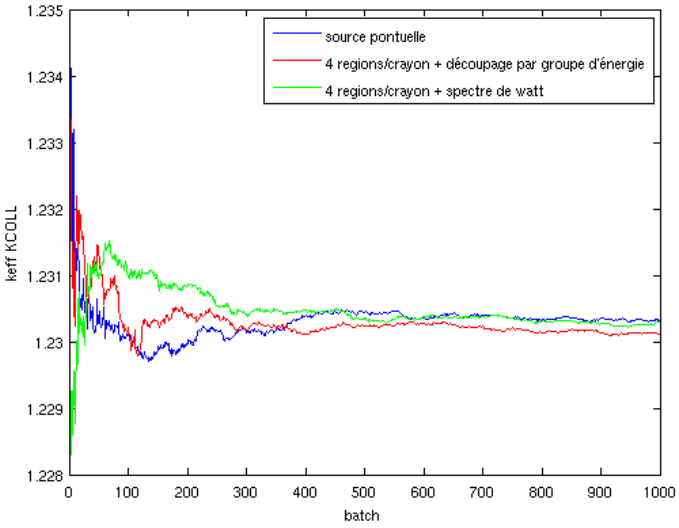
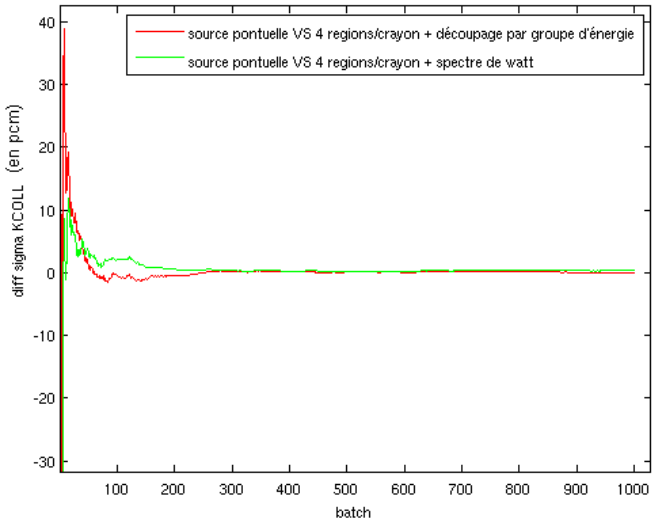


Figure 4.8 Évolution batch par batch des écarts type pour des simulations indépendantes du même problème

spectre de Watt d'une part, et celle entre l'écart-type de la référence et celui de la distribution de sources discrétisées en énergie d'autre part.



(a) k_{eff} pour les trois distributions de sources



(b) Écarts entre l'écart type de référence et les écarts type des calculs à source initiale DRAGON

Figure 4.9 Évolution batch par batch des k_{eff} et des écarts entre les simulations initialisées par différentes sources de fission

On observe un écart-type de la simulation avec source ponctuelle plus élevé que ceux des calculs avec une source initiale générée par DRAGON sur les premiers batchs, avant d'atteindre une valeur équivalente. La source multigroupe donne en début de simulation des résultats plus précis que la source pondérée par un spectre de Watt. La figure 4.10 illustre l'évolution des trois écarts type (en pcm) sur les 100 premiers batchs, et permet d'appuyer ces observations.

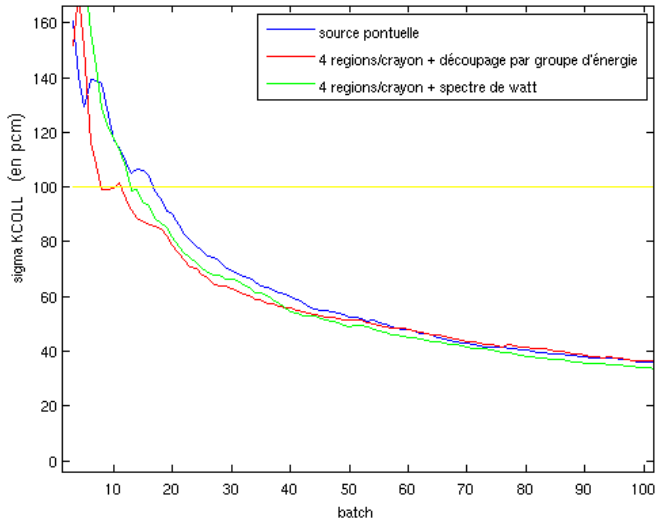


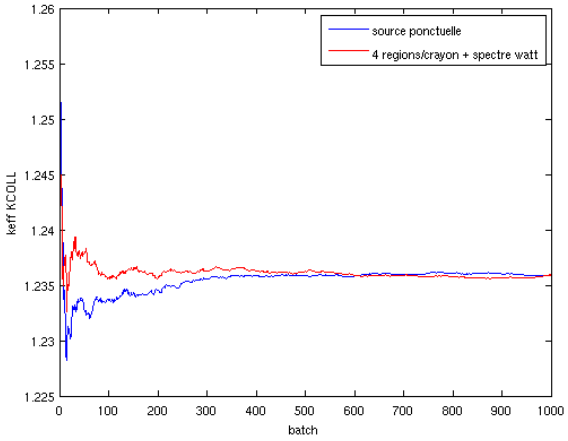
Figure 4.10 Évolution batch par batch des écarts type (en pcm) pour les trois distributions initiales de sources

Sur les premiers batchs, l'écart type associé au calcul avec la source multigroupe est celui qui diminue le plus rapidement. Celui de la simulation avec source pondérée par un spectre de Watt diminue plus vite que celui de la simulation de référence. L'effet désiré est donc observé : dans les premiers cycles du calcul, pour un batch donné, le k_{eff} est plus précis si on utilise une distribution initiale de source produite par DRAGON. Il est cependant à noter que le gain sur l'écart-type reste assez faible, de l'ordre de 10 à 15 pcm au maximum.

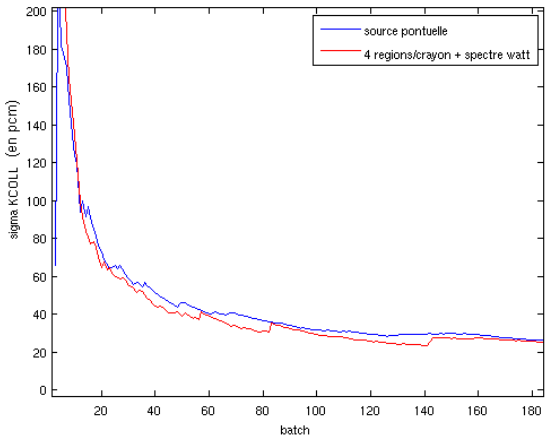
Prenons maintenant un écart type de référence, dans notre cas 100 pcm. L'utilisation d'une source multigroupe permet de gagner 10 batchs, soit environ 6 minutes, et celle d'une source pondérée par un spectre de Watt en gagne 6, soit un peu plus de 4 minutes. Les gains observés en terme de temps de calculs sont très faibles comparativement au temps de calcul total qui s'élève à plusieurs heures. Ces gains permettent de compenser le temps d'initialisation pour la distribution multigroupe des sources.

Intéressons nous maintenant à l'assemblage complet. De la même façon que précédemment, nous traçons l'évolution au fil des batchs du k_{eff} de la simulation avec source ponctuelle

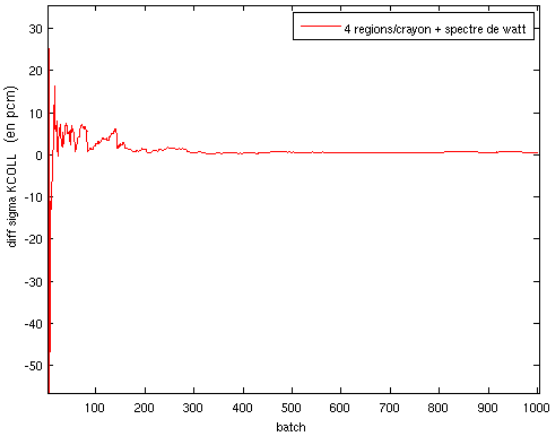
et de la simulation avec source pondérée par un spectre de Watt, ainsi que l'évolution des écarts type associés et de l'écart entre les écarts type des deux simulations.



(a) k_{eff} pour les deux distributions de sources



(b) Écart type pour les deux distributions de sources sur les 200 premiers batchs



(c) Écarts entre l'écart type de référence et l'écart type du calculs à source initiale DRAGON

Figure 4.11 Évolution batch par batch des k_{eff}, des écarts type et des écarts entre les simulations initialisées par différentes sources de fission

On observe sur les premiers batchs que les deux distributions de source donnent des précisions équivalentes. La source distribuée sur les crayons de combustible et pondérée par un spectre de Watt converge ensuite un peu plus rapidement, donnant un gain d'un peu moins de 10 pcm sur l'écart type pour un batch donné. Le gain de temps associé est de quelques minutes, ce qui est insignifiant, étant donné que le calcul dure 10 heures. Les effets de cette distribution de sources étaient les mêmes que ceux observés sur l'assemblage réduit. Notre méthode permet donc d'améliorer très légèrement la convergence du k_{eff} sur l'assemblage complet. Une meilleure précision est en revanche observée sur un nombre plus élevés de cycles.

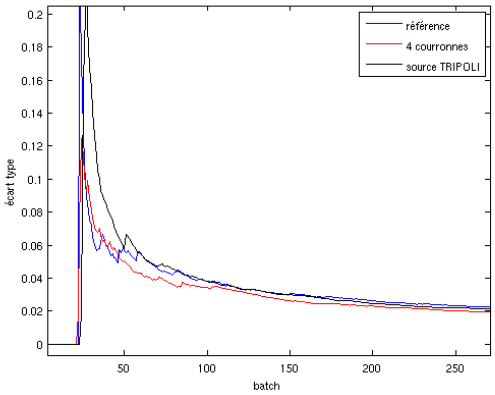
Nous observons donc sur le k_{eff} des assemblages réduit et complet un effet positif mais faible de l'initialisation du calcul par une distribution de source produite par DRAGON. L'utilisation d'une source par groupe d'énergie où le spectre de fission est non nul semble donner de meilleurs résultats qu'une source unique par région et pondérée en énergie selon un spectre de Watt. La première option n'est cependant pas utilisable sur l'assemblage complet, car elle implique la définition d'un nombre trop élevé de sources.

4.3.3 Tests de la méthode sur le flux

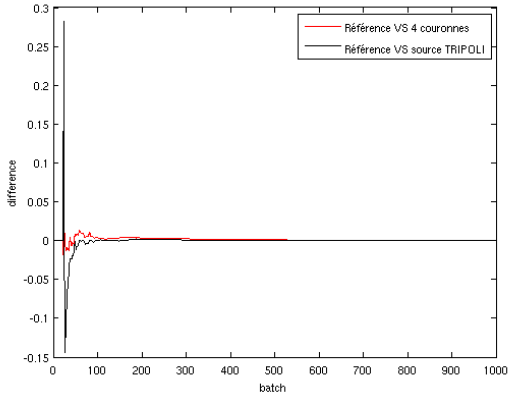
Nous allons de la même façon que précédemment tester l'utilisation des sources produites par DRAGON pour un calcul du flux neutronique. C'est l'occasion d'étudier l'impact des sources DRAGON sur un paramètre local.

Pour l'assemblage réduit, nous nous limitons à l'utilisation d'une distributions de sources multigroupe pour chaque région dans le cas de l'assemblage réduit. Nous incluons dans ces résultats l'utilisation d'une source du même type dont l'intensité a été produite à partir des résultats des calculs TRIPOLI. Les figures 4.12 et 4.13 donnent l'écart type et la différence d'écart type entre les simulations utilisant une source ponctuelle et celles utilisant une source distribuée, sur la cellule du centre et sur une cellule du coin (les flux sont condensés à deux groupes, dans les domaines rapide et thermique).

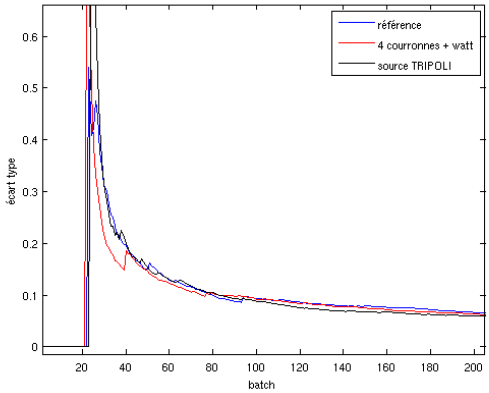
On observe un gain significatif de l'écart type sur les premiers batchs dans le domaine rapide du trou d'eau du centre de la géométrie. Une meilleure convergence du flux thermique de la cellule de combustible en coin de l'assemblage réduit est également obtenue. Le gain est beaucoup plus réduit dans le domaine thermique pour le flux dans le trou d'eau. Il est quasiment nul dans le domaine rapide dans la cellule située sur le coin. Il semble que notre méthode ait des performances diverses en fonction de la région ou du groupe énergétique auquel on s'intéresse. On note aussi que l'utilisation d'une source dont l'intensité est calculée



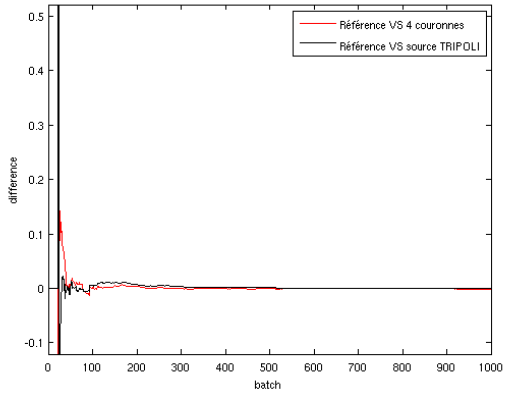
(a) Écarts type dans le domaine rapide



(b) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide



(c) Écarts type dans le domaine thermique

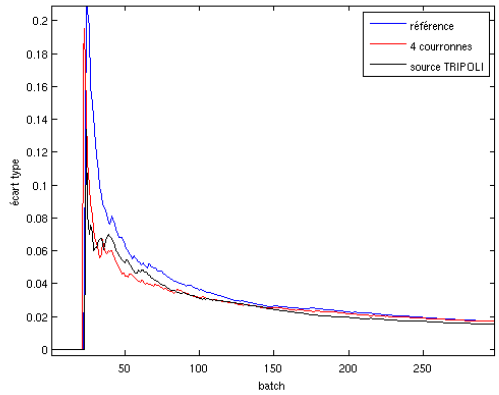


(d) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide

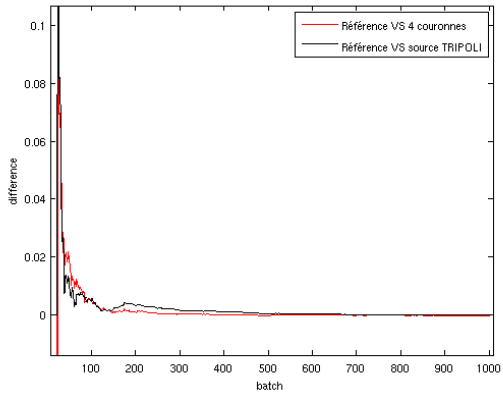
Figure 4.12 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au coin de la géométrie

par TRIPOLI donne de moins bons résultats sur les premiers batchs, mais converge un peu plus vite dans certains cas autour de 200 cycles. Ce constat est surprenant, on aurait pu penser intuitivement que l'intensité calculée à partir de ces données aurait des performances au moins aussi bonnes. L'étude de l'assemblage réduit semble mettre en lumière des comportements locaux différents à une initialisation du calcul TRIPOLI par une source DRAGON.

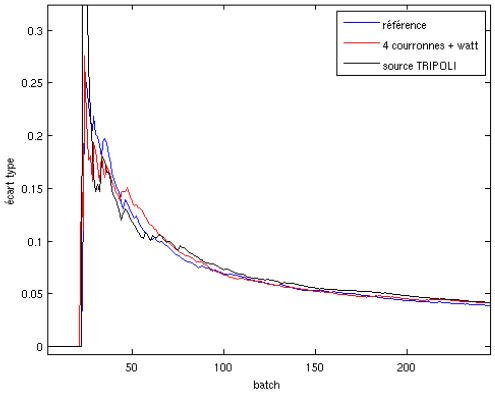
On s'intéresse maintenant à l'assemblage REP-UOX complet. Pour celui-ci, nous traçons l'évolution des écarts type pour une source unique par région distribuée selon un spectre de Watt. Nous étudions de nouveau deux cellules, l'une située en périphérie de l'assemblage, l'autre proche du centre (figures 4.14 et 4.15).



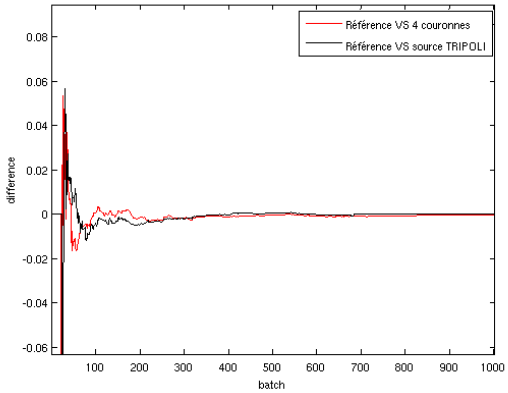
(a) Écarts type dans le domaine rapide



(b) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide



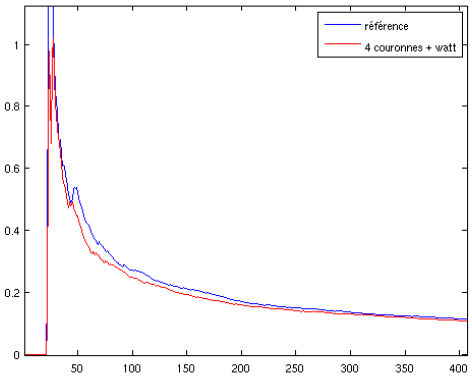
(c) Écarts type dans le domaine thermique



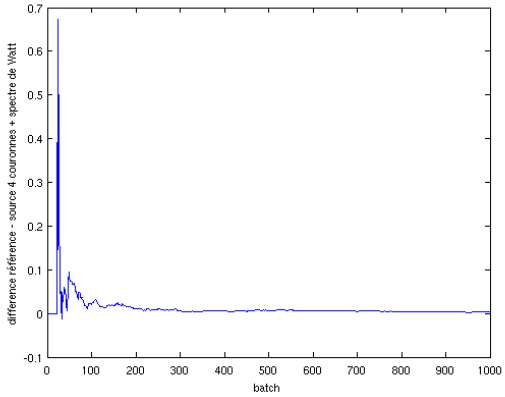
(d) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide

Figure 4.13 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au centre de la géométrie

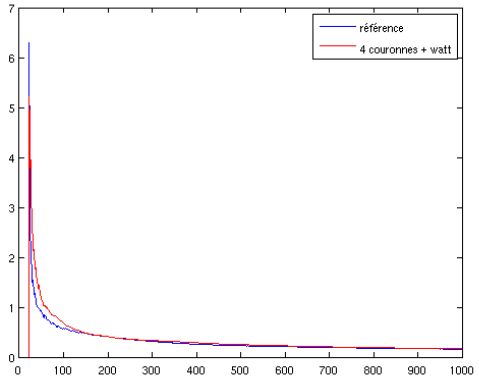
On observe un gain de convergence important dans le domaine rapide, plus particulièrement lorsque l'on est proche du centre. La présence des frontières semble atténuer la convergence (l'écart type final du flux est plus élevé dans ces zones qu'au centre de la géométrie) et l'effet de notre méthode. On observe en revanche une moins bonne efficacité d'une distribution de sources dans le domaine thermique. Il est logique d'avoir un flux rapide plus rapidement convergé étant donné que les neutrons sont mieux répartis à leur naissance, soit dans le domaine rapide. Cependant, cet effet devrait se retrouver dans le domaine thermique, ce qui n'est pas le cas. Nous rencontrons donc une incohérence dans les résultats obtenus. De plus, le code ne donne pas de valeur convergée lors des 15 premiers cycles. L'utilisation de la source DRAGON ne permet pas de réduire ce nombre de cycles. De plus, nous avons



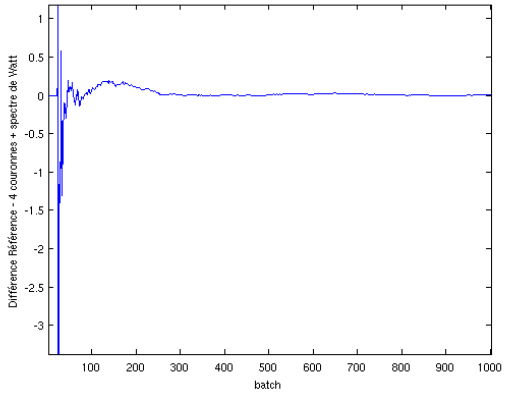
(a) Écarts type dans le domaine rapide



(b) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide



(c) Écarts type dans le domaine thermique

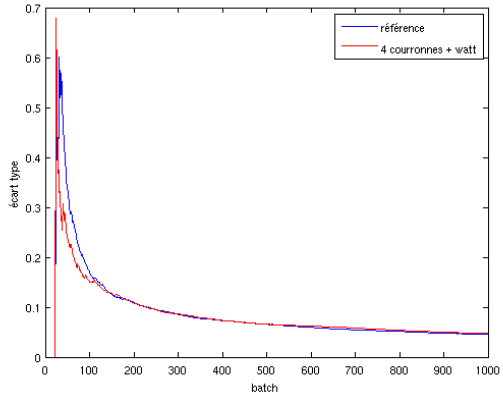


(d) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide

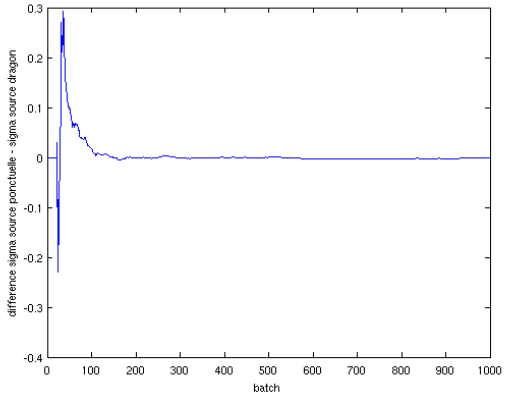
Figure 4.14 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au coin de la géométrie

vu qu'utiliser une source dont les intensités étaient calculées à l'aide de données TRIPOLI n'améliorait pas les choses.

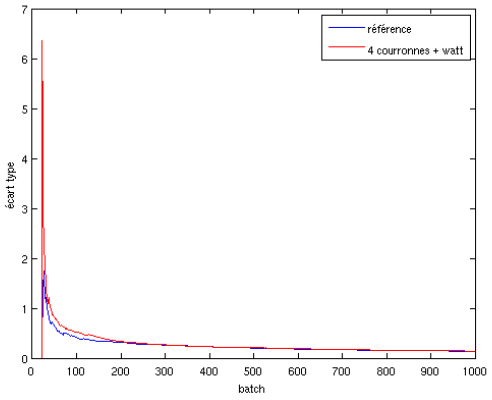
Pour étudier l'ampleur de ces incohérences observées, nous testons l'utilisation des sources DRAGON avec des batchs moins gros (10 000 neutrons au lieu de 100 000). Intuitivement on peut s'attendre à ce que la distribution précise donne de meilleurs résultats avec moins de neutrons simulés. En effet, une source ponctuelle au centre devrait avoir d'autant plus de mal à converger, notamment loin du centre, que le nombre de neutrons simulés par cycle est faible. Nous utilisons également, à titre de comparaison, la distribution de sources dont l'intensité est calculée à partir des résultats de la simulation TRIPOLI. La figure 4.16 illustre l'évolution des convergences des différents calculs.



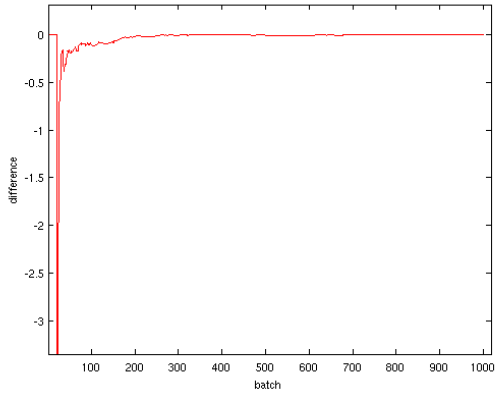
(a) Écarts type dans le domaine rapide



(b) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide



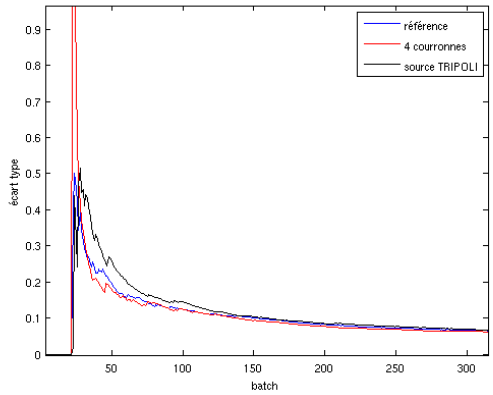
(c) Écarts type dans le domaine thermique



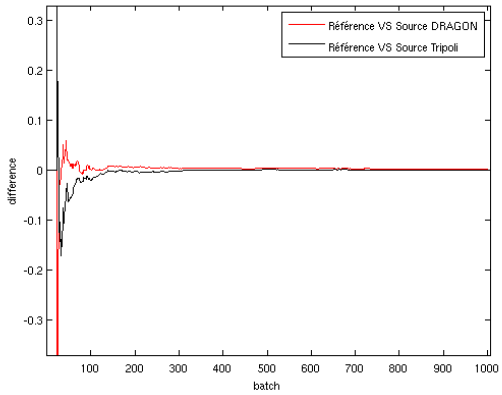
(d) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide

Figure 4.15 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule proche du centre de la géométrie

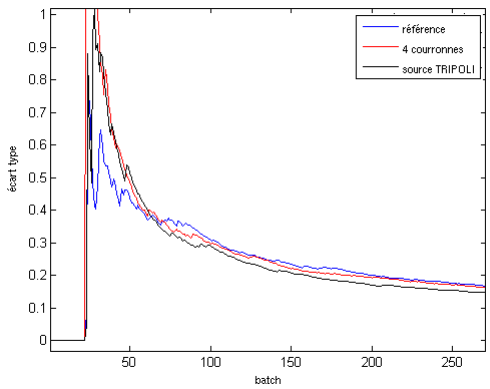
On observe l'inverse de l'effet escompté. La source ponctuelle converge plus rapidement que les sources distribuées. L'utilisation d'un nombre faible de neutrons peut éventuellement expliquer une convergence plus lente au centre, puisque la source ponctuelle produit beaucoup plus de neutrons dans cette zone au premier batch. En revanche, dans le cas présent, des neutrons sont introduits dans le coin dès le premier batch avec la source DRAGON. Elle devrait donc permettre une convergence plus rapide des sources dans ces régions, surtout lorsque les batchs sont plus faibles, et donc que moins de neutrons sont capables de se rendre en bords de géométrie. Nous soulevons un problème important d'incohérence des résultats. Le problème ne semble pas venir de la valeur de l'intensité calculée par DRAGON, puisqu'une intensité TRIPOLI donne les mêmes observations. L'intensité, donnée par la formule 4.4,



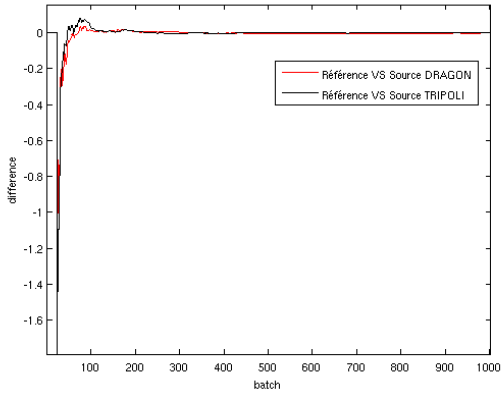
(a) Écarts type dans le domaine rapide



(b) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide



(c) Écarts type dans le domaine thermique



(d) Différence entre la référence et l'utilisation des sources distribuées dans le domaine rapide

Figure 4.16 Évolution batch par batch des écarts type et des différences entre les simulations initialisées par différentes sources de fission pour une cellule au coin de la géométrie

correspond pourtant à un taux de production de neutrons sur un volume donné. Les données énergétiques et spatiales sont cohérentes avec la position des crayons de combustible et le spectre d'émission des neutrons. Il semble donc que l'implémentation de notre méthode dans TRIPOLI ne soit pas la bonne. Il se peut que le code utilise mal ces sources déterministes, et que de ce fait une quantité d'information insuffisante soit transmise et permette aux sources de converger plus vite.

4.3.4 Bilan de l'étude

Dans cette section nous avons testé les performances de l'initialisation d'un calcul de criticité TRIPOLI par une distribution de sources produite par DRAGON. Nous avons observé la convergence d'un paramètre global, le k_{eff}, et d'un paramètre local, le flux. L'utilisation de notre méthode permet une légère amélioration de la convergence du k_{eff} sur les 100 premiers batchs du calcul. Elle permet une accélération significative de la convergence du flux dans certaines régions proches du centre de la géométrie, et a un effet beaucoup moins prononcé sur les régions situées proches des frontières. Ces observations sur le flux sont valables pour des batchs de grande taille. Pour un nombre de neutrons par cycle plus faible, des incohérences sont notables : le calcul avec source ponctuelle converge plus rapidement, sur les premiers batchs, que le calcul avec une source initiale précise. L'utilisation d'une distribution de source utilisant des intensités calculées à partir des résultats des simulations TRIPOLI a validé ces observations.

De plus, la mise en oeuvre de notre méthode est très lourde. L'utilisation d'une distribution multigroupe des sources devient irréalisable pour une géométrie trop grosse en raison d'un trop grand nombre de sources. Il semble donc y avoir un problème dans l'implémentation de notre méthode notamment au niveau de la discrétisation multigroupe des sources, et qui apporte un gain fortement limité et des comportements incohérents de convergence de certaines valeurs.

En conclusion, nous pouvons dire qu'il faut revoir l'implémentation dans TRIPOLI de la lecture des sources de neutrons issues de DRAGON et optimiser leur utilisation. Une autre façon de considérer une distribution énergétique multigroupe permettait de ne plus être limité dans le nombre de sources. L'étude de géométries plus complexes pour lesquelles les distributions de sources sont moins uniformes (combustible MOX ou irradié par exemple) pourrait rendre plus efficace l'utilisation de distributions initiales de sources issues de DRAGON.

CHAPITRE 5

BIAISAGE DES CALCULS MONTE CARLO PAR L'ADJOINT DÉTERMINISTE

Dans cette section nous décrivons dans un premier temps la mise en place du couplage entre DRAGON et TRIPOLI concernant l'utilisation de l'adjoint déterministe comme fonction d'importance pour le biaisage Monte Carlo. Nous présentons ensuite le problème source-détecteur utilisé pour tester cette méthode, en effectuant une étude comparative préliminaire des modélisations DRAGON et TRIPOLI. Enfin, après avoir présenté la mise en application de la méthode, nous analysons les résultats obtenus, que nous comparons avec ceux obtenus en utilisant la méthode INIPOND interne à TRIPOLI, et nous discutons de la validation et des performances de notre méthode.

5.1 Mise en œuvre de la méthode

Dans les chapitres 2 et 3 nous avons discuté du calcul dans DRAGON des flux adjoint et pseudo-adjoint. Nous avons également justifié l'utilisation du flux pseudo-adjoint comme fonction d'importance. Nous présentons ici la mise en oeuvre pratique du couplage entre DRAGON et TRIPOLI.

Nous avons au chapitre 3 présenté la fonction de biaisage INIPOND développée dans TRIPOLI. Cette fonction permet de générer des cartes d'importance selon un maillage spatial pour des plages d'énergies données. Il est possible d'enregistrer ces cartes d'importances dans un fichier et de les réutiliser dans un calcul ultérieur, à condition de ne changer ni la géométrie ni les compositions isotopiques du problème traité. Cette option permet de sauver l'étape d'initialisation de la pondération du calcul (dont le temps de calcul, de l'ordre de quelques secondes, est toutefois négligeable devant le temps total d'une simulation). Il est de ce fait possible de lire des cartes d'importances produites par d'autres codes. Notre méthode s'appuie donc sur cette fonctionnalité : un fichier d'importances produit par DRAGON sera directement lu par TRIPOLI. Ainsi, seul le code DRAGON sera modifié pour pouvoir produire ce type de cartes.

5.1.1 Structure du fichier d'importances

La version 4.8 de TRIPOLI permet de générer et de lire des fichiers d'importances au format ASCII. Les fichiers générés par DRAGON devront donc avoir la même structure pour pouvoir être utilisés sans problème dans TRIPOLI.

Les cartes d'importances sont divisées en 2 parties : un en-tête qui contient les informations sur les maillages spatial et énergétique de pondération défini dans TRIPOLI, et la liste des importances de chaque région pour les groupes d'énergie considérés.

L'en-tête reprend la syntaxe d'un jeu de données TRIPOLI. Il contient les informations que l'on fournit pour l'exécution d'INIPOND : le découpage énérgétique de pondération, le découpage spatial de la géométrie et les coordonnées du repère de pondération (qui peuvent être les mêmes que celles du repère de la géométrie). Ces données sont choisies par l'utilisateur, indépendamment de la carte d'importance qu'il souhaite utiliser (celle calculée par INIPOND ou celle calculée par DRAGON).

Le corps du fichier est divisé en plusieurs listes de valeurs d'importances. Il y a autant de listes que de groupes énergétiques de pondération, et autant d'éléments dans une liste que de régions de pondérations. Il ne s'agit pas en réalité des importances physiques calculées. En effet, dans certaines étapes de son processus de biaisage, TRIPOLI utilise des importances modifiées de la façon suivante :

$$\text{Importance}_{\text{modifiée}} = -\log(\text{Importance}_{\text{physique}}) \tag{5.1}$$

C'est sous cette forme qu'elles sont enregistrées dans le fichier d'importances généré par INIPOND, et éventuellement réutilisées par la suite. Il est donc indispensable de prendre cet élément en compte pour produire dans DRAGON des cartes d'importances ayant un format adapté

5.1.2 Le module ITR :

Pour pouvoir mettre en place notre méthode, il faut programmer dans DRAGON une nouvelle fonctionnalité spécialement dédiée à la production d'un fichier ASCII respectant le format que nous venons de décrire. Nous avons donc créé le module ITR : (pour Importance TRIPOLI). Ce module est composé de plusieurs options que nous allons développer. Certaines méthodes, comme l'homogénéisation et la condensation, sont déjà implantées dans le module EDI : et ont été reprises et adaptées pour nos besoins.

La première option est d'homogénéiser le flux pseudo-adjoint calculé dans DRAGON. Le

flux pseudo-adjoint est calculé dans DRAGON pour chaque région du découpage spatial. L'homogénéisation sert à réunir certaines régions et à calculer un flux pseudo-adjoint moyen sur les nouvelles régions considérées. Elle doit être réalisée en fonction du maillage spatial choisi pour la pondération dans TRIPOLI. L'utilisateur peut choisir d'homogénéiser par région, par cellule ou par mélange.

Le cas d'homogénéisation par mélange est peu pertinent à utiliser en général, sauf si l'association mélange/région permet d'obtenir une distribution compatible avec le maillage de pondération. Nous avons cependant choisi de conserver cette option déjà présente dans EDI :. L'homogénéisation par région est la plus logique à utiliser. L'utilisateur choisit les régions à assembler pour reconstituer le maillage spatial. L'homogénéisation par cellule est une option disponible uniquement pour un tracking effectué à l'aide du module NXT :. Il s'agit d'une homogénéisation par région particulière. En effet, le module NXT : prend en charge des géométries définies « par cellules ». Chaque type de cellule est défini séparément. Cette méthode est notamment très pratique pour décrire un assemblage de coeur de réacteur, mais peut aussi être utilisée pour d'autres cas de figure. L'homogénéisation par cellule permet d'alléger la syntaxe du jeu de données lorsqu'on veut réunir toutes les régions d'une même cellules ensemble.

La deuxième option du module est de condenser en énergie le flux pseudo-adjoint. Cette étape permet de calculer le flux pseudo-adjoint pour chaque groupe d'énergie correspondant à un groupe de pondération. L'utilisateur fournit les bornes énergétiques des groupes de condensation.

Homogénéiser et condenser une grandeur revient à les moyenner, à passer d'un espace à $N \times G$ dimensions (N régions et G groupes), sur un espace de $M \times K$ dimensions telles que :

- à chaque indice $m \in]1, M[$ correspond un ensemble d'indices $n \in]1, N[$: N_m
- à chaque indice $k \in]1, K[$ correspond un ensemble d'indices $g \in]1, G[$: G_k

Les grandeurs homogénéisées et condensées sont calculées de manière à conserver les taux de réactions. Cette conversation est importante puisque le taux de réaction est, contrairement au flux ou à une section efficace, une grandeur physique. Il est également nécessaire, dans le cas du flux adjoint, de conserver la relation $\langle \phi, \phi^+ \rangle = \langle \phi^+, \phi \rangle$. Les formules suivantes permettent d'homogénéiser les flux directs et pseudo-adjoint :

$$V_m = \sum_{i \in N_m} V_i \tag{5.2}$$

$$\phi_{m,k} = \frac{1}{V_m} \sum_{i \in N_m} \sum_{g \in G_k} V_i \phi_{i,g} \tag{5.3}$$

$$\phi^{+}_{m,k} = \frac{1}{\phi_{m,k} V_m} \sum_{i \in N_m} \sum_{g \in G_k} V_i \phi^{+}_{i,g} \phi_{i,g} \tag{5.4}$$

Une fois l'homogénéisation et la condensations effectuées, on dispose de la distribution de la fonction d'importance neutronique correspondant au maillage spatial et énergétique de pondération de TRIPOLI. Le code transforme ensuite cette fonction d'importance selon la formule 5.1 pour la rendre utilisable lors de sa lecture dans TRIPOLI.

La troisième option consiste à renseigner DRAGON des options de pondération, et notamment sur le maillage spatial (le découpage énergétique est déjà donné à DRAGON lors de l'étape de condensation).

Le module ITR : produit en fin d'exécution un fichier ASCII qui contient les cartes d'importances nécessaires.

5.2 Présentation du problème source-détecteur traité

Nous allons tester notre méthode de biaisage par l'adjoint déterministe sur un problème de protection. Il s'agit d'un problème en une dimension mettant en jeu une source fissile dont les neutrons produits traversent des couches successives de béton et d'acier avant d'atteindre de l'air. Ce problème est inspiré d'une étude menée dans un tout autre cadre par Tommy-Martin (2006).La figure 5.1 illustre le problème :

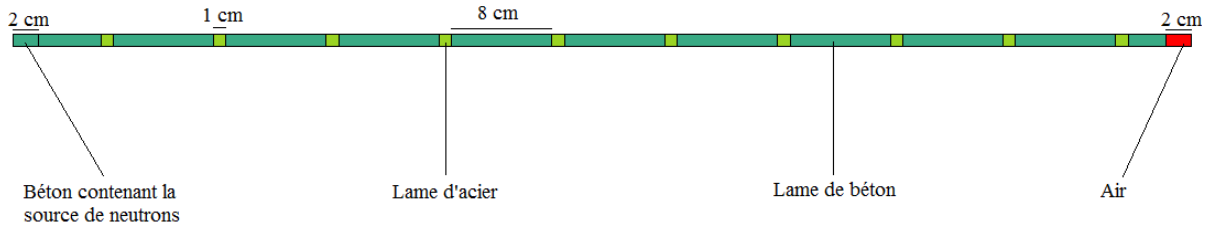


Figure 5.1 Géométrie du problème source-détecteur étudié

Il s'agit de détecter des neutrons dans l'air situé de l'autre coté de la paroi béton/acier et d'étudier leurs interactions avec ce milieu. Ce type de configuration est par exemple étudiée en radioprotection, afin de connaitre la dose reçue de l'autre côté de la paroi en béton.

Nous allons décrire dans cette partie les modélisations DRAGON et TRIPOLI de cette géométrie, en développant certaines spécificités propres à chacun des codes. Nous allons ensuite vérifier la cohérence des deux modèles en vue d'un test de notre méthode.

5.2.1 Discussion autour des choix de modélisation

La géométrie étudiée peut se simplifier en un problème en une dimension. Nous la définissons comme telle dans DRAGON. Cette simplification n'est en revanche pas réalisable dans TRIPOLI. Nous choisissons donc de la modéliser comme un parallélépipède rectangle de 94 cm de longueur, et de section de $1cm \times 1cm$. Ainsi, longueur et volume ont la même valeur. Les flux et taux de réactions ne sont pas homogènes en fonction de s'ils sont volumiques ou linéiques. Le choix d'une section de 1 cm2 pour la géométrie TRIPOLI permet de contourner ce problème et de pouvoir comparer directement les grandeurs calculées par les deux codes.

Nous découpons tous les centimètres la géométrie afin de calculer le flux dans des régions plus petites et ainsi tracer des évolutions plus précises de celui-ci.

Le tracking dans DRAGON est réalisé à l'aide du module SYBILT :. Ce choix correspond à des conditions de réflexion spéculaire sur toutes les frontières de la géométries, que l'on applique également dans TRIPOLI. Il est également important de noter que le calcul des matrices de probabilités de collision dans le cas 1D est exact, ce qui est un point positif quant à la précision de la simulation. Un découpage fin de la géométrie est réalisé afin d'obtenir les résultats les plus précis possibles.

Pour effectuer un calcul à source externe, il faut spécifier à DRAGON une distribution de la source multigroupe ainsi que le mélange dans lequel on souhaite l'introduire. Cette opération s'effectue dans le module MAC :. Une source de neutrons est définie à partir de son spectre d'émission de neutrons. Nous utilisons ici le spectre de Watt (4.1).

Nous avons fait le choix d'utiliser ce spectre dans DRAGON et TRIPOLI, au lieu d'un spectre tiré d'une bibliothèques de sections efficaces. Nous sommes de ce fait indépendants de l'évaluation de données nucléaires utilisée, l'option de définir un spectre de Watt est directement implantée dans TRIPOLI, et il est relativement simple de discrétiser ce spectre pour en obtenir une distribution multigroupe pour DRAGON.

Nous avons détaillé au chapitre précédent la définition d'une source, et les distributions spatiale, angulaire, énergétique et temporelle mises en jeu. Dans notre cas, la source est uniforme sur l'espace, isotrope, et distribuée selon le spectre de Watt. De plus nous travaillons en régime stationnaire, la variable temporelle n'est donc pas pris en compte. TRIPOLI calcule l'intensité (exprimée en nombre de neutrons) de sa source de la façon suivante :

$$I(\text{source}) = I(\text{géométrique}) \times I(\text{angulaire}) \times I(\text{énergétique}) \tag{5.5}$$

Avec :

$$I(\text{géométrique}) = \int_V S(V)dV \tag{5.6}$$

$$I(\text{angulaire}) = \int_{4\pi} S(\vec{\Omega})d\vec{\Omega} \tag{5.7}$$

$$I(\text{énergétique}) = \int_E S(E)dE \tag{5.8}$$

Dans notre cas, les distributions spatiales et angulaires sont uniformes telles que : $S(V) = S(\vec{\Omega}) = 1$. La source occupe un volume de $2cm^3$. L'expression de $S(E)$ correspond à un spectre de Watt donné par l'équation (4.1). On a donc :

$$I(\text{geometrique}) = \int_V 1dV = 2 \tag{5.9}$$

$$I(\text{angulaire}) = \int_{4\pi} 1d\vec{\Omega} = 4\pi \tag{5.10}$$

$$I(\text{energetique}) = \int_E S(E)dE = 1 \tag{5.11}$$

$$I(\text{source}) = 8\pi \tag{5.12}$$

L'intensité de la source telle que définie dans TRIPOLI vaut donc 8π. Cette valeur est vérifiée lors de la simulation de ce problème, le code retournant dans le fichier de sortie l'intensité calculée de la source. Il faut donc implémenter une source équivalente dans DRAGON. La source multigroupe à entrer dans le module MAC : est exprimée en $neutrons.cm^{-3}$. Travaillant en une dimension, cette source est en réalité exprimée en $neutrons.cm^{-1}$, et nous avons mentionné que les choix de modélisation de la géométrie permettaient l'égalité entre un volume et la longueur 1-D correspondante. Ainsi, la source a une longueur de 2 cm dans DRAGON. La partie angulaire de la source est intégrée à 1 dans DRAGON. Il faut donc prendre en compte le facteur de 4π présent dans le calcul de la source angulaire dans TRIPOLI. Enfin, comme nous l'avons mentionné, la distribution énergétique est un spectre de Watt multigroupe dont les composantes sont notées $S^g(E)$. Ainsi on peut définir de la manière suivante l'intensité de la source S^g pour un groupe g donné dans DRAGON :

$$S^g = S^g(E) \times \frac{4\pi}{2} \tag{5.13}$$

L'intensité totale est de ce fait donnée par :

$$S = \sum_{g=1}^{N_g} S^g(E) \times \frac{4\pi}{2} = \frac{I(\text{source TRIPOLI})}{V} \tag{5.14}$$

avec N_g le nombre de groupes. On retrouve donc l'équivalence entre l'intensité calculée par TRIPOLI et celle implémentée dans DRAGON.

Enfin, on choisit dans TRIPOLI de simuler 10 000 cycles de 10 000 neutrons chacun.

5.2.2 Étude comparative des modèles DRAGON et TRIPOLI

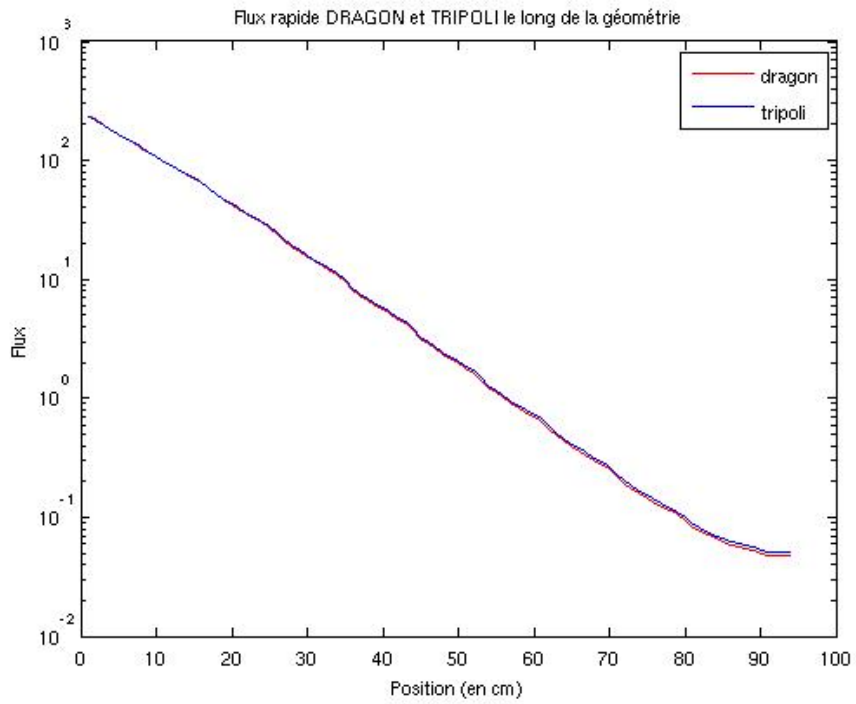
Nous venons de définir des méthodes de modélisation dont l'objectif est de rendre cohérents les modèles DRAGON et TRIPOLI de notre problème source-détecteur. Nous nous intéressons plus particulièrement au flux de neutrons parcourant la géométrie, de la source jusque l'air. Nous traçons la distribution des flux rapides et thermiques le long de la géométrie (figure 5.2)

Nous pouvons observer que l'allure des flux calculés par les deux codes est la même. Les courbes sont quasiment confondues. Dans les deux cas, on observe une décroissance relativement régulière du flux rapide, et une atténuation du flux thermique marquée par des successions de creux et de bosses. Cette évolution du flux thermique s'explique par la traversée alternée du béton, qui possède de bonnes capacités de thermalisation des neutrons, et d'acier qui est essentiellement absorbant.

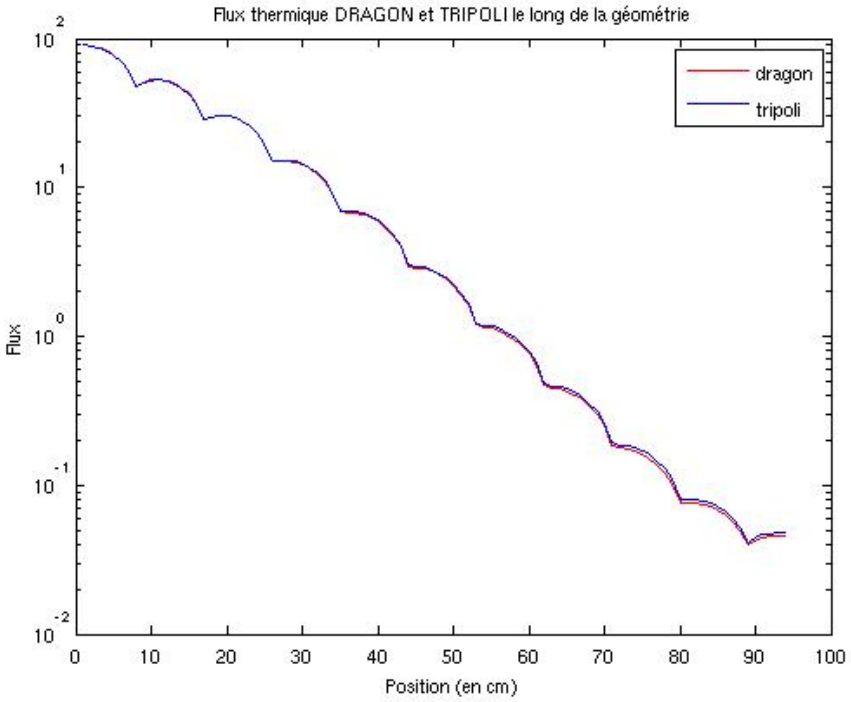
Pour une comparaison plus précise des deux codes, on calcule l'écart relatif entre les flux calculés par les deux codes. On trace la figure 5.3 représentant cet écart pour les flux rapide et thermique.

Dans la zone située à l'intérieur ou proche de la source neutronique, on observe un écart de l'ordre de 1% entre les flux DRAGON et TRIPOLI. Ce faible écart indique que les distributions et les intensités des sources ont été correctement définies dans les deux codes.

On peut cependant observer une diminution de l'écart au profit du flux de TRIPOLI : il apparaît que le flux de DRAGON est un peu plus atténué que celui de TRIPOLI. Pour un flux de DRAGON d'1% supérieur à celui de TRIPOLI au niveau de la source, on observe un flux déterministe 6% inférieur à l'autre extrémité de la géométrie. On peut noter des petits sauts de l'écart au niveau des lames d'acier, alors que le flux de DRAGON diminue plus vite dans le béton. Les données nucléaires utilisées semblent donc jouer un rôle sur cet écart. DRAGON utilise des sections efficaces multigroupe et les mélanges sont définis grâce aux

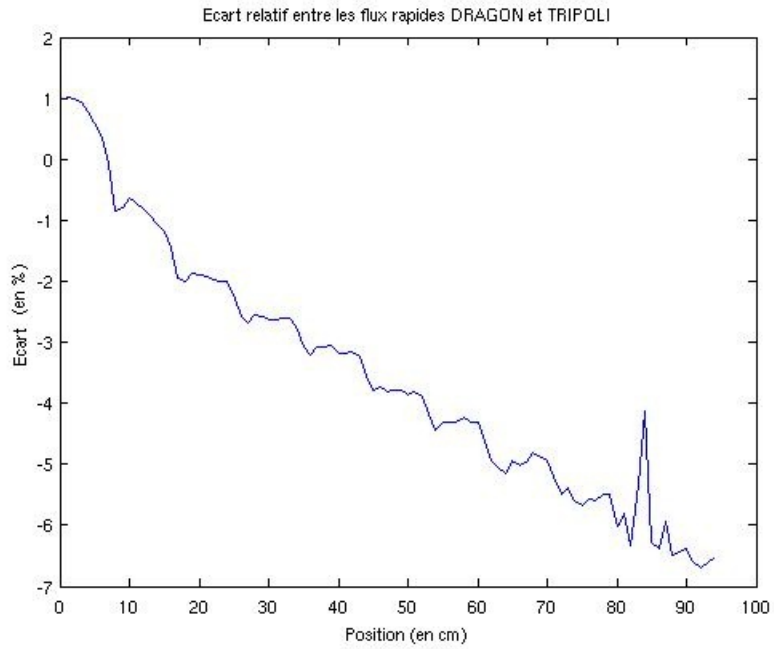


(a) Flux rapides

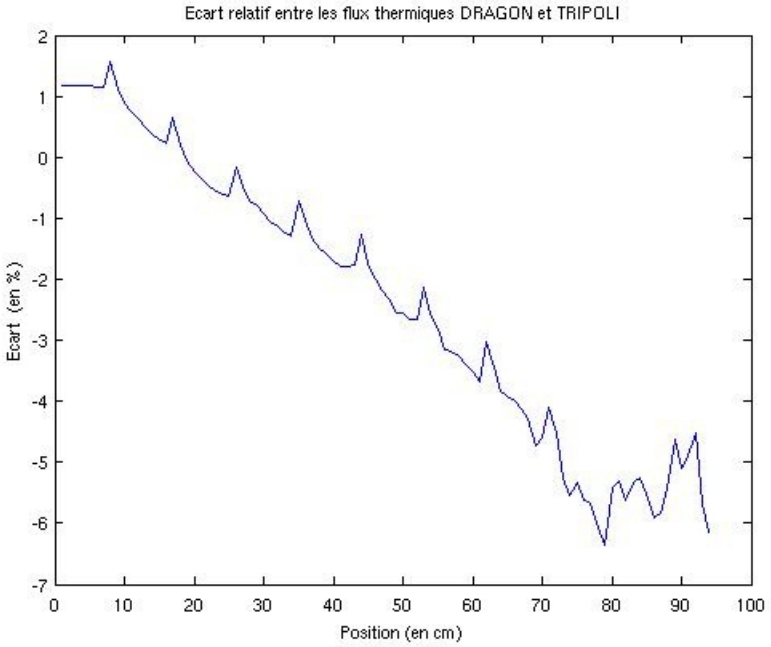


(b) Flux thermiques

Figure 5.2 Flux DRAGON et TRIPOLI



(a) Écart sur flux rapide



(b) Écart sur flux thermique

Figure 5.3 Écarts relatifs entre les flux rapide et thermique DRAGON et TRIPOLI

éléments naturels, alors que TRIPOLI utilise des sections efficaces continues en énergie et les éléments sont définis par isotope.

De plus, le béton est composé en grande partie d'eau. L'hydrogène possède une section efficace de diffusion importante. De ce fait, il est probable que l'utilisation de la méthode des probabilités de collision, qui ne prend pas en compte l'anisotropie de la diffusion, soit également en partie responsable de cette évolution des écarts.

La figure 5.4 représente l'évolution de l'erreur statistique relative des flux de TRIPOLI.

On remarque que la précision des valeurs calculées se dégrade fortement au fur et à mesure qu'on s'éloigne de la source. Les flux de TRIPOLI sont donc moins fiables en fin de géométrie, et les écarts plus importants peuvent être en partie expliqués par une mauvaise détermination du flux dans cette zone.

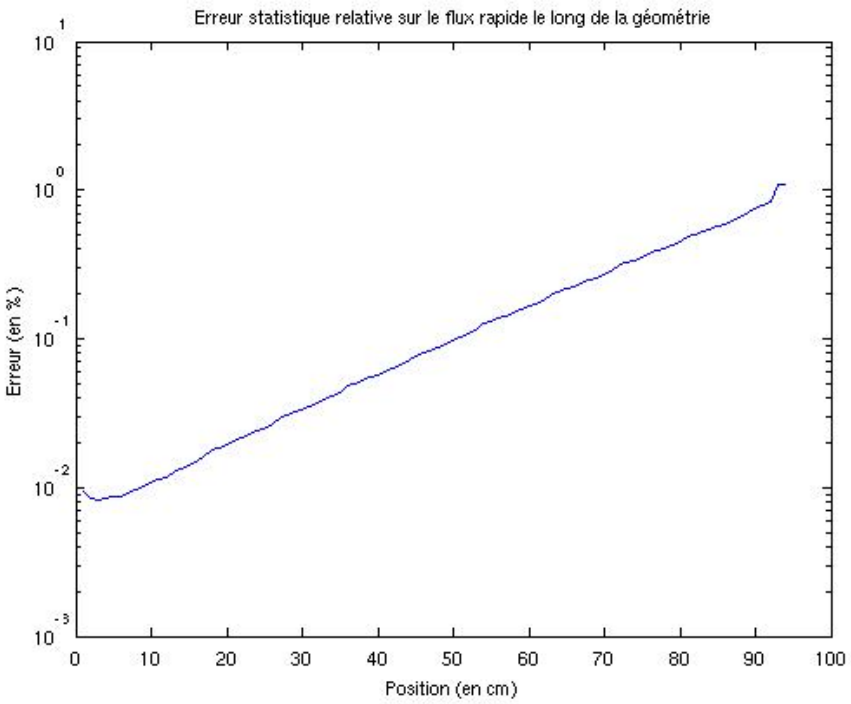
Pour finir, les zones où l'écart entre les flux DRAGON et TRIPOLI est le plus élevé présentent les valeurs de flux les plus faibles.

Nous avons été en mesure d'identifier les raisons des écarts entre les flux calculés par DRAGON et TRIPOLI. Ces écarts restent faibles, y compris au niveau de l'air, et sont acceptables. Ils permettent de conclure que nos modèles DRAGON et TRIPOLI du problème source-détecteur considéré sont cohérents. Ainsi, notre méthode va pouvoir être testée dans de bonnes conditions et le flux pseudo-adjoint calculé par DRAGON reflétera au mieux l'état du problème simulé par TRIPOLI.

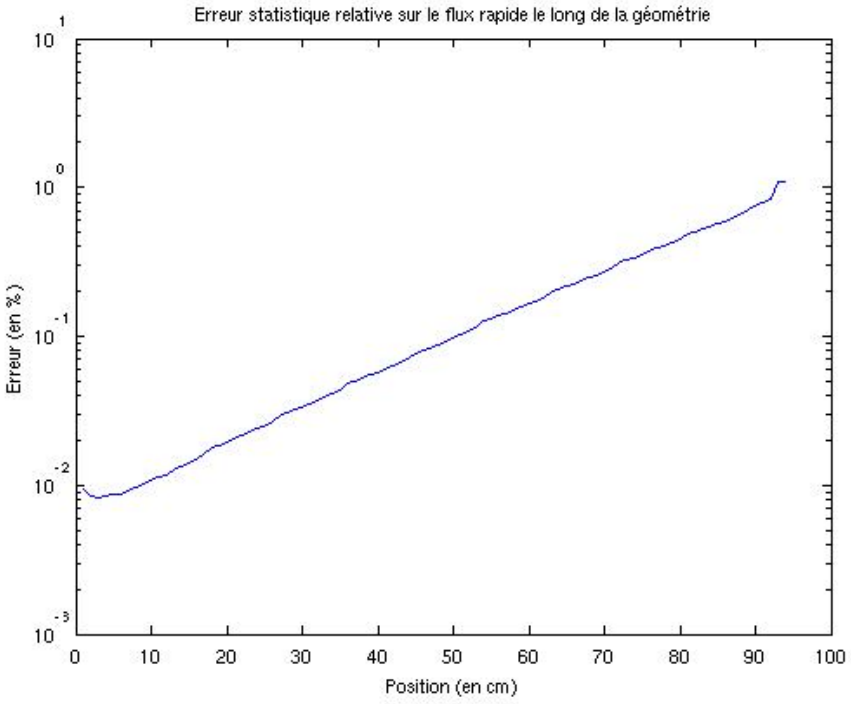
5.2.3 Justification du recours au biaisage

Dans la section précédente nous avons tracé l'évolution du flux de TRIPOLI et son erreur statistique relative correspondante (figures 5.2 et 5.4). On observe une forte atténuation du flux entre la source de neutrons et l'air, de l'ordre de 4 décades. Ceci indique que peu de neutrons sont capables de traverser toute la géométrie et se rendre à l'air. L'écart-type connait l'évolution inverse : il augmente au fur et à mesure qu'on s'éloigne de la source. En effet, lorsqu'on est éloigné de la source, peu de neutrons contribuent à la réponse du détecteur. De ce fait, pour un temps de calcul donné, moins de scores ont été enregistrés par ce détecteur comparativement à un détecteur proche de la source. De ce fait, l'écart-type associé à la réponse du détecteur éloigné de la source reste plus élevé. On atteint dans notre cas des écarts types de l'ordre de 1% sur la valeur de flux dans l'air, contre 0.01% proche de la source. Le calcul du taux de collision dans l'air confirme les observations effectuées sur le flux : l'écart type est du même ordre de grandeur.

Une incertitude de l'ordre de 1% n'est pas acceptable car trop élevée. Pour avoir une précision suffisante des résultats loin de la source, il faudrait considérablement augmenter le nombre de neutrons simulés n, l'écart-type diminue en $\sqrt{n}$. Ainsi, pour le faire chuter d'un



(a) Erreur relative sur flux rapide



(b) Erreur relative sur flux thermique

Figure 5.4 Erreurs statistiques relatives sur les flux rapide et thermique de TRIPOLI

facteur 100, il faudrait multiplier par 10 000 le nombre de neutrons simulés. Le temps de calcul ne serait plus acceptable dans ce cas. Le recours à des techniques de réduction de variance est dans ce cas nécessaire et justifié pour obtenir des résultats fiables pour des flux ou des taux de réactions calculés loin de la source de neutrons.

5.3 Test et validation de la méthode

Nous présentons ici les résultats de l'utilisation des cartes d'importances produites par le module ITR : sur le problème source-détecteur considéré, et nous comparons les performances de notre méthodes avec la fonction INIPOND de TRIPOLI.

Nous testons plusieurs découpages énergétiques pour pour créer nos cartes d'importances. Dans un premier temps nous utilisons un découpage à 5 groupes d'énergies qui est classiquement conseillé aux utilisateurs de TRIPOLI. Nous nous intéressons ensuite à un autre découpage plus précis à 9 groupes d'énergies. Nous allons ainsi analyser l'impact du découpage énergétique sur la qualité du biaisage. Nous découpons notre géométrie sur la longueur tous les centimètres afin d'avoir un maillage spatial fin. Nous évaluerons l'effet de la discrétisation spatiale en travaillant avec un maillage plus grossier (une maille par mélange).

Le calcul du flux pseudo-adjoint dans DRAGON nécessite la définition d'une source adjointe. Celle-ci correspond à la réponse du détecteur considéré. On prend typiquement une section efficace pour source adjointe. Comme nous cherchons à améliorer la précision de la simulation des événements présents dans l'air, nous plaçons notre détecteur dans cette région de la géométrie. Nous choisissons la section efficace totale de l'azote N^{14} qui est le principal isotope qui compose l'air. La grandeur d'intérêt principale sera donc le taux de collision entre les neutrons et la matière. Le biaisage ayant pour principe "d'attirer" les neutrons vers la zone d'intérêt, nous allons aussi observer l'impact de notre méthode sur le flux et sur le taux d'absorption de l'air. Dans tous les cas, nous considérons la grandeur calculée dans les domaines rapide et thermique (comme dans le chapitre précédent la frontière entre les deux domaines est fixée à $0.625eV$). L'air étant divisé en deux régions d'1 cm^3 de volume, nous calculons pour chacune des deux régions les flux et taux de réactions.

Nous donnons pour chaque grandeur l'estimation de l'erreur statistique relative donnée par le calcul de référence (sans biaisage) et par les simulations non analogues utilisant des importances calculées par DRAGON d'une part, et par INIPOND d'autre part. Nous en déduisons le facteur de qualité de chaque simulation à l'aide du temps de calcul, et la simulation analogue sert de référence pour le calcul des facteurs de qualité relatifs. Dans chaque cas, le nombre de cycles de simulation et le nombre de neutrons par cycle est le même, afin

d'être cohérents dans les analyses de ces facteurs de qualité. Nous allons donc pouvoir être en mesure de quantifier l'apport de chaque méthode vis-à-vis d'un calcul non biaisé, et nous allons pouvoir comparer leurs performances et leurs atouts respectifs.

5.3.1 Étude de l'impact de la discrétisation énergétique de l'importance

Nous présentons tout d'abord la discrétisation de référence de nos cartes d'importances : un découpage tous les cm sur la longueur et le domaine énergétique $[20MeV; 10^{-11}MeV]$ divisé en 5 groupes dont les bornes sont : $(3, 1, 10^{-3}, 10^{-7})$MeV, tel que le présente la figure 5.5.

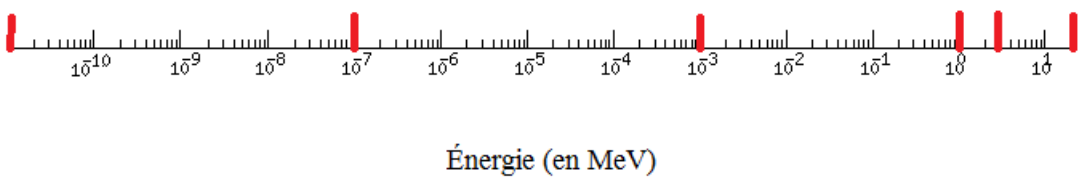


Figure 5.5 Découpage énergétique à 5 groupes

Nous nous intéressons dans un premier temps au taux de collision dans l'air. Le tableau 5.1 donne les valeurs des taux de collision et leur erreur statistique relative associée pour les deux régions composées d'air et pour les groupes rapide et thermique calculés lors de la simulation de référence, dans le cadre d'un biaisage par l'adjoint DRAGON et à partir d'un biaisage par INIPOND.

Tableau 5.1 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	τ_t Référence	$\sigma_\%$ Référence	τ_t ITR :	$\sigma_\%$ ITR :	τ_t INIPOND	$\sigma_\%$ INIPOND
Taux collision rapide région 1	1,68E-05	1,27	1,71E-05	1,68E-01	1,71E-05	7,49E-02
Taux collision thermique région 1	2,58E-05	1,27	2,56E-05	9,71E-02	2,56E-05	8,09E-02
Taux collision rapide région 2	1,68E-05	1,45	1,71E-05	1,58E-01	1,71E-05	7,55E-02
Taux collision thermique région 2	2,58E-05	1,26	2,56E-05	9,64E-02	2,56E-05	8,13E-02

On remarque un gain important de précision du taux de collision lorsque le calcul est

biaisé. L'erreur statistique relative est de l'ordre de 0.1%, contre plus de 1% pour le calcul de référence. Le biaisage par INIPOND semble être un peu plus précis que l'utilisation de l'importance déterministe. Un élément surprenant est aussi à noter : alors qu'INIPOND est plus précis dans le domaine rapide, mieux discrétisé au niveau de la carte d'importances, notre méthode offre une meilleure précision dans le domaine thermique. Pour expliquer ce phénomène, on peut supposer que le découpage énergétique plus fin dans le domaine rapide permet au flux pseudo-adjoint de favoriser la diffusion des neutrons dans le béton, et ainsi augmenter plus fortement le nombre de neutrons thermiques arrivant dans l'air que ne peut le faire INIPOND. De ce fait les estimations du taux de collision et de son erreur statistique se font sur plus d'histoires, et sont donc plus précises.

On indique dans le tableau 5.2 les temps de calcul des trois simulations considérées :

Tableau 5.2 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin

Simulation	Référence	Importance DRAGON	Importance INIPOND
Temps CPU (en h)	33.1	39.5	45.9

Le biaisage entraine une augmentation du temps de calcul de l'ordre de 6 heures en utilisant une importance déterministe et d'environ 14 heures avec une initialisation de l'importance par INIPOND. C'est l'utilisation de l'importance déterministe qui, sur ce critère, est plus efficace que le module INIPOND. En associant les observations faites sur les erreurs statistiques, et en se basant sur les propriétés du Splitting et de la Roulette Russe que nous avons détaillés au chapitre 2, on peut dire que les cartes d'importances produites par INIPOND semblent favoriser d'avantage le Splitting que celles produites par le module ITR : de DRAGON. On peut également penser que la Roulette Russe est mieux utilisée lorsque le poids de référence est produit par INIPOND.

Pour quantifier les performances globales de ces trois simulations, intéressons-nous au facteur de qualité. Le tableau 5.3 donne les facteurs de qualité absolus puis relatifs au calcul de référence. Les facteurs de qualité relatifs sont les plus instructifs à étudier. Ils confirment tout d'abord que les cartes d'importances produites par DRAGON et par INIPOND sont toutes deux efficaces, puisque le facteur de qualité est augmenté par rapport au cas de référence. Cette grandeur permet d'illustrer de nouveau les capacités équivalentes d'INIPOND dans les domaines rapide et thermique, et la meilleure qualité des calculs dans le domaine thermique par rapport au domaine rapide lors de l'utilisation du module ITR : de DRAGON.

L'analyse des facteurs de qualité confirme une bien meilleure efficacité d'INIPOND dans le domaine rapide, et une efficacité quasi-équivalente (facteurs de qualité du même ordre de

Tableau 5.3 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin (taux de collision)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux collision rapide région 1	0,052	2,49	10,55	47,78	202,10
Taux collision thermique région 1	0,052	7,47	9,05	143,42	173,94
Taux collision rapide région 2	0,040	2,80	10,40	69,85	259,20
Taux collision thermique région 2	0,053	7,56	8,97	142,52	169,08

grandeur) des deux méthodes dans le domaine thermique, même si l'initialisation par le flux pseudo-adjoint reste moins bonne.

Nous nous intéressons maintenant au taux d'absorption de l'air. Nous produisons des tableaux équivalents aux précédents, qui fournissent les erreurs statistiques relatives et les facteurs de qualité relatifs et absolus des taux d'absorption calculés dans les domaines rapide et thermique.

Tableau 5.4 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	τ_{abs} Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	τ_{abs} ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	τ_{abs} INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Taux absorption rapide région 1	1,49E-07	1,34	1,56E-07	7,03E-01	1,55E-07	7,70E-02
Taux absorption thermique région 1	2,97E-06	1,37	2,93E-06	9,93E-02	2,94E-06	8,29E-02
Taux absorption rapide région 2	1,48E-07	1,34	1,55E-07	1,45E-01	1,55E-07	7,85E-02
Taux absorption thermique région 2	2,97E-06	1,37	2,93E-06	9,89E-02	2,94E-06	8,33E-02

Tableau 5.5 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin (taux d'absorption)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux absorption rapide région 1	0,047	0,14	10,00	3,05	214,52
Taux absorption thermique région 1	0,045	7,13	8,61	159,25	192,44
Taux absorption rapide région 2	0,046	3,35	9,61	72,10	207,00
Taux absorption thermique région 2	0,045	7,19	8,53	161,39	191,52

L'étude du calcul du taux d'absorption confirme les tendances observées sur le taux de collision. Le biaisage par INIPOND fournit des résultats plus précis que le biaisage par l'adjoint déterministe. Pour une région de l'espace et un groupe d'énergie donné, on remarque

que l'erreur statistique, et donc le facteur de qualité, ne varie pas beaucoup entre les deux taux de réaction calculés. Seul le taux d'absorption rapide calculé avec un biaisage par DRAGON semble être significativement moins précis que le taux de collision associé.

Comme pour le taux de collision, les deux cartes d'importances apportent un gain important de qualité et de précision du calcul. L'importance calculée par ITR : rivalise avec celle calculée par INIPOND dans le domaine thermique, mais présente toujours un déficit important dans le domaine rapide.

Afin d'être le plus complet possible sur les capacités des biaisages étudiés, nous étudions leurs apports sur le calcul du flux dans l'air. On reproduit les mêmes tableaux que précédemment :

Tableau 5.6 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	ϕ Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	ϕ ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	ϕ INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	4,95E-02	1,12	5,07E-02	1,92E-01	5,05E-02	7,51E-02
Flux neutronique thermique région 1	4,84E-02	1,27	4,79E-02	9,71E-02	4,79E-02	8,07E-02
Flux neutronique rapide région 2	4,96E-02	1,24	5,06E-02	1,37E-01	5,05E-02	7,59E-02
Flux neutronique thermique région 2	4,84E-02	1,25	4,79E-02	9,65E-02	4,79E-02	8,10E-02

Tableau 5.7 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial fin (flux neutronique)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	0,067	1,91	10,51	28,62	157,12
Flux neutronique thermique région 1	0,052	7,45	9,11	142,64	174,29
Flux neutronique rapide région 2	0,055	3,77	10,27	68,76	187,35
Flux neutronique thermique région 2	0,054	7,55	9,02	140,99	168,43

L'étude du flux neutronique confirme elle-aussi les analyses des taux de réaction. Pour une pondération à 5 groupes d'énergie, les cartes d'importances produites par DRAGON offrent dans le domaine thermique une précision équivalente à celle entrainée par l'utilisation du module INIPOND de TRIPOLI. En revanche, le biaisage par INIPOND permet d'obtenir des résultats de bien meilleure qualité dans le domaine rapide, même si DRAGON offre un gain important par rapport à une simulation analogue.

L'analyse des résultats produits pour une pondération à 5 groupes d'énergie montre qu'il est nécessaire d'optimiser la qualité des calculs par utilisation d'une carte d'importance DRAGON dans le domaine rapide. Nous choisissons de discrétiser d'avantage le domaine énergétique pour le biaisage. Nous optons pour un découpage à 9 groupes dont les frontières sont : $(5, 3, 1, 0.05, 10^{-3}, 10^{-5}, 5.10^{-7}, 10^{-7})$, présentées sur la figure 5.6, les bornes ajoutées étant notées en vert. Le domaine rapide est d'avantage discrétisé, et le domaine thermique l'est un peu plus que pour la première étude.

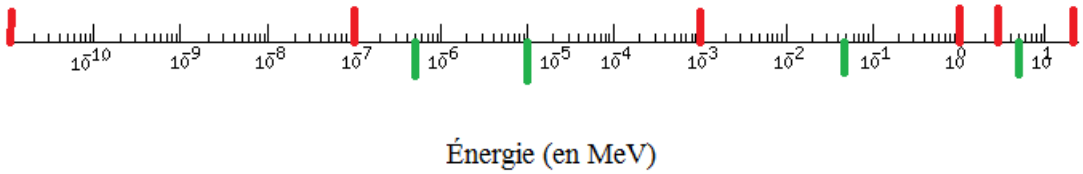


Figure 5.6 Découpage énergétique à 9 groupes (premier découpage)

Nous avons également observé un comportement similaire des trois grandeurs étudiées. À partir de maintenant, nous n'analysons en détail que les résultats observés sur le flux. Les résultats concernant les taux de collision et d'absorption sont présentés à l'annexe A.

Les résultats des tests sont présentés de la même façon qu'avec 5 groupes de pondération. On donne les erreurs statistiques relatives des grandeurs étudiées, les temps de calculs et les facteurs de qualité absolus et relatifs à la simulation analogue. On obtient les tableaux 5.8, 5.9 et 5.10 pour les calculs des flux :

Tableau 5.8 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	ϕ Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	ϕ ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	ϕ INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	4,95E-02	1,12	5,05E-02	1,00E-01	5,05E-02	7,85E-02
Flux neutronique thermique région 1	4,84E-02	1,27	4,80E-02	2,41E-01	4,83E-02	5,86E-01
Flux neutronique rapide région 2	4,96E-02	1,24	5,05E-02	1,03E-01	5,05E-02	7,79E-02
Flux neutronique thermique région 2	4,84E-02	1,25	4,79E-02	9,72E-02	4,83E-02	5,86E-01

On observe certains résultats assez surprenants. La discrétisation du maillage de pondération considérée semble avoir fortement diminué la précision des calculs dans le domaine

Tableau 5.9 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin

Simulation	Référence	Importance DRAGON	Importance INIPOND
Temps CPU (en h)	33.1	49.3	48.1

Tableau 5.10 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin (flux neutronique)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	0,067	5,58	9,37	83,50	140,16
Flux neutronique thermique région 1	0,052	0,97	0,17	18,57	3,22
Flux neutronique rapide région 2	0,055	5,31	9,51	96,84	173,46
Flux neutronique thermique région 2	0,054	5,95	0,17	111,12	3,14

thermique, surtout en utilisant l'importance produite par INIPOND. Les calculs réalisés dans ce domaine énergétique avec un biaisage par le flux pseudo-adjoint de DRAGON sont moins détériorés, et deviennent de ce fait les plus précis. Le domaine thermique est pourtant un peu mieux discrétisé qu'avec le découpage à 5 groupes utilisé précédemment. Il est possible que la trop forte discrétisation de l'importance rapide par rapport à l'importance thermique ait déséquilibré la distribution de la population de neutrons sur ce domaine énergétique au détriment du domaine thermique.

L'observation du domaine rapide donne des résultats plus logique. Une importance DRAGON plus discrétisée a permis de gagner significativement en précision. La précision des calculs réalisés à l'aide d'INIPOND dans le domaine rapide peut être considérée comme constante, malgré les légères baisses des facteurs de qualité. De ce fait, les cartes d'importances produites par DRAGON ont gagné en performance et se sont rapprochées de celles produites par INIPOND, ce qui était le but recherché par l'utilisation de ce découpage de pondération.

Dans tous les cas, les calculs biaisés restent plus précis que les simulations analogues.

Nous avons donc montré qu'une meilleure discrétisation énergétique de l'importance neutronique ne garantissait pas nécessairement des meilleurs résultats. La qualité du biaisage est donc sensible au découpage énergétique de pondération. Nous allons tester une autre discrétisation à 9 groupes des cartes d'importances. Les bornes des groupes qui la composent sont : $(3, 1, 10^{-3}, 10^{-5}, 5.10^{-7}, 10^{-7}, 10^{-8}, 10^{-9})$, comme l'illustre la figure 5.7. Celle-ci est moins fournie dans le domaine rapide, et plus dans le thermique pour palier aux dégradations constatées dans le domaine thermique.

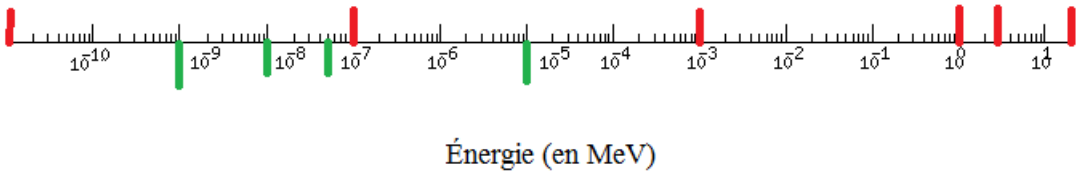


Figure 5.7 Découpage énergétique à 9 groupes (deuxième découpage)

Encore une fois, nous répertorions dans les tableaux 5.11, 5.12 et 5.13 les erreurs statistiques relatives et les facteurs de qualité pour les calculs de flux.

Tableau 5.11 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	ϕ Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	ϕ ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	ϕ INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	4,95E-02	1,12	5,07E-02	2,51E-01	5,05E-02	7,28E-02
Flux neutronique thermique région 1	4,84E-02	1,27	4,80E-02	1,09E-01	4,77E-02	1,74E-01
Flux neutronique rapide région 2	4,96E-02	1,24	5,07E-02	1,64E-01	5,05E-02	7,32E-02
Flux neutronique thermique région 2	4,84E-02	1,25	4,80E-02	1,65E-01	4,77E-02	1,74E-01

Tableau 5.12 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin

Simulation	Référence	Importance DRAGON	Importance INIPOND
Temps CPU (en h)	33.1	46.8	52.6

Tableau 5.13 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin (flux neutronique)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	0,067	0,94	9,96	14,10	148,88
Flux neutronique thermique région 1	0,052	4,97	1,74	95,16	33,29
Flux neutronique rapide région 2	0,055	2,21	9,87	40,36	179,94
Flux neutronique thermique région 2	0,054	2,19	1,74	40,79	32,46

On remarque dans un premier temps que ce découpage a globalement détérioré les résultats obtenus avec un découpage à 5 groupes. Les calculs avec INIPOND dans le domaine

rapide semblent les moins touchés. Dans ce domaine énergétique, le découpage a eu un effet très négatif sur l'impact de l'importance déterministe. La discrétisation plus précise du domaine thermique a certainement eu pour effet de splitter d'avantage de neutrons thermiques et d'en tuer d'avantage dans le domaine rapide.

C'est l'effet inverse qui s'est produit avec l'importance calculée par INIPOND. La meilleure discrétisation énergétique du domaine rapide n'a que très peu amélioré la précision des résultats par rapport au découpage à 9 groupes initialement utilisé. L'importance déterministe reste toujours plus efficace dans ce domaine.

Globalement, cette étude a montré une influence plutôt négative de l'augmentation du nombre de groupes de pondération sur la précision des calculs, même si dans certains cas une meilleure discrétisation de l'importance apportait de bonnes améliorations. Nous voyons donc qu'il faut choisir le découpage énergétique des cartes d'importances avec précaution. L'importance déterministe semble être moins sensible au découpage que celle produite par INIPOND, ce qui est un atout non négligeable. Cependant, avec un découpage approprié, permettant de tirer le maximum des deux méthodes, INIPOND reste plus performant que DRAGON.

Le point positif qu'il s'agit de souligner est que même avec un découpage énergétique de pondération inadapté, les simulations non-analogues produisent toujours des résultats plus précis que le calcul sans recours au biaisage.

5.3.2 Étude de l'impact de la discrétisation spatiale de l'importance

Nous reprenons notre découpage énergétique de référence. Pour tester l'impact de la finesse du maillage spatial sur les performances des cartes d'importances produites, nous choisissons une discrétisation plus grossière : les lames de béton sont découpées en seulement deux régions de 4 cm, et les deux régions de 1 cm dans l'air d'une part, et au niveau de la source d'autre part, sont réunies en une seule région de 2 cm dans ce nouveau maillage de pondération.

Les tableaux 5.14, 5.15 et 5.16 donnent, pour les flux rapide et thermique des deux régions de l'air, les erreurs statistiques, les temps de calcul et les facteurs de qualité des calculs de référence, biaisé avec la carte d'importance déterministe et avec la carte produite par INIPOND.

Tableau 5.14 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier

Grandeur d'intérêt	ϕ Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	ϕ ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	ϕ INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	4,95E-02	1,12	5,06E-02	1,15E-01	5,05E-02	7,58E-02
Flux neutronique thermique région 1	4,84E-02	1,27	4,80E-02	2,70E-01	4,79E-02	7,79E-02
Flux neutronique rapide région 2	4,96E-02	1,24	5,06E-02	1,19E-01	5,06E-02	7,76E-02
Flux neutronique thermique région 2	4,84E-02	1,25	4,80E-02	2,35E-01	4,79E-02	7,81E-02

Tableau 5.15 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier

Simulation	Référence	Importance DRAGON	Importance INIPOND
Temps CPU (en h)	33.1	39.8	52.3

Tableau 5.16 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (flux neutronique)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	0,067	5,24	9,25	78,29	138,40
Flux neutronique thermique région 1	0,052	0,96	8,77	18,28	167,80
Flux neutronique rapide région 2	0,055	4,92	8,83	89,71	161,10
Flux neutronique thermique région 2	0,054	1,27	8,72	23,63	162,83

Comparons ces résultats avec ceux des tableaux 5.6, 5.2 et 5.7. La finesse du maillage de pondération ne semble pas impacter le temps de calcul lorsque l'importance déterministe

est utilisée. La précision des calculs est en revanche modifiée. En effet, la discrétisation plus grossière permet d'augmenter la précision du flux dans le domaine rapide, domaine le plus découpé. Au contraire, les valeurs calculées dans le domaine thermique perdent fortement en précision comparativement au calcul où le maillage de pondération est fin. La combinaison d'un maillage spatial grossier et d'un découpage énergétique plus fin dans le domaine rapide que dans le domaine thermique donne, avec utilisation de l'importance produite par DRAGON, de meilleurs résultats dans le domaine rapide, ce qui est intuitivement logique au vu de cette discrétisation du domaine énergétique. Une forte discrétisation spatiale semble avoir contrebalancé les effets du découpage énergétique. Il est possible que cette forte discrétisation, notamment dans le béton qui est un milieu très diffusant, et donc thermalisant, favorise la simulation de ces diffusions, et donc augmente la population des neutrons du domaine thermique, au détriment de celle du domaine rapide, qui sont capables d'atteindre le détecteur.

La carte d'importance produite par INIPOND donne des erreurs statistiques quasiment identiques pour les deux maillage spatiaux. Les performances de ce module en terme de précision des calculs ne semble pas être sensibles au maillage spatial utilisé. Le calcul de l'importance dépendant principalement des coefficients de Placzek, qui sont les mêmes dans les deux cas (le découpage énergétique est le même, et ces coefficients ne dépendent pas du maillage spatial), il est normal que l'importance soit moins affectée en un emplacement donné pour ces deux types de découpage, comparativement au flux adjoint dont les valeurs homogénéisées dépendent du volume considéré. Pour un découpage énergétique donné, les performances des cartes d'importances produites par DRAGON sont donc plus sensibles au découpage spatial de pondération que celles produites par INIPOND.

Jusqu'à présent, le découpage spatial de pondération a toujours permis d'avoir une valeur d'importance correspondant à un milieu homogène. Or, les importances calculées par INIPOND dépendent du milieu traversé. Nous proposons un dernier test mettant en jeu un découpage spatial présentant en alternance des mailles de 4 cm de long homogènes, et des mailles de 5 cm de long, composées d'une lame d'acier et d'une couche de béton, de sorte que les neutrons traversent d'abord le béton puis l'acier pour une zone d'importance constante.

Les tableaux 5.17, 5.18 et 5.19 donnent les résultats des simulations menées avec ces paramètres de pondération.

L'utilisation de mailles hétérogènes n'a pas beaucoup d'effet sur la précision des simulations utilisant les cartes produites par INIPOND, et permet d'améliorer le temps de calcul. Cette nouvelle discrétisation spatiale semble avoir des effets bénéfiques sur les performances de la carte produite par DRAGON. En effet, si la précision du domaine thermique est un peu

Tableau 5.17 Flux neutronique et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes)

Grandeur d'intérêt	ϕ Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	ϕ ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	ϕ INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	4,95E-02	1,12	5,05E-02	1,10E-01	5,06E-02	7,62E-02
Flux neutronique thermique région 1	4,84E-02	1,27	4,79E-02	1,10E-01	4,80E-02	8,35E-02
Flux neutronique rapide région 2	4,96E-02	1,24	5,05E-02	1,07E-01	5,06E-02	7,70E-02
Flux neutronique thermique région 2	4,84E-02	1,25	4,79E-02	1,07E-01	4,80E-02	8,35E-02

Tableau 5.18 Temps de calcul pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes)

Simulation	Référence	Importance DRAGON	Importance INIPOND
Temps CPU (en h)	33.1	38.5	44.3

Tableau 5.19 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Flux neutronique rapide région 1	0,067	5,92	10,81	88,55	161,73
Flux neutronique thermique région 1	0,052	5,97	9,00	114,27	172,19
Flux neutronique rapide région 2	0,055	6,31	10,59	115,06	193,06
Flux neutronique thermique région 2	0,054	6,27	8,99	117,02	167,86

altérée, celle du domaine rapide est améliorée. Cette carte d'importance semble avoir mieux équilibré les convergences sur le domaine énergétique. Il est possible qu'une importance identique dans les lames d'acier et dans le béton situé en amont permette de mieux gérer les interfaces entre milieux, et de ce fait avoir un compromis entre Splitting et Roulette Russe plus efficace sur l'ensemble du domaine énergétique.

5.3.3 Bilan de l'étude

Dans cette section nous avons testé les performances d'un biaisage du calcul TRIPOLI en utilisant des cartes d'importances produites par le calcul du flux pseudo-adjoint de DRAGON. Globalement, l'utilisation de ces cartes permet un gain substantiel de la précision des calculs, contre une augmentation du temps de calcul. Le facteur de qualité est cependant amélioré significativement. Nous avons comparé ses performances avec l'importance produite par le module interne INIPOND de TRIPOLI. INIPOND produit des cartes donnant des précisions

meilleures que celles produites par ITR :, mais en un temps plus long. Le facteur de qualité des calculs biaisés par l'importance d'INIPOND reste en règle générale plus élevé que celui des simulations utilisant l'importance déterministe. Les cartes d'importances produites par DRAGON restent tout de même performantes et montrent une sensibilité à la discrétisation énergétique moins forte que celles produites par TRIPOLI, qui peuvent dégrader fortement le facteur de qualité par rapport à un découpage optimisé. Les importances déterministes sont en revanche beaucoup plus sensibles au maillage spatial.

En conclusion, on peut dire que le biaisage par le flux adjoint déterministe apporte les résultats escomptés, même s'il semble, pour le problème étudié, être moins performant que le biaisage réalisé en interne de TRIPOLI. L'étude de géométries plus complexes, contenant éventuellement d'autres matériaux, et pour lesquelles INIPOND ne donne pas de résultats satisfaisants, permettrait de mettre à l'épreuve l'utilisation de l'adjoint DRAGON.

CHAPITRE 6

CONCLUSION

6.1 Synthèse des travaux

L'étude menée dans ce document s'inscrit dans la problématique de couplage entre les méthodes déterministes et stochastiques pour la résolution de l'équation de transport des neutrons. Elle a permis d'établir un chainage du code déterministe DRAGON vers le code Monte Carlo TRIPOLI et de comparer ces deux codes sur la simulation de problèmes de criticité d'une part, et de radioprotection d'autre part. Nous avons développé deux méthodes dans le but d'améliorer la convergence de TRIPOLI dans le cadre ces deux types de calcul. Dans chacun des cas nous avons utilisé des données calculées par DRAGON pour initialiser le calcul de TRIPOLI, pour répondre à des problématiques propres à chaque type de simulation.

Nous nous sommes tout d'abord penché sur le problème de convergence des sources d'un calcul de criticité. Nous avons élaboré une méthode qui consistait à initialiser la source de TRIPOLI par une distribution de sources de neutrons produite par DRAGON. Il s'agissait ici d'améliorer les conditions initiales de l'algorithme d'itération de puissance utilisé pour la résolution de l'équation de transport dans ce type de calcul. Pour cela nous avons mis en place dans DRAGON un nouveau module appelé STR : permettant de récupérer les taux de production des neutrons et de calculer l'intensité des sources. Ce module génère une liste de sources au format d'un jeu de données TRIPOLI, avec une intensité calculée préalablement, et les caractéristiques géométriques de chaque source. Il permet de choisir entre deux distributions possibles en énergie. La première consiste à générer une seule source par région, et de définir les options selon la syntaxe de TRIPOLI pour pondérer la production des neutrons par un spectre de Watt. La deuxième option génère, pour chaque région, autant de sources que de groupes d'énergie de la bibliothèque de section efficaces utilisée dans DRAGON où le spectre de fission est non nul, la distribution étant uniforme sur chaque groupe.

L'utilisation de ces sources DRAGON a été testée sur deux assemblages REP-UOX : un 17×17 complet et un 3×3 se limitant à un trou d'eau entouré de cellules de combustible. Après avoir vérifié la cohérence des modèles DRAGON et TRIPOLI de ces assemblages nous avons testé les performances de notre méthode pour un calcul de k_{eff} et un calcul de flux. Nous avons observé une petite amélioration de la convergence du k_{eff}, surtout en utilisant un découpage multigroupe des sources pour une région donnée. Concernant le calcul du flux, nous

avons observé quelques incohérences. Le calcul converge plus rapidement lors des 100 premiers batchs pour les cellules situées au centre de l'assemblage, et dans une moindre mesure pour les cellules en périphérie. Nous avons cependant remarqué que pour un nombre plus faible de neutrons par cycle, le calcul utilisant une source DRAGON est moins précis que celui utilisant une source ponctuelle. Ceci est surtout vrai pour les cellules proches des frontières de la géométrie. Nous avons utilisé une distribution de sources identique à celle produite par le module STR :, dont l'intensité est calculée à partir des résultats produits par TRIPOLI, pour tenter de diagnostiquer l'origine de ces incohérences. Les observations précédentes se sont retrouvées avec l'utilisation de ce type de source initiale. Il semble donc y avoir un problème d'implantation de l'information dans TRIPOLI, qui ne l'exploite certainement pas au mieux. Cette dernière remarque se justifie également par le fait que les 15 premiers batchs de TRIPOLI ne donnent pas de valeur de flux convergée quelque soit la distribution de sources utilisée.

Nous nous sommes ensuite intéressé à la problématique du biaisage du calcul Monte Carlo. Cette technique est particulièrement adaptée à des calculs de radioprotection mettant en jeu une source de neutrons, un milieu absorbant servant d'écran de protection, et un détecteur situé de l'autre côté de cet écran. Elle met en jeu la notion d'importance neutronique. Nous avons montré que le flux adjoint, solution de l'équation adjointe intégrodifférentielle de transport, correspondait à l'importance neutronique et pouvait donc être utilisé comme fonction d'importance dans le cadre du biaisage Monte Carlo. Nous avons développé un module dans DRAGON appelé ITR : permettant de générer un fichier contenant des cartes d'importances lisibles par TRIPOLI. Ce module permet de récupérer le flux pseudo-adjoint calculé par DRAGON par la méthode des probabilités de collisions, et qui correspond à la solution de l'équation adjointe sur sa forme intégrodifférentielle. Il homogénéise et condense ce flux pseudo-adjoint en fonction du maillage spatial et énergétique de pondération du calcul stochastique défini par l'utilisateur.

L'utilisation de ces cartes d'importances déterministes a été testée sur un problème de radioprotection mettant en jeu une source, un écran de béton contenant des lames d'acier, et un détecteur placé dans l'air de l'autre côté de l'écran. Nous avons tout d'abord testé la cohérence des modèles DRAGON et TRIPOLI de ce problème, afin de produire des cartes d'importances pertinentes à l'aide de DRAGON. Ces importances ont permis d'améliorer de manière significative la précision des calculs effectués dans l'air, à l'opposé de la source de neutrons, par rapport à une simulation analogue n'utilisant pas de biaisage. Nous avons pu comparer les performances de ces cartes avec celles produites par INIPOND, un module interne à TRIPOLI. Les cartes d'importances produites par DRAGON sont un peu moins

performantes que celles produites par INIPOND. Elles semblent cependant moins sensibles au découpage énergétique, mais plus sensibles au découpage spatial de pondération que les importances d'INIPOND. Notre méthode présente toutefois les résultats attendus et améliorent considérablement le facteur de qualité des calculs.

6.2 Limitations des solutions proposées et perspectives d'amélioration

Si les méthodes développées ont globalement eu l'effet escompté, elles présentent cependant des limites qu'il s'agit de souligner ici. Des pistes d'améliorations sont également à proposer pour contourner ces limites.

La solution que nous avons proposé pour améliorer la convergence des sources est la méthode la plus perfectible. On peut tout d'abord mentionner la lourdeur de sa mise en place. En effet, le module STR : produit un fichier contenant une liste de sources. Cette liste doit être inclue au jeu de données TRIPOLI, ce qui rend le fichier très gros. Un nombre de sources trop élevé rend le fichier inexploitable par le code. L'utilisation d'un découpage multigroupe de sources est notamment impossible sur une géométrie équivalente à un assemblage REP. De plus, les incohérences observées sur la convergence de certains calculs de flux semblent confirmer que l'implémentation de notre méthode n'est pas optimale.

Il semble donc nécessaire d'améliorer la mise en place de notre méthode dans des travaux futurs. Tout d'abord, il s'agira de trouver une autre solution pour réduire la taille d'un fichier contenant un trop grand nombre de sources, notamment lors de l'utilisation d'une distribution multigroupe des sources. Une modification de TRIPOLI peut aussi être une option afin que le code puisse lire et exploiter d'une autre façon les sources initiales. Celle-ci devrait aussi permettre au code d'utiliser plus efficacement l'information transmise par DRAGON. Ceci entrainerait également une modification du module STR : de DRAGON concernant la mise en forme de la liste des sources. Il serait intéressant de comparer les performances en terme de convergence des calculs de cette nouvelle implémentation des sources initiales de neutrons par rapport à celle proposée dans ce document. De plus, le problème traité comporte des distributions de sources relativement homogènes (la géométrie est petite et tous les assemblages sont neufs). Il serait intéressant de tester cette méthode sur des géométries plus grandes, et pour lesquelles les distributions de sources sont moins uniformes (ajout de combustible MOX, étude d'un assemblage qui a déjà été en partie brûlé dans le réacteur, étude axiale d'un crayon de combustible).

L'utilisation de l'importance déterministe pour le biaisage du calcul TRIPOLI a été plus satisfaisante. Cependant, si elle permet un gain important de convergence, elle reste glo-

balement moins performante que celle calculée par INIPOND. Nous avons observé que le découpage énergétique de pondération avait un impact plus important sur les performances des cartes produites par INIPOND par rapport à celles produites par ITR :. Cependant, pour un maillage spatial grossier, l'importance déterministe perd fortement en gain de précision du calcul. Le temps de calcul DRAGON, nécessaire à produire le fichier d'importance, n'est pas en revanche un frein à notre méthode pour des géométries relativement simples.

Au niveau des travaux futurs, il serait intéressant de tester notre méthode sur des géométries plus complexes pour avoir une idée plus générale de ses performances réelles, et de l'impact de la nature des compositions des mélanges. Une étude prenant en compte l'eau comme barrière pourrait par exemple être intéressante. Il serait intéressant d'évaluer les performances de l'adjoint déterministe pour calculer la réponse de détecteurs placés à très grande distance de la source, dans des configurations où INIPOND ne donne pas satisfaction. Ces géométries pourraient aussi permettre d'étudier l'impact de la dépendance angulaire sur le facteur de qualité.

RÉFÉRENCES

BARREAU, A. (2008). Burn-up credit criticality benchmark : Phase 2-D. PWR-UO2 assembly. study of control rod effects on spent fuel composition. Rapport technique, Nuclear Energy Agency.

COURAU, T. et MARLEAU, G. (2002). Adjoint and generalized adjoint flux calculations using the collision probability technique. *Nuclear Science and Engineering*, 141, 19–32.

DUMONTEIL, E. et MALVAGI, F. (2012). Automatic treatment of the variance estimation bias in TRIPOLI-4 criticality calculations. *Proceedings of ICAPP 2012*. Chicago, USA.

GIFFARD, F. (2000). *Développements utilisant des méthodes stochastiques et déterministes pour l'analyse de systèmes nucléaires complexes*. Thèse de doctorat, Université d'Evry Val d'Essonne.

HÉBERT, A. (2009). *Applied Physics Reactors*. Presse Internationales Polytechnique.

HÉBERT, A. et MARLEAU, G. (1991). Generalization of the Stamm'ler method for the self shielding of resonant isotopes in arbitrary geometries. *Nuclear Science and Engineering*, 108, 230–239.

JINAPHANH, A. et MISS, J. (2012). A prototype for coupling deterministic DRAGON and Monte Carlo MORET codes for criticality calculations. *ANS Winter Meeting and Nuclear Technology Expo*. San Diego, USA.

LE MER, J. (2007). *Simulations du comportement neutronique des REP en utilisant les codes DRAGON et DONJON*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

LEWIS, E. E. et MILLER JR, W. (1993). *Computational Methods of Neutron Transport, 2nd edition*. John Wiley Sons, Inc., New York.

LUX, I. et KOBLINGER, L. (1990). *Monte Carlo Particle Transport Methods : Neutron and Photon Calculations*. CRC Press.

MARLEAU, G. (2001). DRAGON theory manual part 1 : Collision probability calculations. Rapport technique IGE-236 Rev. 1, Institut de Genie Nucleaire, École Polytechnique de Montreal.

MARLEAU, G. (2006). New geometries processing in dragon : The NXT : module. Rapport technique IGE-260, Institut de Genie Nucleaire, École Polytechnique de Montreal.

MARLEAU, G., HÉBERT, A. et ROY, R. (2008). A user guide for DRAGON version3.06. Rapport technique IGE 174R8, Institut de Genie Nucleaire, École Polytechnique de Montreal.

MARTIN, N. (2011). *Application de la méthode des sous-groupes au calcul Monte Carlo multigroupe*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.

METROPOLIS, N. (1987). The beginning of the Monte Carlo method. *Los Alamos Science*, 15.

MÉTIVIER, H. (2006). *Radioprotection et ingénierie nucléaire*. EDP Sciences.

PETIT, O., HUGOT, F., LEE, Y., JOUANNE, C. et MAZZOLO, A. (2008). Manuel de l'utilisateur de code TRIPOLI 4 - version 6. Rapport technique CEA-R-4556, Commissariat à l'Énergie Atomique.

ROY, R. et HÉBERT, A. (2000). The GAN generalized driver. Rapport technique IGE-158, Institut de Genie Nucleaire, École Polytechnique de Montreal.

TOMMY-MARTIN, M. (2006). Rapport technique confidentiel, EDF R&D.

WAGNER, J. et HAGHIGHAT, A. (1998). Automated variance reduction of Monte Carlo shielding calculations using discrete ordinates adjoint function. *Nuclear Science and Engineering*, 128, 186–208.

YUN, S. et CHO, N. Z. (2010). Acceleration of source convergence in Monte Carlo k-eigenvalue problems via anchoring with a p-CMFD deterministic method. *Annals of Nuclear Energy*, 37, 1649–1658.

ANNEXE A

Résultats de l'utilisation du biaisage pour les taux de réaction

Dans cette annexe nous présentons les résultats des tests réalisés dans le cadre du biaisage par l'adjoint déterministe dans la section 5.3. L'analyse de ces résultats mène aux mêmes conclusions que celle déjà présentée pour le flux au chapitre 5.

Le premier découpage énergétique à 9 groupes considéré donne pour les taux de collision les résultats présentés dans les tableaux A.1 et A.2 :

Tableau A.1 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	τ_t Référence	$\sigma_\%$ Référence	τ_t ITR :	$\sigma_\%$ ITR :	τ_t INIPOND	$\sigma_\%$ INIPOND
Taux collision rapide région 1	1,68E-05	1,27	1,71E-05	9,73E-02	1,71E-05	7,64E-02
Taux collision thermique région 1	2,58E-05	1,27	2,56E-05	2,25E-01	2,58E-05	5,97E-01
Taux collision rapide région 2	1,68E-05	1,45	1,71E-05	1,02E-01	1,71E-05	7,63E-02
Taux collision thermique région 2	2,58E-05	1,26	2,56E-05	9,82E-02	2,58E-05	5,97E-01

Tableau A.2 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin (taux de collision)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux collision rapide région 1	0,052	5,94	9,90	113,90	189,76
Taux collision thermique région 1	0,052	1,11	0,16	21,29	3,12
Taux collision rapide région 2	0,040	5,40	9,91	134,57	247,03
Taux collision thermique région 2	0,053	5,84	0,16	110,12	3,05

Pour les taux d'absorption, les résultats sont compilés dans les tableaux A.3 et A.4 :

Tableau A.3 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	τ_{abs} Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	τ_{abs} ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	τ_{abs} INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Taux absorption rapide région 1	1,49E-07	1,34	1,55E-07	1,09E-01	1,55E-07	8,08E-02
Taux absorption thermique région 1	2,97E-06	1,37	2,94E-06	1,48E-01	2,96E-06	6,57E-01
Taux absorption rapide région 2	1,48E-07	1,34	1,55E-07	1,21E-01	1,55E-07	7,64E-02
Taux absorption thermique région 2	2,97E-06	1,37	2,94E-06	1,06E-01	2,96E-06	6,58E-01

Tableau A.4 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (1^{er} découpage) et maillage spatial fin (taux d'absorption)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux absorption rapide région 1	0,047	4,73	8,85	101,41	189,69
Taux absorption thermique région 1	0,045	2,57	0,13	57,45	2,99
Taux absorption rapide région 2	0,046	3,87	9,89	83,41	212,94
Taux absorption thermique région 2	0,045	4,97	0,13	111,64	2,99

Le deuxième découpage énergétique à 9 groupes considéré donne pour les taux de collision les résultats présentés dans les tableaux A.5 et A.6 :

Tableau A.5 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	τ_t Référence	$\sigma_\%$ Référence	τ_t ITR :	$\sigma_\%$ ITR :	τ_t INIPOND	$\sigma_\%$ INIPOND
Taux collision rapide région 1	1,68E-05	1,27	1,72E-05	3,26E-01	1,71E-05	7,14E-02
Taux collision thermique région 1	2,58E-05	1,27	2,56E-05	1,10E-01	2,55E-05	1,77E-01
Taux collision rapide région 2	1,68E-05	1,45	1,71E-05	1,94E-01	1,71E-05	7,18E-02
Taux collision thermique région 2	2,58E-05	1,26	2,56E-05	1,66E-01	2,55E-05	1,77E-01

Tableau A.6 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin (taux de collision)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux collision rapide région 1	0,052	0,94	10,36	18,07	198,46
Taux collision thermique région 1	0,052	4,97	1,68	95,54	32,34
Taux collision rapide région 2	0,040	1,58	10,26	39,46	255,68
Taux collision thermique région 2	0,053	2,15	1,68	40,56	31,71

Pour les taux d'absorption, les résultats sont compilés dans les tableaux A.7 et A.8 :

Tableau A.7 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin

Grandeur d'intérêt	τ_{abs} Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	τ_{abs} ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	τ_{abs} INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Taux absorption rapide région 1	1,49E-07	1,34	1,55E-07	1,53E-01	1,55E-07	7,17E-02
Taux absorption thermique région 1	2,97E-06	1,37	2,94E-06	1,16E-01	2,92E-06	1,94E-01
Taux absorption rapide région 2	1,48E-07	1,34	1,55E-07	1,32E-01	1,55E-07	7,22E-02
Taux absorption thermique région 2	2,97E-06	1,37	2,94E-06	1,80E-01	2,92E-06	1,94E-01

Tableau A.8 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 9 groupes de pondération (2^{me} découpage) et maillage spatial fin (taux d'absorption)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux absorption rapide région 1	0,047	2,53	10,29	54,31	220,66
Taux absorption thermique région 1	0,045	4,41	1,41	98,57	31,45
Taux absorption rapide région 2	0,046	3,42	10,15	73,66	218,55
Taux absorption thermique région 2	0,045	1,84	1,41	41,35	31,61

Le découpage spatial grossier avec des mailles homogènes fournit les résultats présentés dans les tableaux A.9 et A.10 pour les taux de collision :

Tableau A.9 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes)

Grandeur d'intérêt	τ_t Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	τ_t ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	τ_t INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Taux collision rapide région 1	1,68E-05	1,27	1,71E-05	7,83E-02	1,71E-05	7,47E-02
Taux collision thermique région 1	2,58E-05	1,27	2,56E-05	2,64E-01	2,56E-05	7,81E-02
Taux collision rapide région 2	1,68E-05	1,45	1,71E-05	1,29E-01	1,71E-05	7,52E-02
Taux collision thermique région 2	2,58E-05	1,26	2,56E-05	2,30E-01	2,56E-05	7,83E-02

Tableau A.10 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes) (taux de collision)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux collision rapide région 1	0,052	5,24	9,52	100,31	182,48
Taux collision thermique région 1	0,052	0,96	8,72	18,35	167,52
Taux collision rapide région 2	0,040	4,21	9,41	104,87	234,46
Taux collision thermique région 2	0,053	1,32	8,68	24,88	163,49

Pour les taux d'absorption, les résultats sont compilés dans les tableaux A.11 et A.12 :

Tableau A.11 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes)

Grandeur d'intérêt	τ_{abs} Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	τ_{abs} ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	τ_{abs} INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Taux absorption rapide région 1	1,49E-07	1,34	1,55E-07	1,51E-01	1,55E-07	7,61E-02
Taux absorption thermique région 1	2,97E-06	1,37	2,94E-06	2,41E-01	2,93E-06	7,99E-02
Taux absorption rapide région 2	1,48E-07	1,34	1,55E-07	1,63E-01	1,55E-07	7,79E-02
Taux absorption thermique région 2	2,97E-06	1,37	2,94E-06	2,11E-01	2,93E-06	8,02E-02

Tableau A.12 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles homogènes) (taux d'absorption)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux absorption rapide région 1	0,047	3,05	9,18	65,30	196,94
Taux absorption thermique région 1	0,045	1,20	8,32	26,87	185,88
Taux absorption rapide région 2	0,046	2,64	8,75	56,81	188,51
Taux absorption thermique région 2	0,045	1,56	8,27	34,99	185,79

Le découpage spatial grossier avec certaines mailles hétérogènes fournit les résultats présentés dans les tableaux A.13 et A.14 pour les taux de collision :

Tableau A.13 Taux de collision et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes)

Grandeur d'intérêt	τ_t Référence	$\sigma_\%$ Référence	τ_t ITR :	$\sigma_\%$ ITR :	τ_t INIPOND	$\sigma_\%$ INIPOND
Taux collision rapide région 1	1,68E-05	1,27	1,71E-05	1,14E-01	1,71E-05	7,63E-02
Taux collision thermique région 1	2,58E-05	1,27	2,56E-05	1,10E-01	2,56E-05	8,39E-02
Taux collision rapide région 2	1,68E-05	1,45	1,71E-05	1,08E-01	1,71E-05	7,68E-02
Taux collision thermique région 2	2,58E-05	1,26	2,55E-05	1,08E-01	2,56E-05	8,39E-02

Tableau A.14 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) (taux de collision)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux collision rapide région 1	0,052	5,92	10,77	113,46	206,41
Taux collision thermique région 1	0,052	5,97	8,92	114,72	171,29
Taux collision rapide région 2	0,040	6,21	10,64	154,82	265,26
Taux collision thermique région 2	0,053	6,19	8,91	116,59	167,86

Pour les taux d'absorption, les résultats sont compilés dans les tableaux A.15 et A.16 :

Tableau A.15 Taux d'absorption et erreur statistique relative (en %) pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes)

Grandeur d'intérêt	τ_{abs} Référence	$\sigma_{\%}$ Référence	τ_{abs} ITR :	$\sigma_{\%}$ ITR :	τ_{abs} INIPOND	$\sigma_{\%}$ INIPOND
Taux absorption rapide région 1	1,49E-07	1,34	1,55E-07	1,72E-01	1,55E-07	7,92E-02
Taux absorption thermique région 1	2,97E-06	1,37	2,93E-06	1,16E-01	2,94E-06	8,68E-02
Taux absorption rapide région 2	1,48E-07	1,34	1,55E-07	1,39E-01	1,55E-07	9,72E-02
Taux absorption thermique région 2	2,97E-06	1,37	2,93E-06	1,16E-01	2,94E-06	8,70E-02

Tableau A.16 Facteurs de qualité absolus et relatifs à la référence pour une simulation non-analogue à 5 groupes de pondération et maillage spatial grossier (mailles hétérogènes) (taux d'absorption)

Grandeur d'intérêt	Q Référence	Q ITR :	Q INIPOND	Q_{rel} ITR :	Q_{rel} INIPOND
Taux absorption rapide région 1	0,047	2,43	10,01	52,01	214,64
Taux absorption thermique région 1	0,045	5,35	8,32	119,49	185,85
Taux absorption rapide région 2	0,046	3,73	6,64	80,39	143,01
Taux absorption thermique région 2	0,045	5,40	8,29	121,34	186,14