

- Note CEA-N-2485 -

Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay
Institut de Recherche Technologique et de Développement Industriel
Division d'Etude et de Développement des Réacteurs
Département des Etudes Mécaniques et Thermiques

**LES TABLES DE PROBABILITE
APPLICATION AU TRAITEMENT DES SECTIONS EFFICACES
POUR LA NEUTRONIQUE**

Première partie : DANS L'HYPOTHESE STATISTIQUE

par

Pierre RIBON, Jean-Marie MAILLARD

- Juin 1986 -

93110001

- Note CEA-N-2485 -

DESCRIPTION-MATIERE (*mots clefs extraits du thesaurus SIDON/INIS*)

en français

SECTIONS EFFICACES TOTALES
FLUCTUATIONS
REACTIONS PAR NEUTRONS
METHODE DES MOMENTS
PRECISION
PROBABILITE
QUADRATURES

en anglais

TOTAL CROSS SECTIONS
FLECTUATIONS
NEUTRON REACTIONS
MOMENTS METHOD
ACCURACY
PROBABILITY
QUADRATURES

AVIS IMPORTANT :

Corriger au crayon tendre sans appuyer
et, dans la mesure du possible, en dehors
du cadre noir.

NOTE CEA-N-2485 - P. RIBON, J.M. MAILLARD

LES TABLES DE PROBABILITE. APPLICATION AU TRAITEMENT DES SECTIONS EFFICACES POUR LA NEUTRONIQUE. 1ère partie : Dans l'hypothèse statistique.

Sommaire - L'idée de décrire les fluctuations des sections efficaces par des jeux de valeurs discrètes, appelés "tables de probabilité", a été proposée vers 1970. Nous proposons de décrire les tables de probabilités en égalant les moments de la distribution des sections efficaces à ceux de la table de probabilité. Cette définition introduit les polynômes orthogonaux et la quadrature de GAUSS par l'intermédiaire des approximants de PADE. Cette base mathématique s'applique très bien à la section efficace totale. Des difficultés apparaissent quand les sections partielles sont prises en compte, difficultés liées à l'ambiguïté de la définition d'approximants de PADE à plusieurs variables. Néanmoins, nous proposons des solutions et des choix qui semblent satisfaisants. Des comparaisons sont faites avec d'autres définitions des tables de probabilité, et le calcul de mélanges de noyaux est examiné.

1986

84 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

NOTE CEA-N-2485 - P. RIBON, J.M. MAILLARD

PROBABILITY TABLES. APPLICATION TO CROSS SECTION PROCESSING FOR NEUTRONIC. First part : With the statistical hypothesis.

Summary - The idea of describing neutron cross-section fluctuations by sets of discrete values, called "probability tables", was formulated some 15 years ago. We propose to define the probability tables from moments by equating the moments of the actual cross-section distribution in a given energy range to the moments of the table. This definition introduces PADE approximants, orthogonal polynomials and GAUSS quadrature. This mathematical basis applies very well to the total cross-section. Some difficulties appear when partial cross-section are taken into account, linked to the ambiguity of the definition of multivariate PADE approximants. Nevertheless, we propose solutions and choices which appear to be satisfactory. Comparisons are made with other definitions of probability tables and the calculation of mixtures of nuclei is considered.

1986

84 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

93110703

- Note CEA-N-2485 -

Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay
Institut de Recherche Technologique et de Développement Industriel
Division d'Etude et de Développement des Réacteurs
Département des Etudes Mécaniques et Thermiques

LES TABLES DE PROBABILITE
APPLICATION AU TRAITEMENT DES SECTIONS EFFICACES
POUR LA NEUTRONIQUE

Première partie : DANS L'HYPOTHESE STATISTIQUE

par

Pierre RIBON, Jean-Marie MAILLARD

93110004

LES TABLES DE PROBABILITE
APPLICATION AU TRAITEMENT DES SECTIONS EFFICACES POUR LA NEUTRONIQUE

Première partie : dans l'hypothèse statistique

P. RIBON et J.M. MAILLARD

RESUME :

L'idée de décrire les fluctuations des sections efficaces par des "tables de probabilité" a été introduite indépendamment par les Américains, dans les années 1970 et, peu avant, par des Soviétiques sous le nom de "méthode des sous-groupes". Nous rappelons l'évolution des 2 approches et leurs différences : essentiellement l'aspect "tables de probabilité" concerne surtout l'établissement de ces tables, alors que la "méthode des sous-groupes" traite principalement de leur utilisation en neutronique analytique, problème que nous considérons par ailleurs.

Nous généralisons cette approche en définissant une table de probabilité d'ordre N pour la section efficace totale par une méthode de moments (égalité de 2N moments, positifs et négatifs, de la distribution de $\sigma(E)$ et de la table de probabilité). Ce faisant, nous nous basons sur la théorie mathématique bien établie des polynômes orthogonaux et de la quadrature de GAUSS.

Pour la section efficace totale le seul problème est de déterminer les moments à prendre en compte: nous recommandons de prendre les moments d'ordre $n = 1 - N$ à $n = N$, étant entendu qu'il est toujours possible à l'utilisateur de réduire l'ordre de la table en la spécialisant à son problème.

Le problème n'est pas aussi simple quand on veut introduire les sections efficaces partielles : cela est lié au fait que les approximants de PADE à plusieurs variables ne peuvent pas être définis sans ambiguïté. Néanmoins, nous proposons de définir la table de probabilité des partielles à partir des intégrales de $\sigma_x(E) * \sigma_t^m(E)$, où $\sigma_x(E)$ (une certaine section partielle) intervient toujours de façon linéaire. Il faut, là aussi, déterminer le domaine de variation de m afin d'obtenir la cohérence interne des tables, et la précision requise. Nous recommandons $m = -N/2$ à $(N-1)/2$.

Mais on ne peut être assuré que les valeurs de σ_{xi} seront toujours sur le support de $\sigma_x(E)$: nous obtenons effectivement des exemples contraires, qui ne paraissent pas être rédhibitoires.

Les tables de probabilité définies à partir des moments des sections efficaces constituent une donnée fondamentale, propice à tout calcul. Nous les appliquons, par exemple, au calcul des sections effectives : on peut obtenir une précision aussi bonne que l'on veut (selon l'ordre de la table) mais inférieure (à ordre égal) à celle donnée par ce que l'on appelle improprement la méthode des sous-groupes : cela est normal car les tables de probabilité sont, dans ce cas, ajustées sur les données à décrire.

Nous appliquons les tables de probabilité (moments) au calcul de mélanges de noyaux : nous montrons que ce mélange est calculé correctement, y compris pour des tables de probabilité décrivant les moments négatifs (i.e. les creux de sections efficaces). Nous montrons aussi comment on peut réunir des groupes adjacents en énergie.

En conclusion, la méthode des tables de probabilité basées sur les moments est une méthode d'intégration qui doit trouver son accomplissement en neutronique par la méthode des sous-groupes.

Mots-clés

SECTIONS EFFICACES EFFECTIVES - TABLES DE PROBABILITE -
QUADRATURE DE GAUSS

PROBABILITY TABLES. APPLICATION TO CROSS SECTIONS PROCESSING FOR NEUTRONIC.

First part : With the statistical hypothesis.

ABSTRACT

The idea of describing cross section fluctuations by "probability tables" was introduced independently in the 1970's by the Americans and, somewhat earlier, by Soviet authors under the name "sub-group method". The present paper recalls the evolution of the two approaches and their differences: essentially the emphasis of the American works mainly concerns the establishment of these tables, while the "sub-group method" deals chiefly with their use in analytic neutronics, a problem that will be considered in another article.

We generalize this approach by defining a probability table of order N for the total cross section by a moments method (equality of $2N$ moments, positive and negative, of the distribution of $\sigma(E)$ and of the probability table). In so doing, we base ourselves on the well-established mathematical theory of orthogonal polynomials and of Gauss quadrature.

For the total cross section, the only problem is to determine which moments should be taken into account: we recommend taking moments with order ranging from $n = 1 - N$ to $n = N$, although it is always possible for a user to reduce the order of the table so as to adapt it to his specific application.

The problem is not so simple when we want to introduce the partial cross sections: this is linked to the fact that the multivariate PADE approximant cannot be unambiguously defined. Nevertheless, we propose to define the probability table for partial cross sections from integrals of: $\sigma_x(E) * \sigma_t^m(E)$, where $\sigma_x(E)$ (a given partial cross section) always appears LINEARLY. Here again it is necessary to determine an appropriate range of m in order to obtain the internal consistency of the tables, and the required accuracy. We recommend $m = -N/2$ to $(N-1)/2$.

But one cannot be certain that the values of σ_{xi} will always be in the range covered by $\sigma_x(E)$: values outside this range are sometimes obtained, but their effect is not critical.

The probability tables defined from the moments of neutron cross sections are basic data, suitable for any calculation. For instance, we can apply them to the computation of effective cross sections: the accuracy can be as good as required according to the order of the table, but for a given order it will be lower than the accuracy obtained by the improperly named "sub-group method"; this is not surprising since the probability tables are then, in fact, adjusted to the data to be described.

We apply the (moment) probability tables to calculate the mixture of nuclei: it can be calculated correctly, including the case of probability tables describing negative moments (i.e. dips in cross sections). We show how neutron energy groups can be merged in a simple way.

In conclusion, the method of probability tables based upon moments is an integration method which is complemented in neutronics problems by the sub-group method.

90110507

TABLE DES MATIERES

	<u>Pages</u>
INTRODUCTION	1
I - LES TABLES DE PROBABILITE	2
I.1 - Le principe	2
I.2 - Evolutions de l'Ecole Américaine	4
I.3 - L'Ecole Soviétique	6
I.4 - L'approche française	7
II - CALCUL ET PROPRIETES DES TABLES DE PROBABILITE A 1 VARIABLE	8
II.1 - Résolution du système d'équations	8
II.2 - Propriétés élémentaires	11
II.3 - La théorie mathématique des polynômes orthogonaux et de la quadrature de GAUSS	13
II.4 - La cohérence des moments	15
III - LA METHODE EQUIPROBABLE DES MOMENTS OU METHODE DE TCHEBYCHEV	16
IV - LES EXEMPLES DE CULLEN	20
IV.1 - Le premier exemple	20
IV.2 - Le second exemple	22
V - CHOIX DE LA TABLE DE PROBABILITE A 1 VARIABLE	22
VI - LES TABLES DE PROBABILITE A PLUSIEURS VARIABLES	25
VI.1 - Les approximants de PADE à 2 variables	30
VI.2 - Les tables de probabilité de sections efficaces partielles	32
VI.3 - Ordre 1 pour les sections partielles	34
VI.4 - Définition des tables de probabilité de sections partielles	35
VI.5 - Cohérence interne des tables de probabilité	35
VII - CHOIX DES TABLES DE PROBABILITE DES SECTIONS PARTIELLES	38
VII.1 - Précision	38
VII.2 - Valeurs de σ_{xi} négatives	46
VII.3 - Cas des tables $\delta n = 2$	51

	Pages
VIII - LES TABLES DE PROBABILITE : DONNEES FONDAMENTALES OU METHODE PHENOMENOLOGIQUE D'INTERPOLATION ?	52
IX - COMPOSITION DES SECTIONS EFFICACES	57
IX.1 - Cas des moments positifs	57
IX.2 - Cas des moments négatifs	58
IX.3 - Conditions de la vérification numérique de la composition des moments	59
IX.4 - Le modèle analytique	61
IX.5 - Conclusion	68
X - REUNION DE DOMAINES D'ENERGIE ADJACENTS	68
CONCLUSION	69
REFERENCES	70
ANNEXE - L'extension aux cas non statistiques	

LES TABLES DE PROBABILITE APPLICATION AU TRAITEMENT DES SECTIONS EFFICACES POUR LA NEUTRONIQUE

Première partie : dans l'hypothèse statistique

P. RIBON ET J.M. MAILLARD

La représentation des sections efficaces par des "tables de probabilité" pour les besoins des calculs neutroniques fut avancée pour la première fois par les physiciens soviétiques d'Obninsk sous le nom de "méthode des sous-groupes" [Nicolaev et al, Ni 69, Ni 70]* ; indépendamment, un ou deux ans après, Levitt proposa la même idée sous le nom de "tables de probabilité" [Le 70, Le 72]. Quelques études soviétiques suivirent, nous en connaissons mal les développements récents ; nous connaissons mieux les travaux de Levitt et Cullen et leurs collaborateurs [Ot 72, Cu 74, Cu 77, Cu 80 ; aussi Mu 81].

Fondamentalement, les idées américaines et soviétiques sont les mêmes : les premiers insistent davantage sur l'établissement des tables, alors que les seconds proposent l'abandon du concept de "section effective" en neutronique pour utiliser directement les tables de probabilité (chaque groupe se trouve ainsi divisé en sous-groupes, régis par les mêmes équations neutroniques que les groupes, à très peu près).

La communauté scientifique internationale accorda un intérêt d'estime à ces idées, mais ne les utilisa que très partiellement : sans doute les neutroniciens ont-ils été effrayés par l'idée d'augmenter le nombre de groupes dans leurs calculs (d'un facteur 2 à 3), et ont-ils préféré garder le concept de "section effective", malgré ses ambiguïtés.

Au contraire, nous avons voulu approfondir et généraliser ces concepts, en essayant d'y apporter plus de rigueur.

Nous parlerons de "tables de probabilité" chaque fois qu'il s'agira de l'établissement de ces tables et de leurs propriétés. Leur application à la neutronique sera qualifiée de "méthode des sous-groupes".

* Nota : cf des travaux antérieurs [Ni 63].

Ce rapport traite du premier point dans les cas "statistiques", i.e.:

- lorsque les structures des sections efficaces sont inconnues, et doivent donc être traitées par un modèle statistique ;
- ou lorsque ces structures, connues, sont suffisamment nombreuses et complexes sur le domaine d'énergie considéré pour être traitées "statistiquement".

Les quelques applications neutroniques que nous ferons seront toutes traitées dans l'approximation "résonance étroite".

I - LES TABLES DE PROBABILITE :

I.1 - Le principe : Le domaine de variation de σ est partagé en N intervalles : 4 sur la figure 1. A chacun de ces intervalles on associe un couple de valeurs p_i, σ_i : p_i représentera la probabilité de présence de $\sigma(E)$ entre S_{i-1} et S_i , σ_i sera une valeur caractéristique de l'intervalle.

En termes mathématiques, p_i sera donnée par :

$$(1) \quad p_i = \frac{\int_{E_s}^{E_i} \delta(\sigma(E), i) dE}{E_{sup.} - E_{inf.}}$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \delta(\sigma(E), i) = 1 & \text{si } S_{i-1} \leq \sigma(E) < S_i \\ \quad \quad \quad = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

ce qui entraîne : $\sum_i p_i = 1$

Plusieurs définitions sont possibles pour σ_i : notamment valeur médiane de l'intervalle (S_{i-1}, S_i) , ou valeur moyenne définie par :

$$(2) \quad p_i \quad \sigma_i = \frac{\int_{E_s}^{E_i} \sigma(E) \delta(\sigma(E), i) dE}{E_{sup.} - E_{inf.}}$$

Il est évident que la table (p_i, σ_i) , $i = 1$ à N , caractérisera le comportement de $\sigma(E)$ dans le domaine $(E_{min.}, E_{max.})$, et ce d'autant mieux

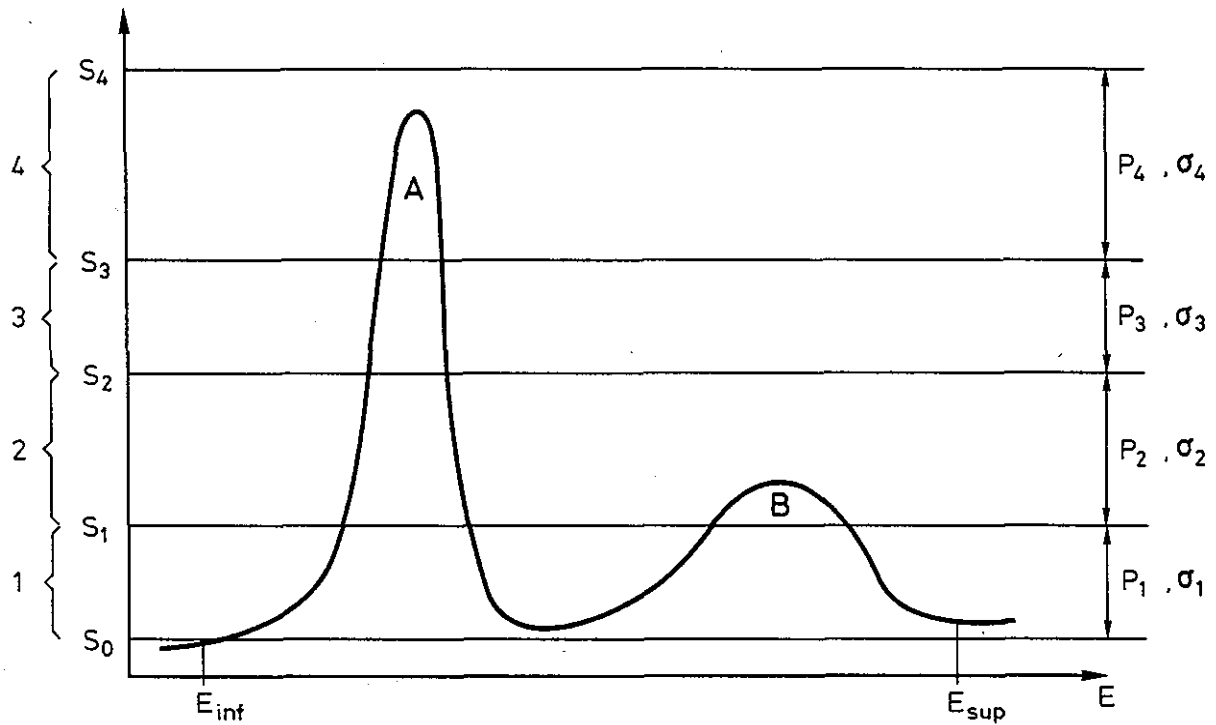
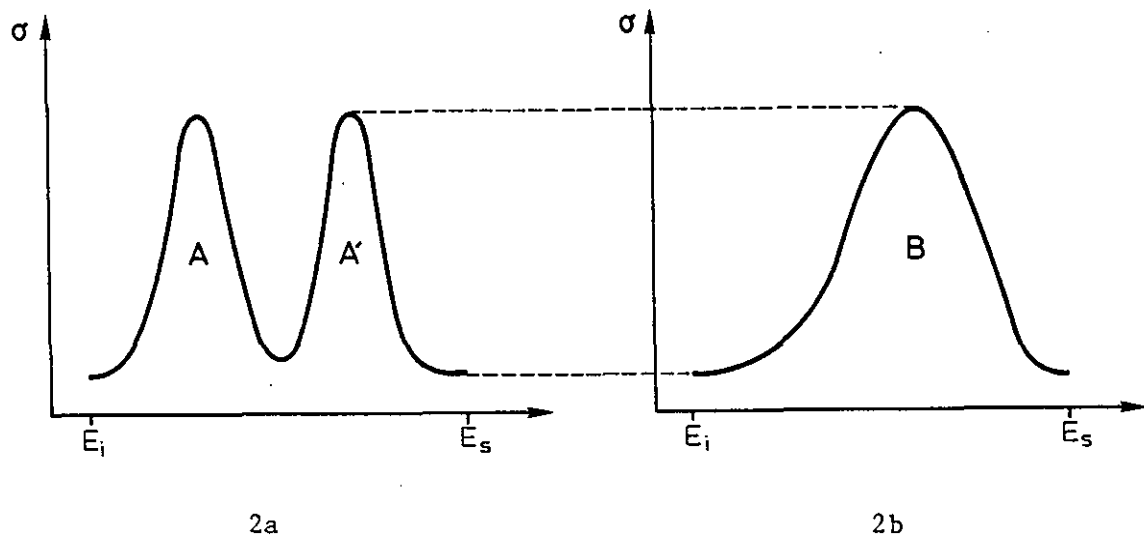


Figure 1 : Représentation de la discrétisation de deux résonances sur l'intervalle $(E_{\text{inf}}, E_{\text{sup}})$. La table ne changera pas si A et B sont permutées.



Figures 2 : Les deux résonances A et A' sont identiques. La résonance B, de largeur double (et de même forme que A et A'), donnera la même table de probabilité que l'ensemble A-A'.

que N sera grand. Il est aussi évident que l'information en énergie sera perdue : la table sera la même si les 2 résonances A et B de la figure 1 sont permutées. Qui plus est, les structures décrites par les figures 2a et 2b auront la même table de probabilité. D'où 2 conséquences :

- une table de probabilité ainsi définie implique l'hypothèse statistique, i.e. que le résultat cherché est peu sensible à une permutation des résonances dans l'intervalle ($E_{\text{inf.}}$, $E_{\text{sup.}}$) ; il n'en dépend que par les conséquences sur le recouvrement ;
- une telle table de probabilité est toujours associée à l'hypothèse "résonance étroite".

Ces conclusions resteront vraies dans tout ce qui suit.

La figure 3 représente la figure originale de Levitt : il prévoyait des tables d'ordre élevé (22 d'après la figure), les bornes des bandes étant en progression géométrique.

I.2 - Evolution de l'Ecole Américaine : Cette évolution est marquée par plusieurs articles de Levitt et Cullen. Nous citerons :

. en 1973-74, la conception de "tables multibandes équiprobables" par Cullen [Cu 74] (voir § IV) ; ces tables sont établies à partir des données décrivant la variation de σ effectif en fonction de la dilution. Mais les probabilités sont égales ou multiples d'une valeur de base (exemple d'une table de 4 pour le 239 Pu : $p_1 = p_2 = 1/3$; $p_3 = p_4 = 1/6$).

. en 1980 Cullen et Pomraning imposent la conservation de "moyennes" (voir § IV.2) : ils définissent une table de 2 par 4 moyennes :

$$(3) \quad \left\{ \begin{array}{l} - \text{normalisation } (p_1 + p_2 = 1) \\ - \int \sigma(E) \, dE \\ - \int \frac{1}{\sigma(E)} \, dE \\ - \int \frac{1}{(\sigma(E))^2} \, dE \end{array} \right.$$

Les poids ne sont alors plus égaux.

Tout en remarquant qu'il s'agit d'un "problème de moments classiques", ces auteurs ne vont pas au delà de la table de 2, gardant un système à probabilités définies a priori pour les ordres supérieurs.

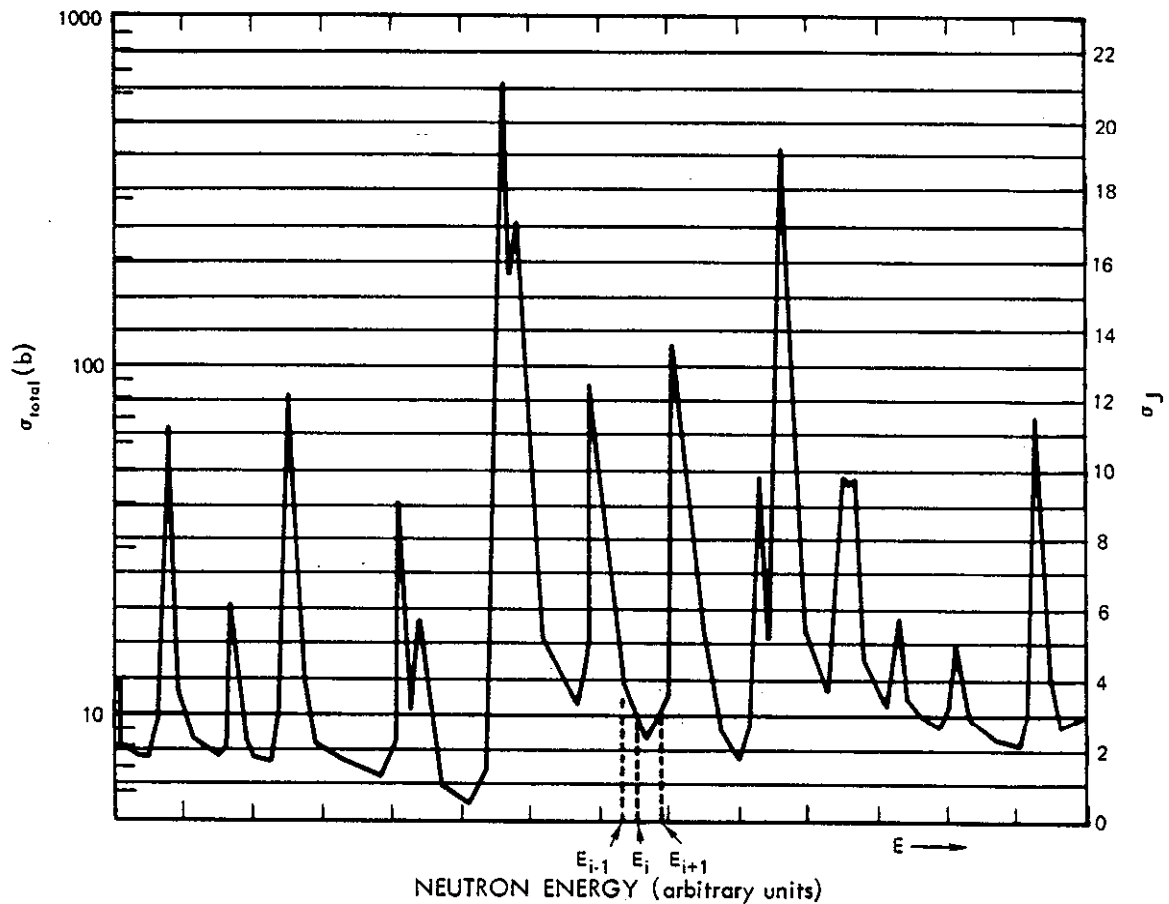


Figure 3 : Figure originale de L. LEVITT [Le 72]

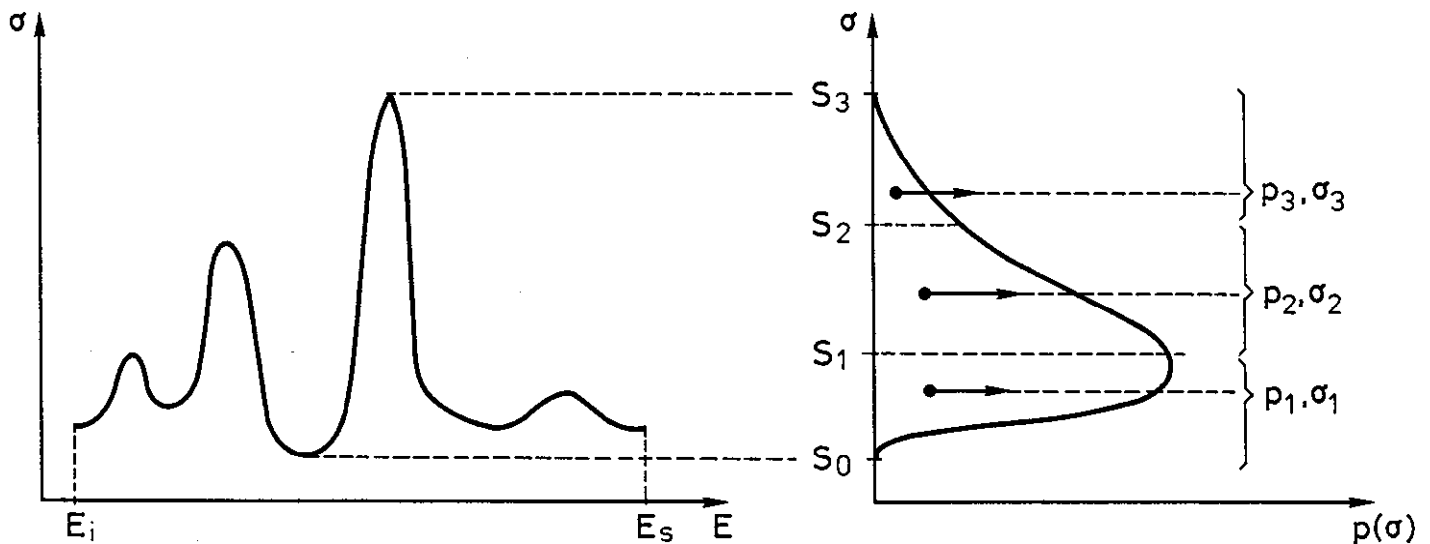


Figure 4 : La moyenne de $\sigma^n(E)$ sur (E_i, E_s) (intégrale de RIEMANN) est égale à l'intégrale de $\sigma^n p(\sigma)$ (intégrale de LEBESGUE) ; mais l'information en énergie est perdue.

Il est toujours possible de définir des seuils $S_1, S_2, \dots$ tels que les zones ainsi définies soient de surfaces égales à $p_1, p_2, \dots$ et comprennent chacune une valeur de σ_i (cf. II.3).

I.3 - L'Ecole Soviétique : Dès leur première proposition, les soviétiques ont accepté d'avoir à calculer aussi bien les p_i que les σ_i . Pour cela, ils partent des valeurs de la section effective, définies pour J valeurs de la dilution σ_{dj} :

$$(4) \quad \sigma_{\text{eff},x}(\sigma_{dj}) = \frac{\int_{\Delta E} \frac{\sigma_x(E)}{\sigma_t(E) + \sigma_{dj}} dE}{\int_{\Delta E} \frac{1}{\sigma_t(E) + \sigma_{dj}} dE}$$

x symbolisant une section partielle particulière.

En terme de T.P. cette relation s'écrit :

$$(5) \quad \sigma_{\text{eff},x}(\sigma_{dj}) = \frac{\sum_i \frac{p_i \sigma_{xi}}{\sigma_{ti} + \sigma_{dj}}}{\sum_i \frac{p_i}{\sigma_{ti} + \sigma_{dj}}}$$

La somme des sections partielles étant égale à la section totale :

$$(6) \quad \sigma_{\text{eff},t}(\sigma_{dj}) = \frac{\sum_i \frac{p_i \sigma_{ti}}{\sigma_{ti} + \sigma_{dj}}}{\sum_i \frac{p_i}{\sigma_{ti} + \sigma_{dj}}}$$

Le système 6 forme un ensemble de J équations à $2*N$ inconnues ($i = 1$ à N , $J \geq 2*N$) qui peut être résolu par une méthode itérative si $J = 2N$, ou par moindres carrés si $J > 2N$.

C'est cette méthode qui est utilisée par plusieurs équipes de physiciens de réacteur européens, à Cadarache notamment, [Go 71, Kh 72], sous le nom de "méthode de sous-groupes" : les J équations sont résolues par moindres carrés, d'où les (p_i, σ_{ti}) ; les systèmes (5) sont linéaires, d'où les σ_{xi} . Ces expressions permettent ensuite de calculer σ_{eff} pour tout σ_d .

Ainsi que l'ont souligné les soviétiques, l'ordre N nécessaire ne dépasse jamais 5.

I.4 - L'approche française : nous avons généralisé le problème aux moments

On sait qu'une distribution de probabilité $p(x)$ peut être définie de façon unique par la suite infinie - si elle existe - de ses moments :

$$(7) \quad \mathcal{M}_n = \int_D x^n p(x) dx \quad (*)$$

En particulier, une table de probabilité d'ordre N est définie par $2N$ valeurs de ses moments :

$$(8) \quad M_n = \sum_{i=1}^N p_i x_i^n$$

Cette table de probabilité est la somme de N fonctions de DIRAC $\delta(x-x_i)$ affectées des poids p_i .

Choix fondamental : nous convenons de définir une table de probabilité d'ordre N , devant décrire une distribution $p(x)$, en stipulant qu'elle décrit exactement $2N$ moments de $p(x)$:

$$(9) \quad M_n = \mathcal{M}_n \quad \text{pour } 2N \text{ valeur de } n$$

A priori, rien n'impose que les $2N$ valeurs de n forment une suite continue régulière ($\delta n_j = n_{j+1} - n_j = \text{constante}$) ; nous ferons ce choix, qui sera justifié en II. On aura, pour $\delta n = 1$:

$$(10) \quad M_n = \sum_{i=1}^N p_i x_i^n = \int_D x^n p(x) dx = \mathcal{M}_n \quad I \leq n \leq I + 2N - 1$$

I peut être négatif si les moments correspondants sont définis.

* Nota : Toute suite infinie de moments M_n , croissant moins vite que $(2n)!$ et satisfaisant les conditions de Hankel (cf. § II.4) définissent de façon unique une distribution de probabilité $p(x)$.

Cas des sections efficaces totales : la section efficace $\sigma_t(E)$ sur l'intervalle (E_1, E_2) peut être décrite par une distribution $p(\sigma)$ - en perdant, bien sûr, l'information en énergie. (Fig. 4). Cela revient à dire que l'on remplace une intégrale de Riemann (sur E) par une intégrale au sens de Lebesgue (sur $p(\sigma)$) :

$$(11) \quad \mathcal{M}_n = \frac{1}{\Delta E} \int_{\Delta E} \sigma_t^n(E) dE = \int_0^\infty \sigma_t^n p(\sigma_t) d\sigma_t$$

Etant donné que σ_t ne peut être ni infini ni nul, $\mathcal{M}_n$ sera défini quel que soit n , positif ou négatif.

Sauf stipulation contraire explicite, tout ce qui suit concerne les tables de probabilité établies par la méthode des moments.

II - CALCUL ET PROPRIETES DES TABLES DE PROBABILITE

II.1 - Résolution du système d'équations 10, définissant la table de probabilité

Considérons l'équation génératrice des moments :

$$(12) \quad \int_D \frac{p(x) x^I}{1 - zx} dx = \int_D p(x) x^I (1 + zx + z^2 x^2 + \dots) dx$$

(D : domaine de $p(x)$).

II.1.1 - Calculs pour $I = 0$: dans un but de clarté, nous exposerons d'abord les calculs pour $I = 0$: le jeu d'indices qu'impose $I \neq 0$ est alors supprimé, et les expressions sont plus faciles à lire. On a :

$$(13) \quad \left\{ \begin{aligned} F(z) &= \int_D \frac{p(x)}{1-zx} dx \\ &= \int_D p(x) (1 + z^1 x^1 + z^2 x^2 + \dots) dx \\ &= \mathcal{M}_0 + z \mathcal{M}_1 + z^2 \mathcal{M}_2 + \dots + z^{2N-1} \mathcal{M}_{2N-1} + \mathcal{R}(z^{2N}) \end{aligned} \right.$$

Les $2N$ premiers termes de $F(z)$ peuvent s'écrire sous la forme d'un approximant de PADE :

$$\begin{aligned}
 F(z) &= \frac{a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots + a_{N-1} z^{N-1}}{1 + b_1 z + b_2 z^2 + \dots + b_N z^N} + \mathcal{R}'(z^{2N}) \\
 (14) \quad &= \frac{P_{N-1}(z)}{Q_N(z)} + \mathcal{R}'(z^{2N})
 \end{aligned}$$

Les coefficients a_i , b_i seront donnés par la résolution du système de $2N$ équations :

$$\begin{aligned}
 (15-a) \quad N \text{ eq.} \quad & \begin{cases} a_0 = M_0 \\ a_1 = M_1 + M_0 b_1 \\ a_2 = M_2 + M_1 b_1 + M_0 b_2 \\ \vdots \\ a_{N-1} = M_{N-1} + M_{N-2} b_1 + \dots + M_0 b_{N-1} \end{cases} \\
 (15-b) \quad N \text{ eq.} \quad & \begin{cases} 0 = M_N + M_{N-1} b_1 + \dots + M_1 b_{N-1} + M_0 b_N \\ 0 = M_{N+1} + M_N b_1 + \dots + M_2 b_{N-1} + M_1 b_N \\ \vdots \\ 0 = M_{2N-1} + M_{2N-2} b_1 + \dots + M_{N-1} b_N \end{cases}
 \end{aligned}$$

La résolution du système linéaire des N dernières équations donnera les N valeurs de b_i qui, reportées dans le système des N premières équations, permettra le calcul des N valeurs de a_i . On peut calculer les racines z_i de $Q_N(z)$ (que nous supposerons toutes simples (*)), et décomposer la fraction $P_{N-1}(z)/Q_N(z)$ en pôles simples :

$$\begin{aligned}
 (16) \quad & \left\{ \begin{aligned} F(z) &= \frac{P_{N-1}(z)}{Q_N(z)} + \mathcal{R}'(z^{2N}) \\ &= \frac{P_{N-1}(z)}{\prod_{i=1}^N \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)} + \mathcal{R}'(z^{2N}) \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{w_i}{1 - \frac{z}{z_i}} + \mathcal{R}'(z^{2N}) \end{aligned} \right.
 \end{aligned}$$

* Nota : toutes les racines sont simples si $p(x)$, ou une partie de $p(x)$, est une fonction continue. On obtiendrait des racines multiples si on voulait décrire une somme de J fonctions de DIRAC par une table de probabilité d'ordre $N > J$.

Nous choisissons la table de probabilité (p_i, x_i) telle qu'elle décrive exactement les $2N$ moments considérés :

$$(17) \quad M_n = \sum_i p_i x_i^n = \mathcal{M}_n \quad 0 \leq n \leq 2N-1$$

On peut donc écrire :

$$(18) \quad \left\{ \begin{aligned} F(z) &= \sum_i p_i + z \sum_i p_i x_i + \dots + z^{2N-1} \sum_i p_i x_i^{2N-1} + R(z^{2N}) \\ &= \sum_i p_i (1 + z x_i + z^2 x_i^2 + \dots + z^{2N-1} x_i^{2N-1}) + R(z^{2N}) \\ &= \sum_i \frac{p_i}{1 - z x_i} + R'(z^{2N}) \end{aligned} \right.$$

Par identification de 16 et 18 (au reste près), on obtient :

$$(19) \quad \left\{ \begin{aligned} p_i &= w_i \\ x_i &= \frac{1}{z_i} \end{aligned} \right.$$

II.1.2 - Cas général ($I \neq 0$) : les équations 14 et 16 deviennent :

$$(20) \quad \left\{ \begin{aligned} F(z) &= \mathcal{M}_I + z \mathcal{M}_{I+1} + \dots + z^{2N-1} \mathcal{M}_{I+2N-1} + \mathcal{R}(z^{I+2N}) \\ &= \frac{P_{N-1}(z)}{Q_N(z)} + \mathcal{R}'(z^{2N}) \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{w_i}{1 - \frac{z}{z_i}} + \mathcal{R}'(z^{2N}) \end{aligned} \right.$$

alors que les équations 18 s'écrivent :

$$(21) \quad \left\{ \begin{aligned} F(z) &= \sum_i p_i x_i^I + z \sum_i p_i x_i^{I+1} + \dots + z^{2N-1} \sum_i p_i x_i^{I+2N-1} + R(z^{2N}) \\ &= \sum_i p_i x_i^I (1 + z x_i + z^2 x_i^2 + \dots + z^{2N-1} x_i^{2N-1}) + R(z^{2N}) \\ &= \sum_i \frac{p_i x_i^I}{1 - z_i x_i} + R'(z^{2N}) \end{aligned} \right.$$

Par identification on obtiendra :

$$(22) \quad \begin{cases} p_i = w_i / x_i^I \\ x_i = 1/z_i \end{cases}$$

Remarque : On peut toujours effectuer un changement de la fonction poids :

$$(23) \quad q(x) = p(x) x^I$$

On est alors ramené au cas $I = 0$. Toutes les propriétés mathématiques applicables à la suite positive des moments ($n = 0, 1, \dots$) est applicable aux moments de la fonction poids $q(x)$.

Moments à prendre en compte : La méthode de solution du système d'équations 10 suppose une suite tronquée mais continue des moments, définie par les équations 13 (si $I = 0$) ou 20 (cas général) : ce qui justifie que le choix exposé en I.4.

II.2 - Propriétés élémentaires. Cette méthode de résolution du système 10 permet de montrer immédiatement 2 propriétés simples :

II.2.1 - l'orthogonalité des dénominateurs Q . On peut calculer :

$$(24) \quad \left\{ \begin{aligned} \mathcal{J}_n &= \int_D p(x) x^n Q_N(x) dx \\ &= \int_D p(x) x^n \sum_{i=0}^N b_i x^i dx \\ &= \sum_{i=0}^N b_i \int_D p(x) x^{n+i} dx \\ &= \sum_{i=0}^N b_i \mathcal{M}_{n+i} \end{aligned} \right.$$

Si $I = 0$, d'après les équations 15.b, $\mathcal{J}_n = 0$ pour tout $n < N$: donc x^n est orthogonal à Q_N avec la fonction poids $p(x)$; en particulier :

$$(25) \quad \int_D p(x) Q_M(x) Q_N(x) dx = \delta_{NM} \mathcal{N}_N$$

$\mathcal{N}_N$ désignant une norme. Dans le cas général ($I = 0$), la condition d'orthogonalité de x^n et Q_N est vérifiée pour $I \leq n \leq I + N$, et 25 devient :

$$(26) \quad \left\{ \begin{array}{l} \int_D p(x) Q_{J,M}(x) Q_{I,N}(x) dx = 0 \\ \text{pour } \begin{cases} I \leq J \\ J + M < I + N \end{cases} \end{array} \right.$$

II.2.2 - les tables de probabilité en tant que méthode d'intégration. Soit à calculer l'intégrale:

$$(27) \quad \mathcal{I} = \int_D p(x) f(x) dx$$

sur un domaine D . S'il existe un développement formel de $f(x)$ sur D , on peut écrire :

$$(28) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{I} = \int_D p(x) \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j x^j dx \\ = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j \int_D p(x) x^j dx \\ = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j \mathcal{M}_j \end{array} \right.$$

Si on établit une table de probabilité d'après les $2N$ premiers moments :

$$(29) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{I} = \sum_{j=0}^{2N-1} \varphi_j \sum_{i=1}^N p_i x_i^j + \mathcal{R}(x^{2N}) \\ = \sum_{i=1}^N p_i \sum_{j=0}^{2N-1} \varphi_j x_i^j + \mathcal{R}(x^{2N}) \end{array} \right.$$

Si $x_i \in D$, le même développement formel que précédemment permet d'écrire :

$$(30) \quad \mathcal{I} = \sum_{i=1}^N p_i f(x_i) + \mathcal{R}'(x^{2N})$$

L'erreur est due à la troncature d'un développement dont la valeur est estimée par un approximant de PADE.

En fait cette méthode d'intégration n'est autre que la méthode de quadrature de Gauss-Jacobi [Sz 59] que nous voulons utiliser :

- en prenant en compte les moments négatifs (lorsqu'ils existent), ce qui revient à changer $p(x)$ en $q(x) = p(x)/x^I$ (cf. page 11),
- en acceptant que $p(x)$ puisse être négatif, ce qui impose des restrictions insuffisamment connues.

II.3 - La théorie mathématique des polynômes orthogonaux et de la quadrature de GAUSS

Le traitement du transport implique le calcul d'intégrales ; en introduisant les tables de probabilité, Soviétiques et Américains ont mis en oeuvre une méthode approchée, plus ou moins empirique, de calcul de ces intégrales. En définissant les T.P. par les moments, nous nous basons sur une théorie mathématique bien définie, celle reliant les polynômes orthogonaux, les approximants de PADE et la quadrature de GAUSS [Sz 59, Ak 65, Ba 65, Ba 75, Ba 80, Br 80, Dr 83]. Nous en donnons quelques propriétés ci-dessous.

Soit la suite des moments positifs de $p(x)$, et les T.P. définies par (7-10).

Cohérence des moments : ce point est traité en II.4.

Domaine des x_i : la théorie des polynômes orthogonaux [Sz 59] établit que :

- les racines x_i de Q_N ($i = 1$ à N) sont toutes réelles et comprises dans le support D de $p(x)$;
- chacune des N racines de Q_N est à l'intérieur de chacun des N intervalles définis par les $N+1$ racines de Q_{N+1} .

Positivité des p_i : lorsque $p(x)$ est positif (condition qui ne sera pas toujours observée dans nos applications), les p_i sont positifs [Sz 59] ; ils sont parfois appelés "nombres de Christoffel".

Séparation des "bandes" : (théorème de séparation de Tchebychev-Markov - Stieltjes [Sz 59]). Nous avons la suite des probabilités $p_1, p_2, \dots, p_N$. Il existe des nombres y_i tels que :

$$(31) \quad \left\{ \begin{array}{l} \int_A^{y_1} p(x) dx = p_1 \\ \int_{y_1}^{y_2} p(x) dx = p_2 \\ \dots\dots\dots \\ \int_{y_{N-1}}^B p(x) dx = p_N \end{array} \right.$$

A et B désignant les bornes du domaine D. Cette suite de nombres $y_1, y_2, \dots, y_{N-1}$ est unique si $p(x) > 0$ sur D. On a alors :

$$(32) \quad A < x_1 < y_1 < x_2 < y_2 \dots\dots\dots x_{N-1} < y_{N-1} < x_N < B$$

Application : Reprenons l'image "physique" de Levitt. On peut découper $p(x)$ en N bandes d'abscisses $y_1, y_2, \dots, y_{N-1}$; chaque bande sera caractérisée par un poids :

$$(33) \quad p_i = \int_{y_{i-1}}^{y_i} p(x) dx$$

et par une abscisse x_i comprise entre y_{i-1} et y_i : les tables de probabilités ainsi définies seront donc très "physiques" (fig. 4).

Séparation des "bandes" d'ordre N et d'ordre N+1 (théorème de séparation de Stieltjes [Sz 59]) ; soit, pour N, la suite des y_i , définis ci-dessus ; nous les indiquerons N :

$$y_{1,N}, y_{2,N}, y_{3,N}, \dots y_{N,N}$$

Pour la table d'ordre N + 1, nous aurons la suite :

$$y_{1,N+1}, y_{2,N+1}, \dots y_{N+1,N+1}$$

Les $y_{i,N}$ et les $y_{j,N+1}$ sont alternés comme les $x_{i,N}$ et les $x_{j,N+1}$, i.e :

$$(34) \quad y_{1,N+1} < y_{1,N} < y_{2,N+1} < y_{2,N} < \dots < y_{N,N+1} < y_{N,N} < y_{N+1,N+1}$$

Convergences de la quadrature : il y a convergence pour $p(x) > 0$ si l'intégrale existe [Sz 59, 15-2-3] ; la quadrature est stable (Br 80). De plus, on "peut montrer que la formule de quadrature de GAUSS est optimale dans un certain sens" (Br 80, p. 63).

II.4 - Cohérence des moments.

Il est toujours possible de résoudre le système 10 par la méthode exposée en II.1. Mais il peut y avoir des problèmes numériques.

II.4.1 - Théorie mathématique : le problème aux moments de Stieltjes a une solution si la suite des moments donnés satisfait certaines conditions, telles que :

$$(35) \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=0}^n (-1)^i c_n^i \mathcal{M}_{i+k} \geq 0 \\ \Delta(k,n) > 0 \end{array} \right\} \quad (k,n = 0,1,2,\dots)$$

avec Δ (déterminant de Hankel) :

$$(36) \quad \Delta_{k,n} = \begin{vmatrix} \mathcal{M}_k & \mathcal{M}_{k+1} & \mathcal{M}_{k+2} & \dots & \mathcal{M}_{k+n} \\ \mathcal{M}_{k+1} & \mathcal{M}_{k+2} & \dots & \dots & \mathcal{M}_{k+n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathcal{M}_{k+n} & \mathcal{M}_{k+n+1} & \dots & \dots & \mathcal{M}_{k+2n} \end{vmatrix}$$

Ces conditions peuvent être très astreignantes. Elles seront toujours vérifiées pour des moments calculés à partir de $p(x)$ avec une bonne précision numérique. Nous avons vérifié numériquement l'importance de cette très bonne cohérence entre les moments.

II.4.2 - Sensibilité des T.P. à la cohérence des moments. La connaissance des N premiers moments (0 à N-1) permet de donner un encadrement, très étroit, du moment d'ordre N. A l'inverse, qu'arrive-t'il si on fait varier celui-ci ? Nous donnons un exemple pour illustrer pratiquement cette sensibilité.

Soit la table de probabilité d'ordre 6 :

a = (0,72, 0,10, 0,06, 0,05, 0,04, 0,03)

x = (30., 70., 200., 350., 450., 600.)

qui constitue une exemple d'une table de probabilité de section efficace. Qu'arrive-t-il si on perturbe légèrement les moments du 10 ou 11ème ordre ? les résultats de cet effet sont donnés par les courbes des figures 5 et 6.

III - LA METHODE EQUIPROBABLE DES MOMENTS, OU METHODE DE TCHEBYCHEV

La définition d'une table de probabilité à partir des moments (positifs ou négatifs) est très satisfaisante parce qu'elle repose sur des propriétés mathématiques fructueuses et bien établies.

On peut chercher d'autres types de tables. En particulier, les tables "équiprobables" semblent présenter des avantages : on conçoit qu'elles seront moins précises, mais elles devraient permettre plus facilement des interpolations : si, par exemple, la température d'un milieu varie, des tables équiprobables d'ordre N donneront le même poids constant $1/N$ à chacun des sous-groupes, et seul σ_i variera. La méthode de Tchebychev est un cas particulier de la méthode équiprobable : les x_i sont donnés par un système de N équations aux moments, les p_i étant égaux ($p_i = 1/N$) :

$$(37) \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^n = \mathcal{M}_n \quad n = 1 \text{ à } N$$

Les x_i sont les racines d'un polynôme de degré N :

$$(38) \quad \prod_{i=1}^N (x-x_i) = x^N - x^{N-1} s_1 + x^{N-2} s_2 - x^{N-3} s_3 + \dots = 0$$

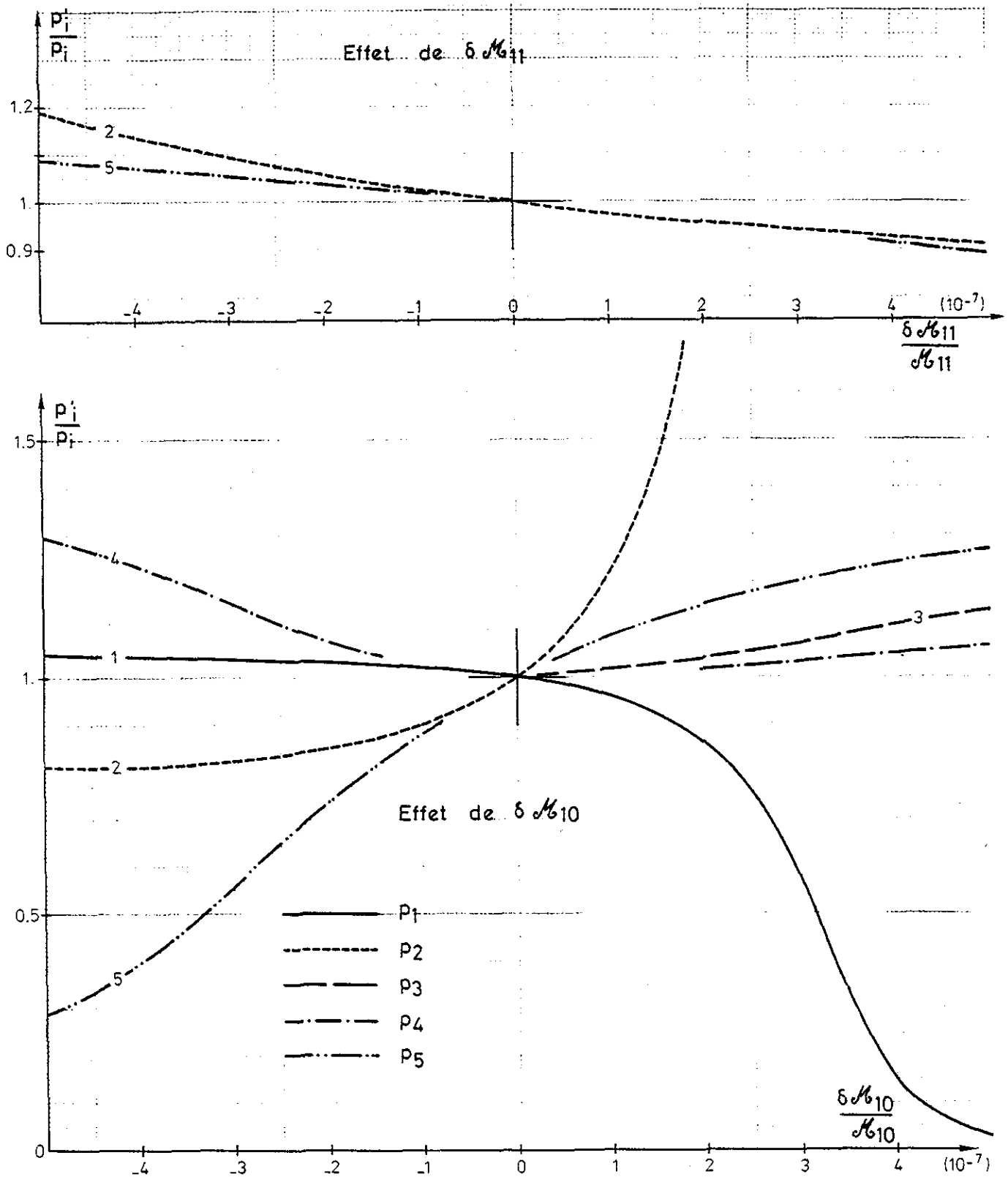


Figure 5 : Cas d'une table d'ordre 6 définie par ses moments positifs.

Effet sur les probabilités d'une perturbation relative de quelques 10^{-7} sur les moments du 10^{ème} ou du 11^{ème} ordre.

La courbe n'est pas tracée lorsque la perturbation est $< 2\%$.

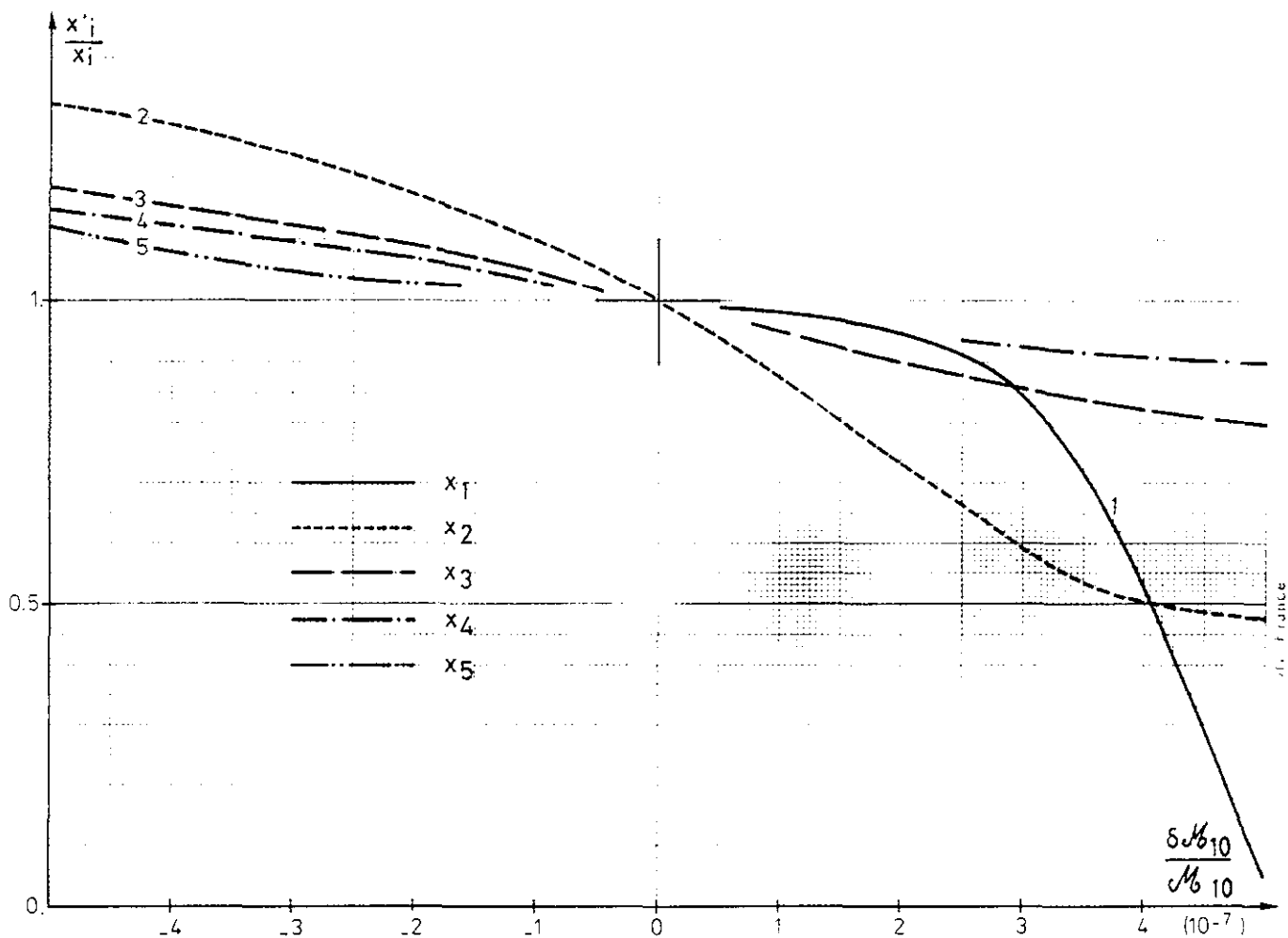
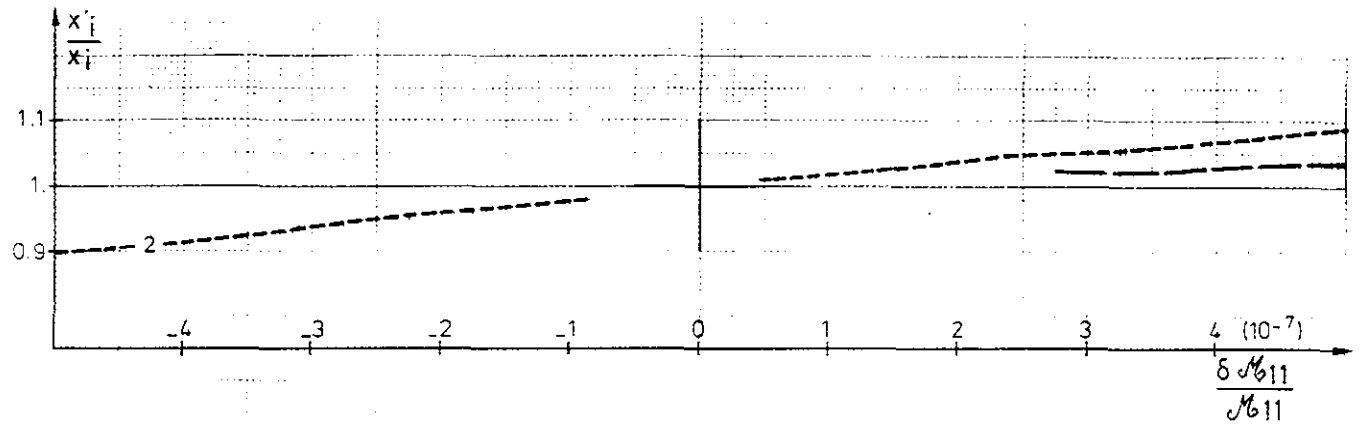


Figure 6 : Cas d'une table d'ordre 6 définie par ses moments positifs.

Effet sur les abscisses d'une perturbation relative de quelques 10^{-7} sur les moments du 10^{ème} et du 11^{ème} ordre.

La courbe n'est pas tracée lorsque la perturbation est $< 2\%$.

avec :

$$(39) \quad \left\{ \begin{array}{l} S_1 = \sum_i x_i = N \mathcal{M}_1 \\ 2S_2 = \sum_i \sum_{j \neq i} x_i x_j = \left(\sum_i x_i \right)^2 - \sum_i x_i^2 = (N \mathcal{M}_1)^2 - N \mathcal{M}_2 \\ 6S_3 = \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} x_i x_j x_k = \left(\sum_i x_i \right)^3 - 3 \sum_i x_i^2 \left(\sum_i x_i \right) - \sum_i x_i^3 \\ \quad = (N \mathcal{M}_1)^3 - 3 N^2 \mathcal{M}_2 \mathcal{M}_1 + 2N \mathcal{M}_3 \end{array} \right.$$

.....

Par exemple, pour :

$$(40) \quad \left\{ \begin{array}{l} p(x) = e^{-x} \quad 0 \leq x < \infty \\ \mathcal{M}_0, \mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2, \dots, \mathcal{M}_n, \dots = 1., 1., 2., \dots, n!, \dots \end{array} \right.$$

On obtient :

- table de 2 : $S_1 = 2$ $S_2 = 0$ d'où la table : $p_i = \frac{1}{2}$, $\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 2 \end{cases}$

- table de 3 : $S_1 = 3$ $S_2 = 3/2$ $S_3 = 3/2$

d'où la table :

$$p_i = \frac{1}{3}, \quad \begin{cases} x_1 = 2.647 \ 426 \ 657 \\ x_2, x_3 = \frac{0.352 \ 573 \ 343 + i \ 1.463 \ 572 \ 265}{2} \end{cases}$$

On constate donc qu'une table de 3 n'est pas "physique". A l'ordre 4, une des racines est réelle négative.

Cet aspect non "physique" des tables de Tchebychev est un fait connu, se produisant en général pour des ordres plus élevés que dans le cas de la loi exponentielle : pour $p(x) = 1$ sur $(-1, 1)$, la non-cohérence apparaît à l'ordre 8 [Bo 55, Re 84].

Nous pensons que cette méthode est à rejeter car on ne peut rien dire a priori sur les racines x_i . De plus, même si elle était possible, elle impliquerait des ordres plus élevés que ceux de nos T.P., et donc davantage de sous-groupes en neutronique.

IV - LES EXEMPLES DE CULLEN

Pour montrer l'intérêt de la description d'une section efficace par une table de probabilité, D.E Cullen pose des problèmes théoriques simples qui peuvent être résolus exactement parce qu'il suppose connaître la loi analytique de $p(\Sigma)$. Il montre que la méthode des tables de probabilité, applicable quelle que soit $p(\Sigma)$, permet d'obtenir le résultat avec une bonne précision.

IV.1 - Le premier exemple [Cu 74]. D.E Cullen considère un flux de neutrons incidents perpendiculairement à la surface d'un milieu homogène infini, purement absorbant. (i.e. $\Sigma = \Sigma_t = \Sigma_a$). Il suppose que la section efficace est distribuée suivant la loi :

$$(41) \quad \begin{cases} p(\Sigma) = 0,15 - 0,006 (\Sigma-10)^2 & \text{pour } 5 \leq \Sigma \leq 15 \\ = 0 & \text{autrement} \end{cases}$$

Puisqu'il n'y a pas de diffusion, il n'est pas nécessaire de connaître la loi $\Sigma = f(E)$: toute loi $f(E)$ reproduisant la distribution (41) de Σ est valide.

La méthode des bandes équiprobables : D.E Cullen calcule le flux dans le modèle à 1 groupe, et dans plusieurs hypothèses multibandes ($n = 2, 3, 5, 10$). Il conclut à une nette amélioration apportée par la solution multibande.

Nous avons refait ses calculs, retrouvons ses résultats. La décomposition en bandes équiprobables est donnée par le tableau 1 pour $n = 1, 3, 4$. Les résultats sont donnés par la figure 7.

Tableau 1 : tables de probabilités établies selon la méthode des bandes équiprobables (EP) ou selon la méthode des moments (MT).

Méthode équiprobable			Méthode des moments		
Ordre	Table		Ordre	Table	
	P_i	Σ_i		P_i	Σ_i
2	0.5	10.+1.875	2	0.5	10.+ 2.236 068
3	1/3	10.	3	16/30	10.
		10.+ 2.532 357		7/30	10.+ 3.273 268
5	1/5	10.+ 1.377 955	4	0.382 288	10.+ 3.826 158
		10.+ 3.142 378		0.117 712	10.+ 3.826 158
10	1/10	10.+ 0.334 333	5	0.365 714	10.
		10.+ 1.015 610		0.252 630	10.+ 1.234 424
		10.+ 1.740 300		0.064 513	10.+ 4.151 119
		10.+ 2.565 594			
		10.+ 3.719 162			

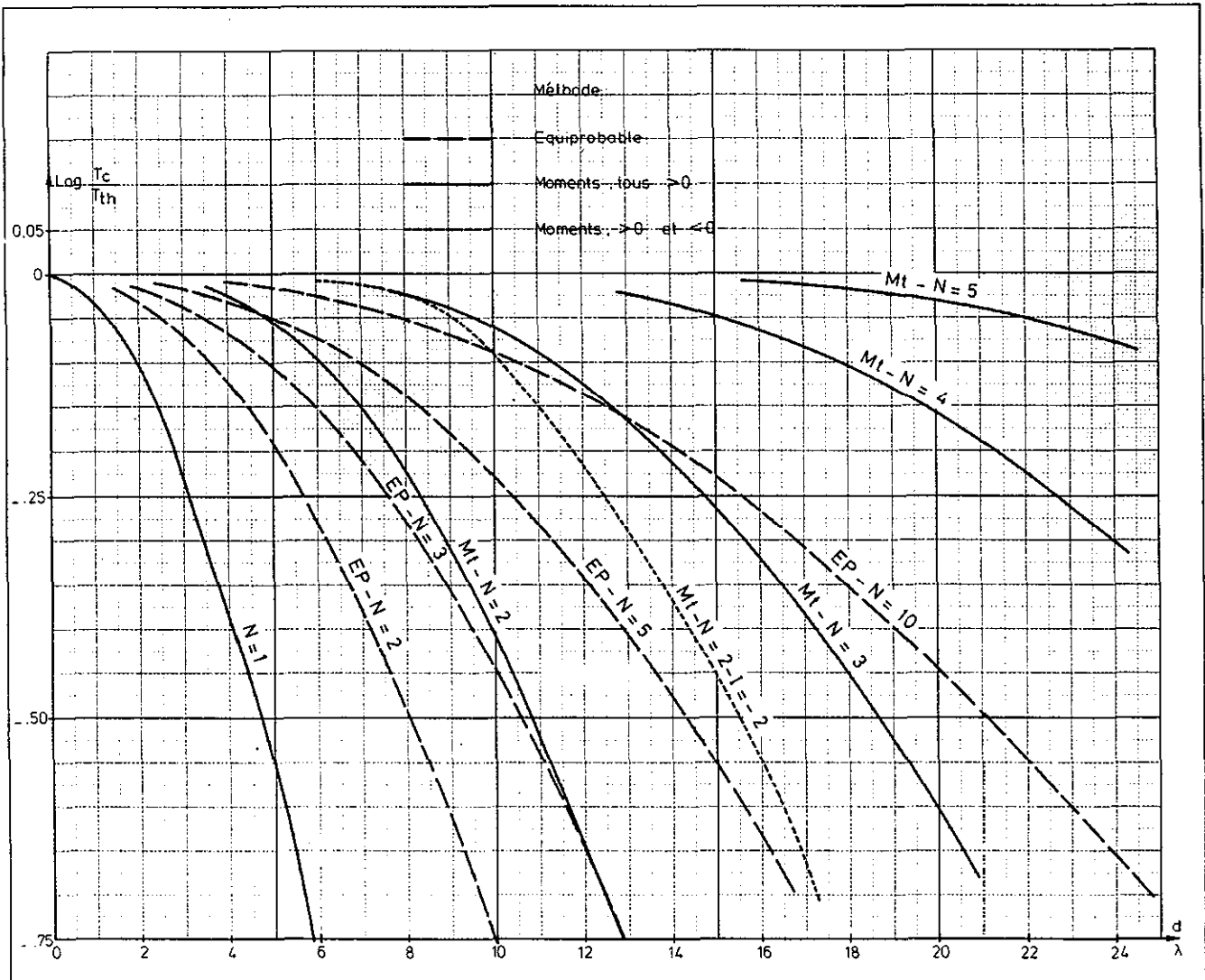


Figure 7 : Exemple de Cullen - Rapport de la transmission calculée par des tables de probabilité, T_c , à la transmission théorique exacte, T_{th} , calculée analytiquement ; d est la pénétration exprimée en libre parcours.

La méthode des moments : Nous avons refait les calculs de Cullen avec des tables de probabilité définies par la méthode des moments. Il en résulte, bien sûr, d'autres valeurs de p_i et Σ_i (voir tableau 1). Mais il en résulte surtout une très importante amélioration de la précision (voir figure 7). Par exemple : pour 10 libres parcours, et $N = 5$ (table d'ordre 5), l'erreur sur le flux est de 23% avec les valeurs EP, et de 0,1% avec les valeurs MT.

Les courbes en traits pleins de la figure correspondant à des T.P. décrivant les moments positifs. Il apparaît qu'une table de 3 est à peu près équivalente à une table équiprobable de 10. Mais on peut aussi faire intervenir les moments négatifs : l'amélioration est encore plus spectaculaire. Par exemple, la courbe en pointillés de la figure 7 correspond à une T.P. d'ordre 2, moments -2 à 1 ; elle correspond à peu près à une table E.P. de 7 ou 8.

La figure 8 illustre le mécanisme : les moments négatifs induisent des oscillations de très faible amplitude de $\log (T_c/T_{th})$ autour de 0.

IV.2 - Le second exemple de Cullen [Cu 80]. En 1980, Cullen et Pomraning appliquèrent la "méthode multibande" à la transmission d'un rayonnement. Ils prennent là aussi un modèle analytique simple de la probabilité de section efficace :

$$(42) \quad p(\Sigma) = \frac{\Sigma - 0.1}{9.9} \quad \text{pour } 0,1 \Sigma \leq \Sigma \leq 10$$

et ils peuvent calculer la transmission exacte en fonction de l'épaisseur.

Mais ils ne travaillent plus avec la méthode "équiprobable" : ils utilisent une méthode multibande qui, à l'ordre 2, décrit $\langle \Sigma \rangle$, $\langle \frac{1}{\Sigma} \rangle$ et $\langle \frac{1}{\Sigma^2} \rangle$: c'est la méthode des moments.

Les résultats sont représentés par la figure 9.

V - CHOIX DE LA TABLE DE PROBABILITE

Une T.P. est définie par son ordre N , et par l'ordre I du moment initial. Il est naturel de penser que les calculs effectués avec une T.P. seront d'autant plus précis que N sera élevé ; mais qu'en est-il de l'influence de I ?

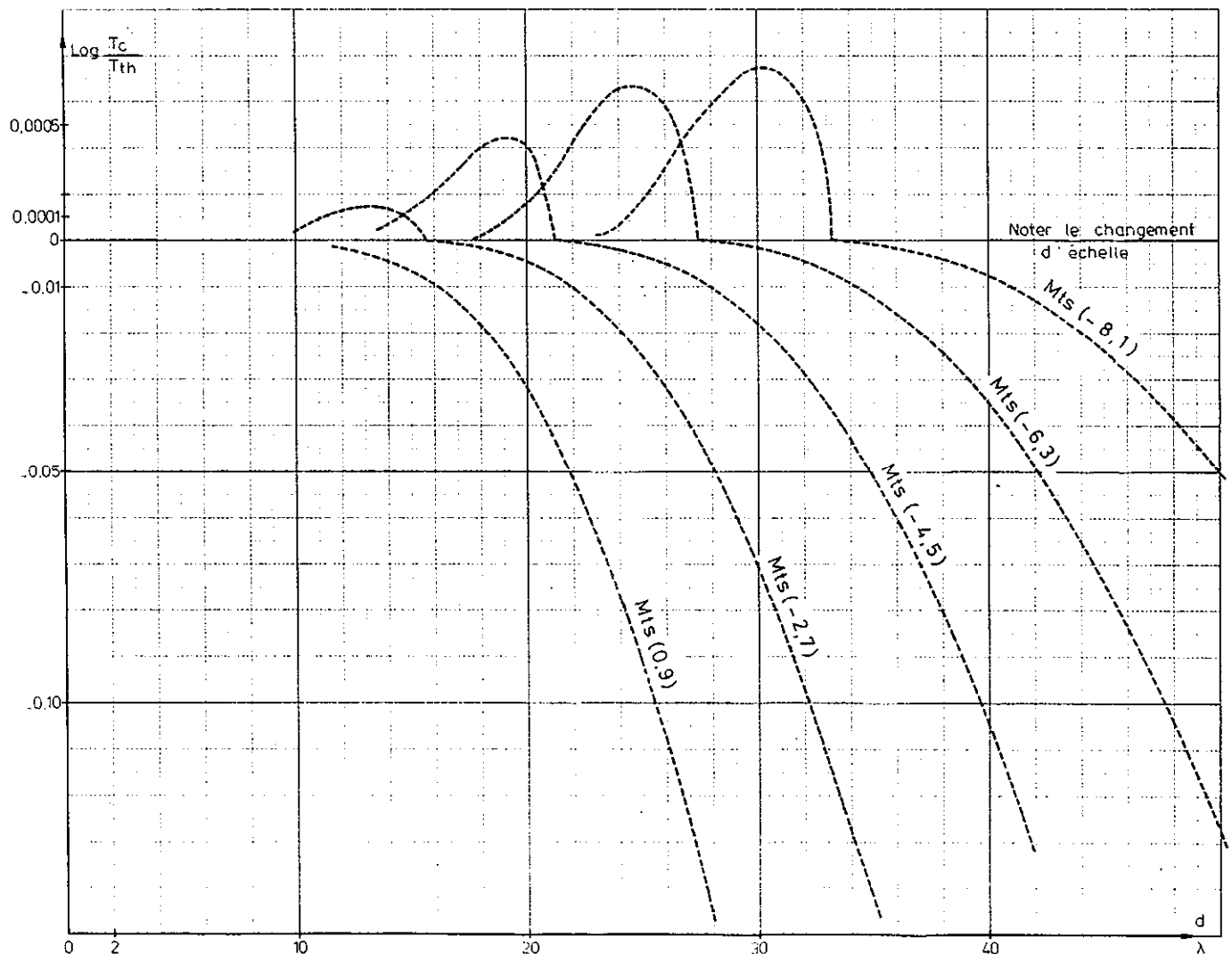


Figure 8 : Exemple de Cullen - Comme pour la figure précédente, rapport de la transmission calculée T_c à la transmission théorique exacte T_{th} en fonction de la pénétration d exprimée en libre parcours. Les résultats présentés concernent une table de 5, selon les moments pris en compte : de (0 à 9) à (-8 à 1). Noter que l'échelle pour les valeurs positives de $\text{Log } T_c/T_{th}$ est 50 fois plus dilatée que pour les valeurs négatives. Il apparaît des oscillations : seule la plus grande (la dernière) est représentée (pour la table (-8 à 1), il y a des maxima pour $d = 2, 6, 14$ et 30).

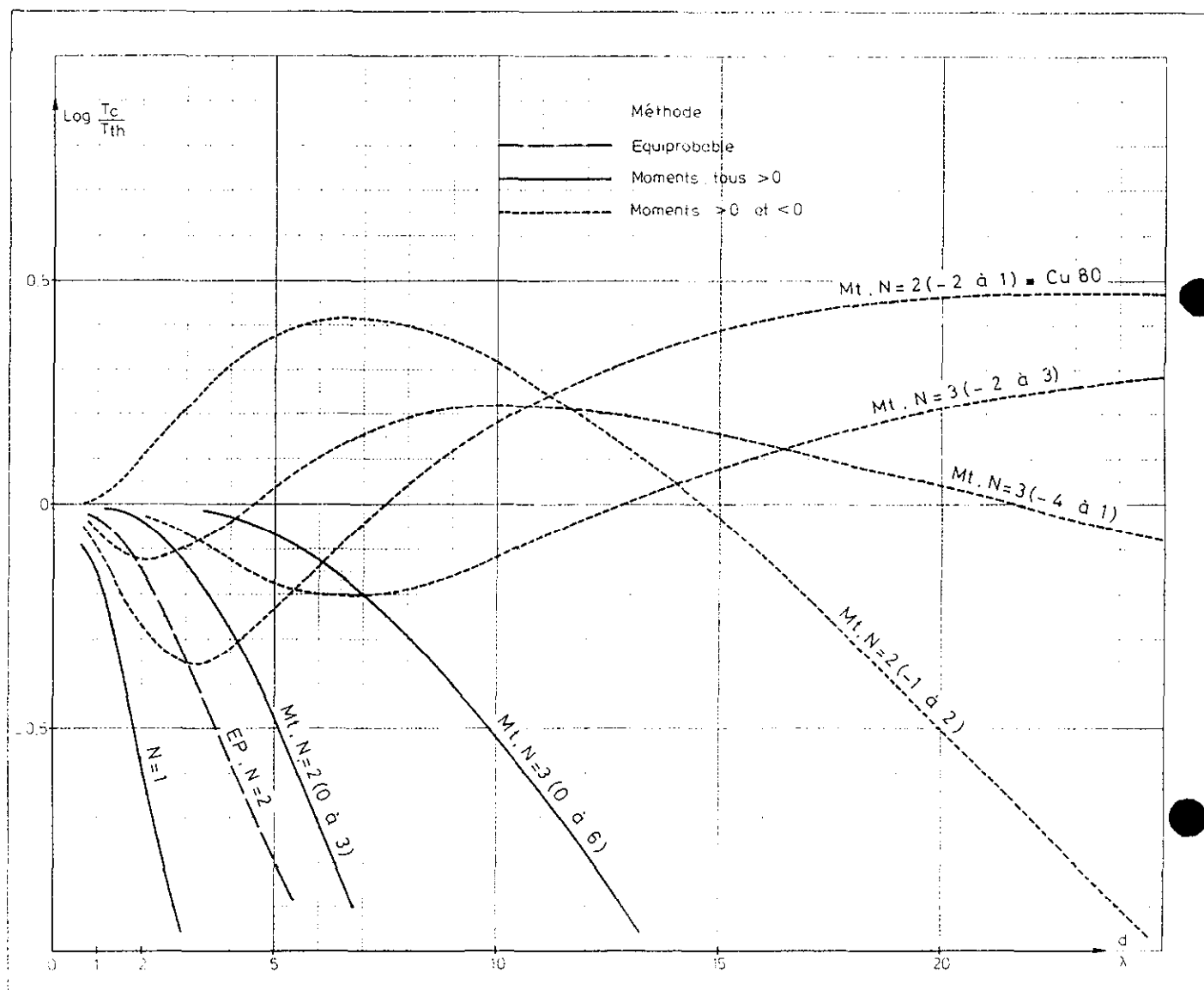


Figure 9 : Second exemple de CULLEN - Rapport de la transmission calculée à la transmission exacte en fonction de l'épaisseur. L'importance de la prise en compte des moments négatifs est encore illustrée par cette figure. La T.P. établie à partir des moments pour $N = 2$ (moments d'ordre -2 à 1) est strictement identique à la table multibande d'ordre 2 de CULLEN et POMRANING (Cu 80).

Le traitement des exemples de Cullen nous a donné une première réponse : la très grande importance des moments négatifs ; la réponse paraîtrait même paradoxale : ne prendre en compte que des moments négatifs.

Pour étudier cet effet, nous avons effectué des calculs dans un cas plus physique : celui du ^{238}U , de 4250 à 4750 eV; avec les paramètres moyens de ENDF-B-4 :

$$R = 9.184 \text{ fm} \quad \overline{D}_{l=0} = 19.98 \text{ eV} \quad S_0 = 1.05 \cdot 10^{-4}$$

avec les résonances $l = 0$ seulement. Afin de bien déterminer les effets, nous avons effectué les calculs à 3 températures :

$$T = 0 \text{ K (non réaliste, mais effets renforcés)}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

$$T = 1500 \text{ K}$$

Les résultats sont représentés par les figures 10. Ils montrent l'importance des moments d'ordre négatif lorsque σ_d est petit, des moments positifs lorsque σ_d est grand. En pratique normale, nous prendrons :

$$I = 1-N$$

qui paraît un compromis réaliste (et simple). En particulier, les T.P., données fondamentales caractérisant un noyau (Z,A) à une énergie E (ou dans une gamme d'énergie E_1, E_2) et à une température T, devront être stockées pour un ordre N élevé et avec $I = 1-N$, étant entendu que l'utilisateur pourra réduire cet ordre à $N' < N$, et, si justifié, prendre $I' \neq 1-N'$.

VI - LES TABLES DE PROBABILITES A PLUSIEURS VARIABLES

Le succès obtenu en définissant les tables de probabilités à partir des moments réside dans le fait que :

- approximaants de PADE (ou fractions continues),
- polynômes orthogonaux,
- intégration par la méthode de GAUSS

sont liés et définis sans ambiguïté dans le cas à une variable.

Il n'en est pas de même dans le cas à plusieurs variables, dont nous avons besoin tant pour prendre en compte les sections efficaces partielles, que pour traiter le problème neutronique à plusieurs dimensions.

Figures 10 A, B, C : importance des moments négatifs, cas du ^{238}U de 4250 à 4750 eV, résonances $\ell = 0$ seulement : erreur relative sur $\sigma_{t,\text{eff}}$ calculée par des tables de probabilité pour :

- . 3 températures (0 K : fig. A, 300 K : fig. B, 1500 K : fig. C);
- . 3 dilutions (1 barn : traits pleins, 20 barns : grands tirets, 500 barns : petits tirets) ;
- . 3 ordres ($N = 3, 5$ et 7).

L'erreur relative ($\varepsilon_r = \sigma_{\text{T.P.}} / \sigma_{\text{exact}} - 1$.) est portée en fonction de I , valeur inférieure des moments pris en compte ; puisque les moments d'ordre 0 et 1 sont toujours pris en compte :

$$2 - 2N \leq I \leq 0$$

On constate que les moments d'ordres négatifs sont importants lorsque σ_d est petit ; que ce sont ceux d'ordre positif qui comptent lorsque σ_d est grand. Ceci est vrai pour toute température, étant entendu que la précision à (N, I) données s'améliore lorsque T croît.

L'erreur devient très petite pour $\sigma_d \rightarrow \infty$ (puisque $\sigma_{t,\text{eff}} \rightarrow \langle \sigma_t \rangle$, moment du premier ordre exactement décrit par la T.P.).

Pour l'établissement des tables de probabilité et leur entrée en bibliothèque de données, nous recommandons l'option normale :

$$I = 1 - N$$

étant entendu que, selon l'application (σ_d grand ou petit), l'utilisateur pourra réduire l'ordre de la table ($N' < N$) et choisir I' favorisant les moments négatifs (si σ_d est petit) ou positifs (si σ_d est grand).

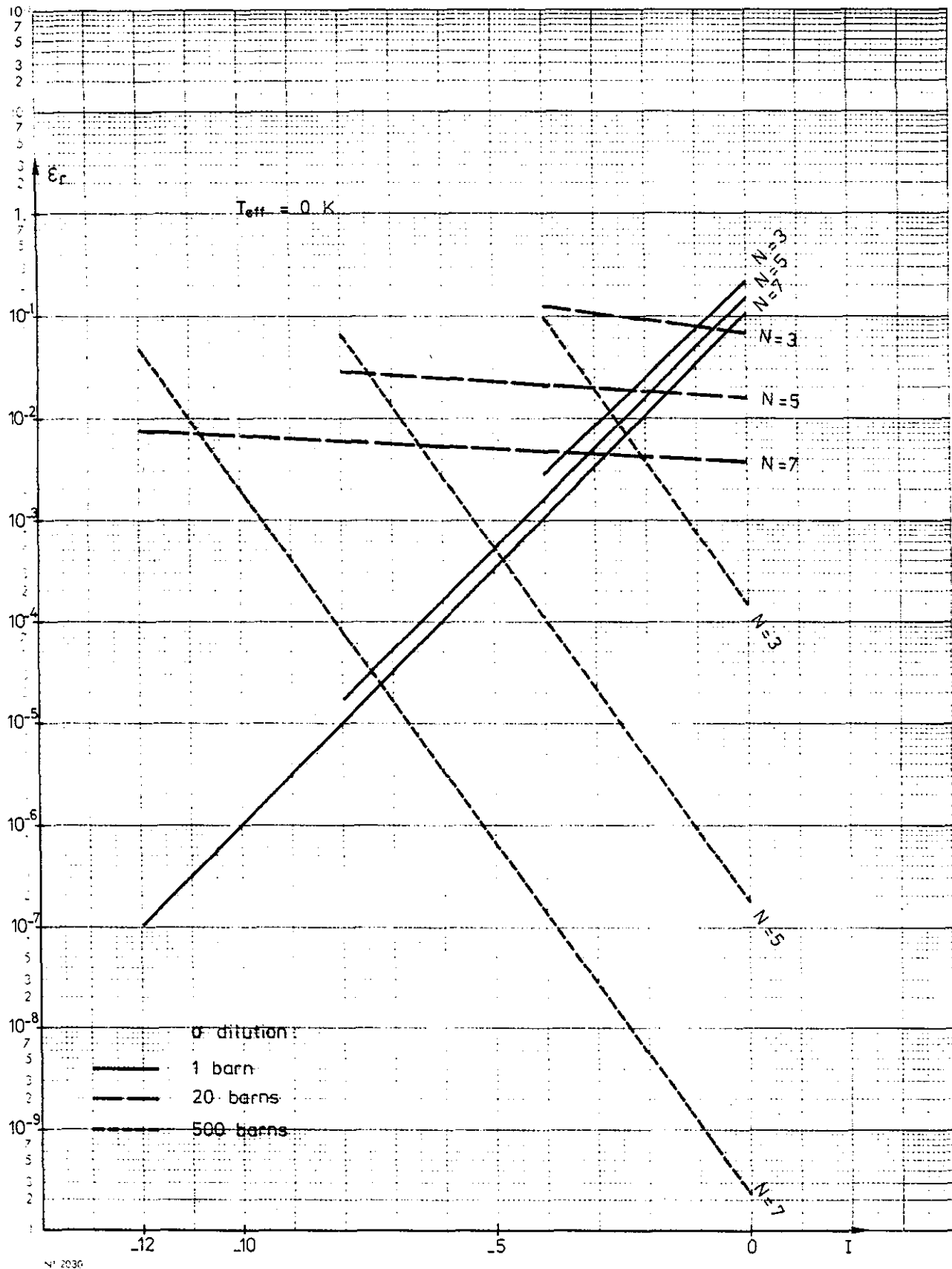


Figure 10-A

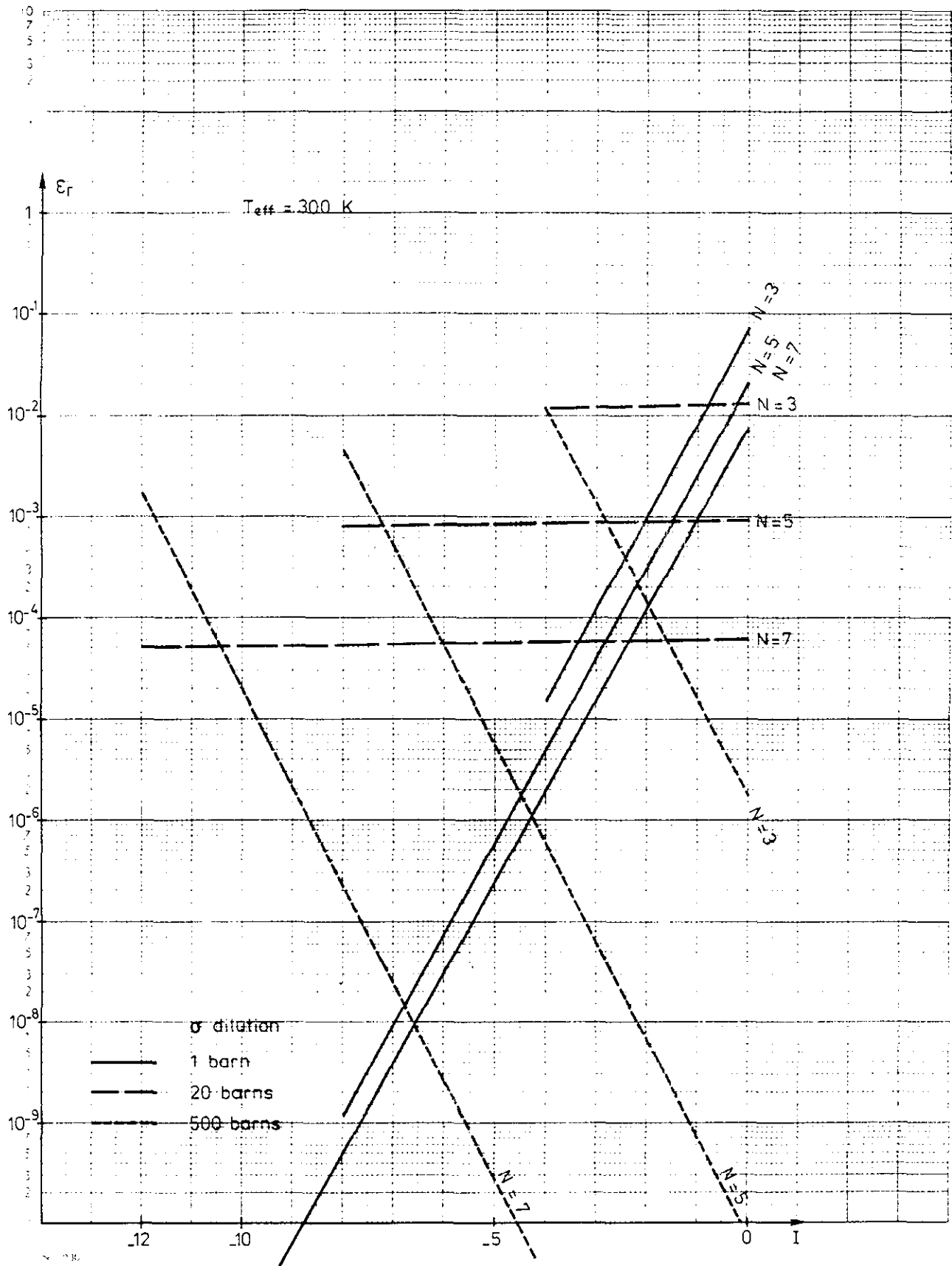


Figure 10-B

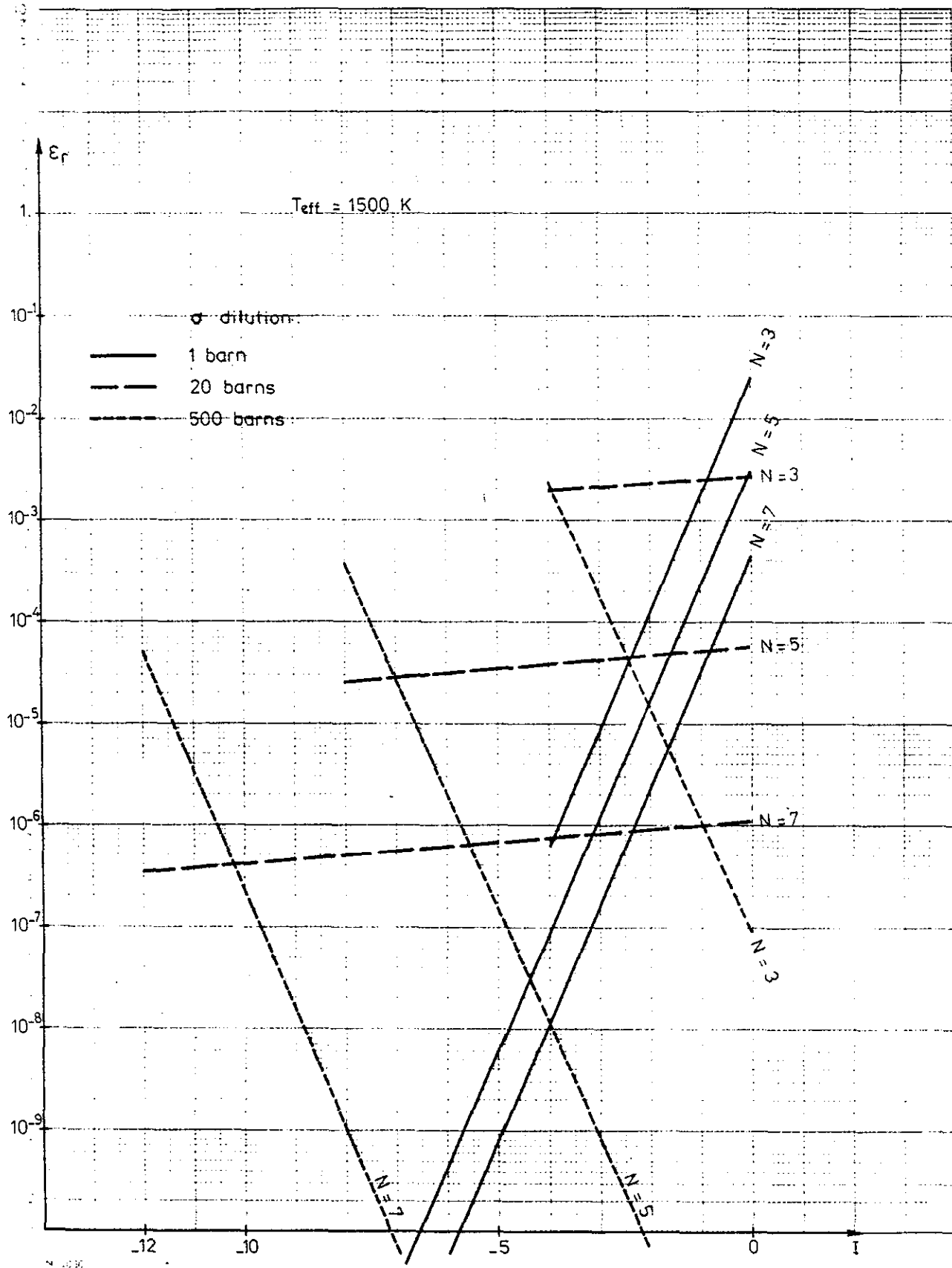


Figure 10-C

VI.1 - Les approximants de PADE à 2 variables : Il n'existe pas de définition canonique unique de tels approximants. Pour illustrer cette ambiguïté nous allons examiner quelques-unes des définitions proposées pour des approximants de PADE à 2 variables, chaque choix étant adapté à des classes particulières de fonctions à 2 variables et donc à certaines symétries du problème.

Nous considérerons 4 définitions de ces approximants P_N/Q_M , dans le cas simple $N = M$ (approximants diagonaux).

1ère définition :

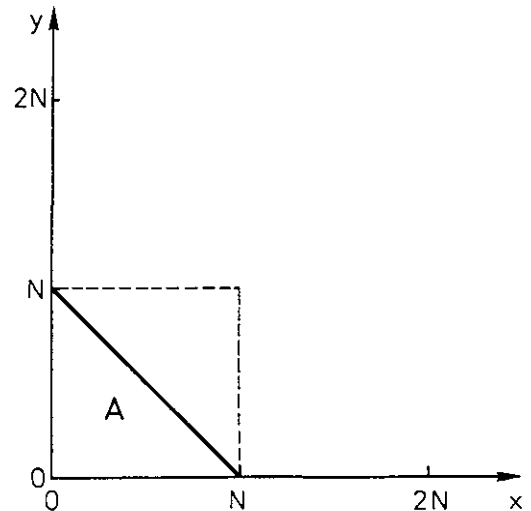
$$P_N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} a_{ij} x^i y^{N-j}$$

(43)

$$Q_N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} b_{ij} x^i y^{N-j}$$

(avec $b_{00} = 1$ pour la normalisation) : on prend tous les termes $x^i y^j$ avec $i+j \leq N$.

La définition d'un approximant (N,N) implique la connaissance de $(N+1)*(N+2) - 1$ données, qui comporteront forcément les $4N + 1$ termes d'ordre 0 à $2N$ en x et y . Il en manque donc $N^2 - N$: le carré $N * N$ en fournit N^2 , donc trop ; il faut éliminer N éléments de ce carré : suivant quels critères ?



2ème définition : CHRISHOLM [CH 77] a proposé de prendre :

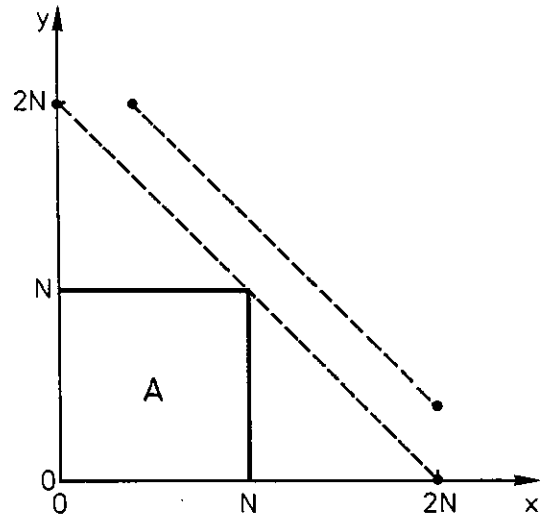
(44)

$$P_N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N a_{ij} x^i y^j$$

$$Q_N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N b_{ij} x^i y^j$$

(avec $b_{00} = 1$) : on prend tous les termes $x^i y^j$ avec $i \leq N, j \leq N$.

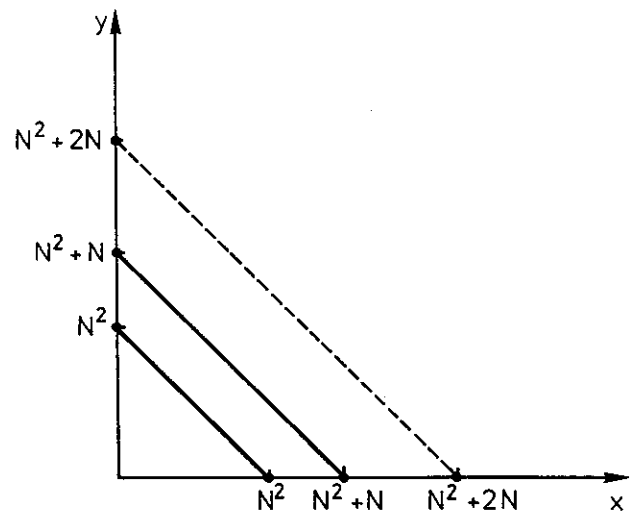
Les définitions d'un approximant (N,N) implique la connaissance de $2(N+1)^2 - 1$ données, comportant forcément les termes d'ordre 0 à $2N$ en x et en y . Le triangle $(0-2N-2N)$ en comporte $(N+1)*(2N+1)$: il en manque donc N , que CHRISHOLM propose de prendre sur l'anti-diagonale $((2N,1), (1,2N))$ qui en comporte $2N$.



3ème définition : Mme CUYT [Cu 83] propose une généralisation basée sur un décalage des degrés de P et Q :

$$(45) \quad \left\{ \begin{array}{l} P_M = \sum_{i=NM}^{NM+M} \sum_{j=0}^i a_{ij} x^i y^j \\ Q_N = \sum_{i=NM}^{NM+N} \sum_{j=0}^i b_{ij} x^i y^j \end{array} \right.$$

Il faut $N(2N^2 + 3N + 3) + 1$ données. Or le trapèze $(N^2, N^2+2N, N^2+2N, N^2)$ contient précisément $N(2N^2+3N+3) + 1$ données : l'approximant de PADE est donc défini sans ambiguïté. Mais ce décalage des origines qui semble satisfaire le mathématicien pose un problème au physicien.



4ème définition : WATSON [Wa 74] propose de définir un approximant de 2 variables $P_{k+m}(x,y)/Q_k(x,y)$ par l'intermédiaire de l'algorithme ε de WYNN. On prend :

$$(46) \quad \begin{cases} \varepsilon_{m,-1} = 0 \\ \varepsilon_{m,0} = \sum_{k=0}^m \sum_{j=0}^m c_{kj} x^k y^j \end{cases}$$

et on construit par récurrence la table des ε :

$$\varepsilon_{m,j+1} = \varepsilon_{m+1,j-1} + \frac{1}{\varepsilon_{m+1,j} - \varepsilon_{m,j}}$$

On définit sans ambiguïté des approximants de PADE puisque :

$$(47) \quad \frac{P_{N+m}}{Q_N} = \varepsilon_{m,2N}$$

Par exemple, on définit P_N/Q_N avec $(2N+1)^2$ moments : le carré complet construit sur $(2N,2N)$.

Mais cette méthode paraît être purement numérique, et, surtout, ne permet pas d'accéder à l'approximant P_{N-1}/Q_N .

En fait, ainsi que nous le verrons ci-après (§ VI.3), cette ambiguïté n'est pas gênante pour le traitement des sections efficaces partielles. Le problème reste posé pour le traitement du transport à plusieurs dimensions, bien que notre optique concerne l'intégration par la méthode de Gauss et non les approximants de PADE.

VI.2 - Les tables de probabilité de sections efficaces partielles.

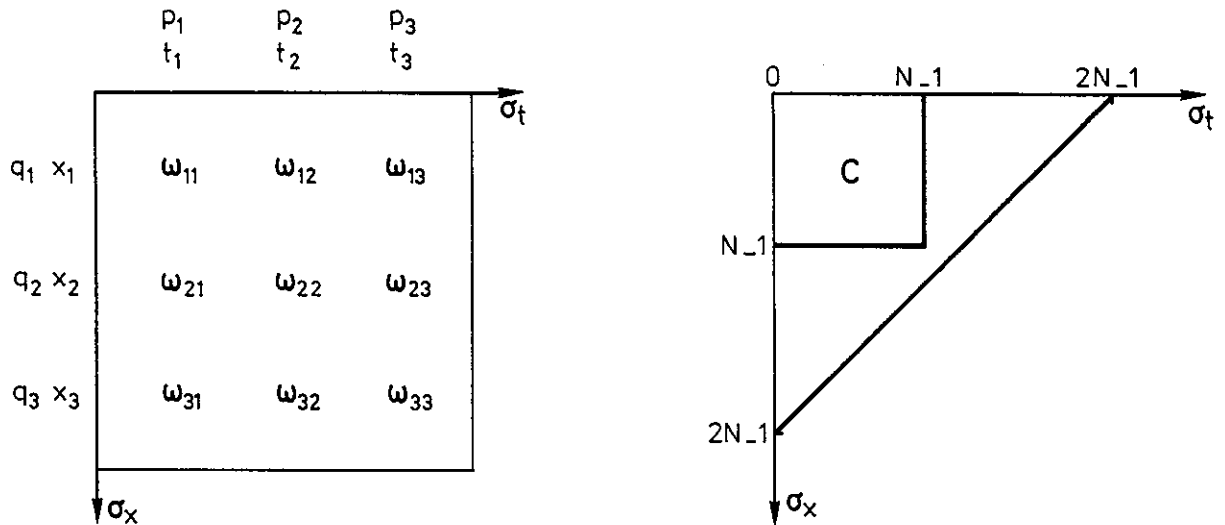
La section efficace totale, qui a été implicitement seule considérée jusqu'à présent, est la somme de plusieurs sections partielles, par exemple :

$$(48) \quad \sigma_t(E) = \sigma_s(E) + \sigma_c(E) + \sigma_f(E) = \sum_x \sigma_x(E)$$

$$\text{avec } x = \begin{cases} s & \text{diffusion (scattering)} \\ c & \text{capture} \\ f & \text{fission} \end{cases}$$

A une section efficace totale donnée peuvent correspondre plusieurs valeurs d'une section partielle : on peut donc vouloir associer une distribution de σ_x à chaque $\sigma_{t,i}$. Pour simplifier nous ne considérons que des moments positifs : la prise en compte des moments négatifs complique encore la situation. Nous avons considéré plusieurs méthodes : aucune n'est satisfaisante. Nous rappelons brièvement deux des solutions examinées.

VI.2.1 - On associe la même séquence de x_j à chaque t_i , avec des probabilités différentes :



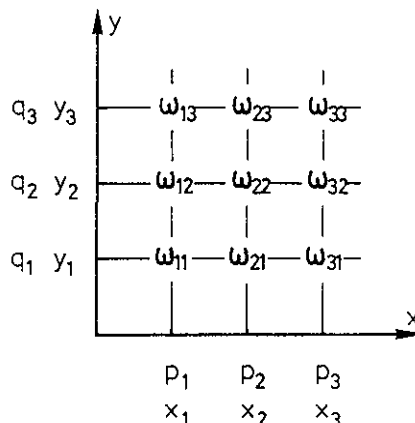
Pour définir les w_{ij} et les x_j , il faut N^2 nouvelles informations, qui peuvent être données par les $2N-1$ moments de σ_x (ordre 1 à $2N-1$) et par les $(N-1)^2$ comoments du carré C : d'où N^2 données au total. Cette méthode assure la cohérence avec la section totale (*) de la table de sections partielles (q_j, x_j), établie à partir des $2N$ moments de cette partielle ; mais rien ne garantit d'obtenir, quelques soient i et j :

$$(49) \quad \begin{aligned} w_{ij} &> 0 \\ w_{ij} &= 0 \quad \text{lorsque } x_j > t_i \end{aligned}$$

Nous avons effectué quelques calculs avec cette méthode.

(*) Nota : Par "cohérence des sections partielles avec la section totale", nous entendons le fait que l'équation 48 est satisfaite par les tables de probabilité, $\sigma_{t,i} = \sum_x \sigma_{x,i}$.

VI.2.2 - On construit σ_t comme la somme des partielles. C'est-à-dire que l'on calcule la T.P. de chaque partielle : d'où les (p_i, x_i) et (q_i, y_i) . Les valeurs de ω_{ij} , probabilités croisées, devront être définies par $(N-1)^2$ équations supplémentaires provenant des comoments (moments croisés de x et y).



On est ainsi assuré de la cohérence de chaque T.P. de partielle, le problème est symétrique, et on aura toujours $t_{ij} = x_i + y_j$ entraînant $x_i < t_{ij}$. Mais on introduit N^2 valeurs de σ_t si il y a 2 partielles, N^3 si il y en a 3, ... alors que σ_t a un rôle privilégié en neutronique. De plus, rien ne garantit la positivité des ω_{ij} (elle peut dépendre du choix des comoments).

VI.3 - Nécessité de l'ordre 1 pour les sections partielles : En fait la recherche d'une table de sections partielles "satisfaisante" est inutile. Supposons qu'elle existe : soit $(\omega_{ij}, \sigma_{ti}, \sigma_{xj})$, avec :

$$(50) \quad p_i = \sum_j \omega_{ij}.$$

Ainsi que P. Reuss nous l'a fait remarquer, une section partielle intervient toujours linéairement en neutronique, i.e. que l'on a toujours à intégrer des expressions de la forme :

$$(51) \quad \int_{\Delta E} f(\sigma_t(E)) \sigma_x(E) dE$$

intégrale approchée par :

$$(52) \quad \begin{cases} \sum_{i,j} \omega_{ij} f(\sigma_{t_i}) \sigma_{xij} \\ = \sum_i f(\sigma_{t_i}) \sum_j \omega_{ij} \sigma_{xij} \end{cases}$$

et on peut toujours définir σ_{xi} tel que :

$$(53) \quad p_i \sigma_{xi} = \sum_j \omega_{ij} \sigma_{xij}$$

Il suffit de définir σ_{xi} , la recherche d'une table de probabilité décrivant σ_x pour σ_{t_i} donné est donc un faux problème pour la neutronique.

VI.4 - Définition d'une table de probabilité de sections partielles

Une table de probabilité de section efficace totale d'ordre N, soit

$$(p_i, t_i) \quad i = 1 \text{ à } N$$

devra être complétée, pour chaque partielle x, par N valeurs x_i définies par N équations aux moments :

$$(54) \quad \mathcal{P}_{x,n} = \frac{1}{\Delta E} \int_{\Delta E} \sigma_x(E) \sigma_t^n(E) dE = \sum_i p_i \sigma_{xi} \sigma_{ti}^n = p_{x,n}$$

Il faut tout d'abord définir les N valeurs de n.

VI.5 - Cohérence interne des tables de probabilité

La section efficace totale est la somme des partielles : il faut qu'il en soit de même pour les tables de probabilité :

$$(55) \quad t_i = \sum_{\text{partielles}} x_i$$

Nous allons montrer que cela est automatiquement obtenu par un choix convenable des valeurs des N équations.

Table de 2 - Nous expliciterons les calculs dans le cas d'une table de 2.

Soit le système de 2 équations (nous noterons t pour $\sigma_t(E)$, x pour $\sigma_x(E)$) :

$$(56) \quad \begin{cases} \int t^m dE = \int t^{m-1} \sum_x x dE \\ \int t^n dE = \int t^{n-1} \sum_x x dE \end{cases}$$

Il s'exprime, en terme de tables de probabilité, par :

$$(57) \quad \begin{cases} p_1 t_1^m + p_2 t_2^m = p_1 t_1^{m-1} \sum_x x_1 + p_2 t_2^{m-1} \sum_x x_2 \\ p_1 t_1^n + p_2 t_2^n = p_1 t_1^{n-1} \sum_x x_1 + p_2 t_2^{n-1} \sum_x x_2 \end{cases}$$

La seconde équation, multipliée par t_2^{m-n} , devient :

$$(58) \quad p_1 t_1^n t_2^{m-n} + p_2 t_2^m = p_1 t_1^{n-1} \sum_x x_1 t_2^{m-n} + p_2 t_2^{m-1} \sum_x x_2$$

retranchée de la première, on obtient :

$$(59) \quad p_1 t_1^m \left(1 - (t_1/t_2)^{n-m} \right) = p_1 t_1^{m-1} \sum_x x_1 \left(1 - (t_1/t_2)^{n-m} \right)$$

donc si $m \neq n$ et si $t_1 \neq t_2$ - i.e. si la table n'est pas dégénérée, on a :

$$(60) \quad t_1 = \sum_x x_1$$

A condition de prendre en compte des moments partiels d'ordre $m-1$ et $n-1$ si on prend en compte les moments totaux d'ordre m et n , la cohérence des sections discrétisées est implicitement assurée par le système d'équations 10 et 54.

Les choix possibles sont (avec $\delta_n = m - n$) :

Moments totaux pris en compte	Moments partiels possibles		
	$\delta_n = 1$	$\delta_n = 2$	$\delta_n = 3$
(-2 à 1)	(-3 et -2), (-2 et -1), (<u>-1 et 0</u>)	(-3 et -1), (-2 et 0)	(-3 et 0)
(-1 à 2)	(-2 et -1), (<u>-1 et 0</u>), (<u>0 et 1</u>)	(-2 et 0), (-1 et 1)	(-2 et 1)
(0 à 3)	(<u>-1 et 0</u>), (<u>0 et 1</u>), (1 et 2)	(-1 et 1), (<u>0 et 2</u>)	(-1 et 2)

Pour respecter la valeur moyenne de chaque partielle, il faut prendre en compte les moments d'ordre 0 : seules les combinaisons soulignées sont possibles.

Table de 3 : Une table de 3 ne peut impliquer que 3 moments partiels, d'ordre 1,m,n. La même démarche conduit au système d'équations :

$$(61) \quad \left\{ \begin{array}{l} p_1 t_1^m \left(1 - (t_1/t_3)^{n-m}\right) + p_2 t_2^m \left(1 - (t_2/t_3)^{n-m}\right) \\ = p_1 t_1^{m-1} \sum_x x_1 \left(1 - (t_1/t_3)^{n-m}\right) + p_2 t_2^{m-1} \sum_x x_2 \left(1 - (t_2/t_3)^{n-m}\right) \\ \\ p_1 t_1^\ell \left(1 - (t_1/t_3)^{m-\ell}\right) + p_2 t_2^\ell \left(1 - (t_2/t_3)^{m-\ell}\right) \\ = p_1 t_1^{\ell-1} \sum_x x_1 \left(1 - (t_1/t_3)^{m-\ell}\right) + p_2 t_2^{\ell-1} \sum_x x_2 \left(1 - (t_2/t_3)^{m-\ell}\right) \end{array} \right.$$

Pour combiner ces 2 équations, nous imposerons :

$$(62) \quad n-m = m-\ell = \delta n$$

en multipliant la seconde par $t_2^{m-\ell}$ et en la retranchant de la première, on obtient :

$$(63) \quad \left\{ \begin{array}{l} p_1 t_1^m \left(1 - (t_1/t_2)^{\ell-m}\right) \left(1 - (t_1/t_3)^{n-m}\right) \\ = p_1 t_1^{m-1} \sum_x x_1 \left(1 - (t_1/t_2)^{\ell-m}\right) \left(1 - (t_1/t_3)^{n-m}\right) \end{array} \right.$$

donc : $(64) \quad t_1 = \sum_x x_1$

si on associe les moments partiels $\mathcal{P}_{\ell-1}$, $\mathcal{P}_{m-1}$ et $\mathcal{P}_{n-1}$ aux moments totaux $\mathcal{M}_\ell$, $\mathcal{M}_m$ et $\mathcal{M}_n$ avec : $\delta n = n-m = m-\ell \neq 0$ et à condition que la table ne soit pas dégénérée.

En pratique pour une table de 3 on aura les combinaisons possibles suivantes (en ne retenant que celles contenant $\mathcal{P}_0$) :

Moments totaux pris en compte	Moments partiels possibles	
	$\delta n = 1$	$\delta n = 2$
(-4 à 1)	(-2 à 0)	(-4, -2, 0)
(-3 à 2)	(-2 à 0), (-1 à 1)	(-4, -2, 0)
(-2 à 3)	(-2 à 0), (-1 à 1), (0 à 2)	(-2, 0, 2)
(-1 à 4)	(-1 à 1), (0 à 2)	(-2, 0, 2)
(0 à 5)	(-1 à 1), (0 à 2)	(0, 2, 4)

Généralisation à une table d'ordre quelconque. Aux $2N$ moments de σ_t , d'ordres consécutifs compris entre I et $I + 2N - 1$, comprenant obligatoirement les ordres 0 et 1 (donc $2 - 2N \leq I \leq 0$), il faut associer, pour chaque section efficace partielle x , les N moments de σ_x :

- soit d'ordres consécutifs, de J à $J + N - 1$, comprenant obligatoirement l'ordre 0, (donc $1 - N \leq J \leq 0$) et tels que :

$$I - 1 \leq J \leq I + N$$

Plusieurs solutions sont possibles ;

- soit d'ordres non consécutifs, variant de 2 en 2 de J à $J + 2N - 2$, comprenant obligatoirement l'ordre 0 (les moments ρ seront donc pairs) et tels que $J = I - 1$ ou I .

Une seule solution est possible.

VII - CHOIX DES TABLES DE PROBABILITE DES SECTIONS PARTIELLES - Etude de l'influence de J .

Nous considérerons en VII.1 et en VII.2 les propriétés des tables établies d'après des moments de partielles d'ordres consécutifs ($\delta n = 1$); en VII.3, nous examinerons le cas où les moments des partielles sont espacées de 2 ($\delta n = 2$).

VII.1 - Précision - Nous avons étudié l'influence de J dans les mêmes conditions que précédemment (voir § V). Les résultats sont représentés pour $T = 0$ K et $N = 7$ par les figures 11 A, B et C.

On constate le même phénomène que précédemment : à I donné, on a intérêt à prendre en compte davantage de moments négatifs lorsque σ_d est petit, davantage de moments positifs (J voisin de 0) lorsque σ_d est grand.

Nous avons étudié un autre critère :

$$E_r^2 = \varepsilon \frac{2}{r} \quad (d=1) + \varepsilon \frac{2}{r} \quad (d=500)$$

il caractérise un compromis entre faibles et fortes dilutions : les résultats sont représentés par les figures 12 A ($T = 0$ K) et B ($T = 1500$ K). Il apparaît une faible dépendance de J avec I et, globalement, que l'on a intérêt à choisir $J \approx -N/2$.

Figures 11 A, B, C : Importance des moments partiels négatifs. Cas du ^{238}U de 4250 à 4750 eV, résonances $\ell = 0$ seulement : erreur relative sur σ_s effectif (à gauche) et sur $\sigma_{c,\text{eff}}$ (à droite) calculées par des tables de probabilité pour :

- 1 températures : 0 K;
- 3 dilutions : 1 barn (figures A), 20 barns (figures B) et 500 barns (figures C);
- 1 ordre : $N = 7$;
- 4 valeurs de I , valeur inférieure des moments totaux pris en compte ($I = -1, -4, -7$ et -10).

L'erreur relative ($\varepsilon_r = \sigma_{\text{TP}}/\sigma_{\text{exact}} - 1$.) est portée en fonction de J , valeur inférieure des moments partiels pris en compte.

Pour $\sigma_d = 1$ et $\sigma_d = 500$, l'allure générale comporte :

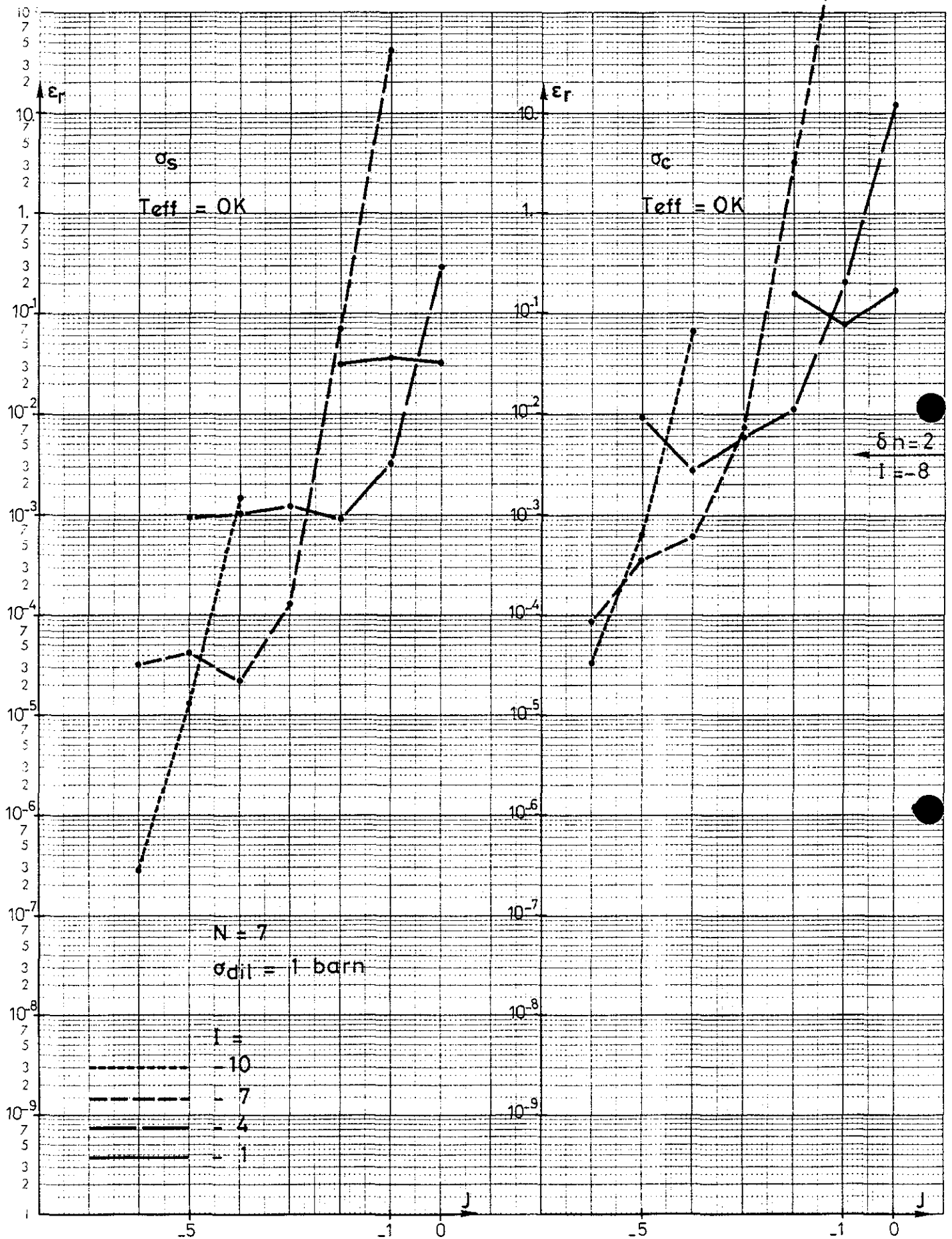
- un domaine de décroissance rapide de ε_r (par exemple, pour $\sigma_d = 500$, $I = -4$: décroissance de $J = -5$ à $J = -2$).
- un domaine où ε_r est constant (même exemple : ε_r est constant de $J = -2$ à $J = 0$).

Cette "constance" est perturbée par des fluctuations non significatives : rappelons que nos résultats sont la moyenne de quatre échantillons de résonances, d'où les barres d'erreur, portées seulement pour $\sigma_d = 500$, $I = -4$.

Il apparaît que le choix de J est plus important que celui de I . Pour $\sigma_d = 20$ barns, le meilleur choix de J est :

$$J = \frac{2}{3} (I + 1)$$

Cas des tables partielles avec $\delta n=2$. On a alors $J(\text{pair}) = I$ ou $I-1$. Le meilleur résultat obtenu en capture est indiqué par une flèche avec la valeur de I correspondant.



N° 2030

Figure 11_A

961.10090

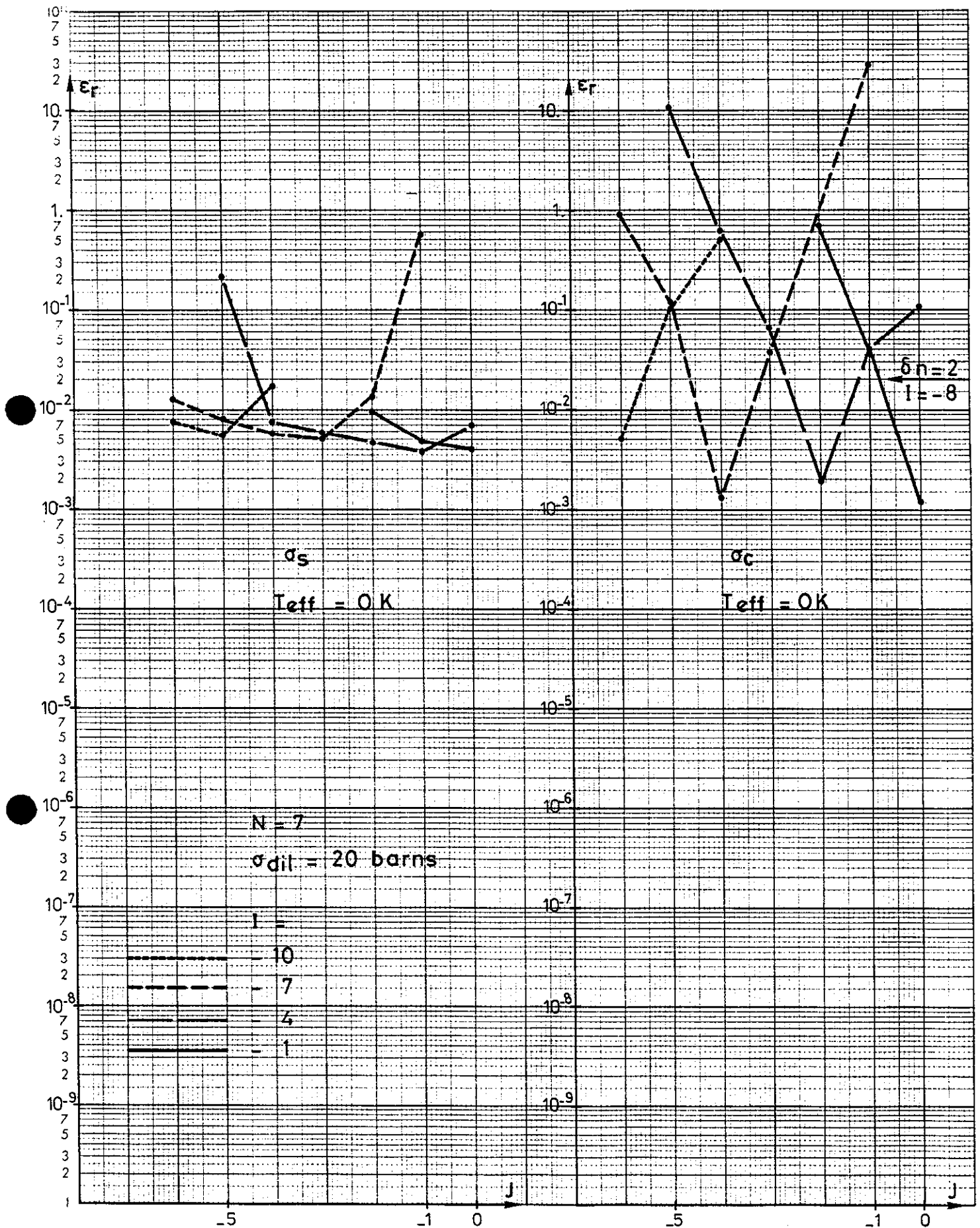


Figure 11.B

96110051

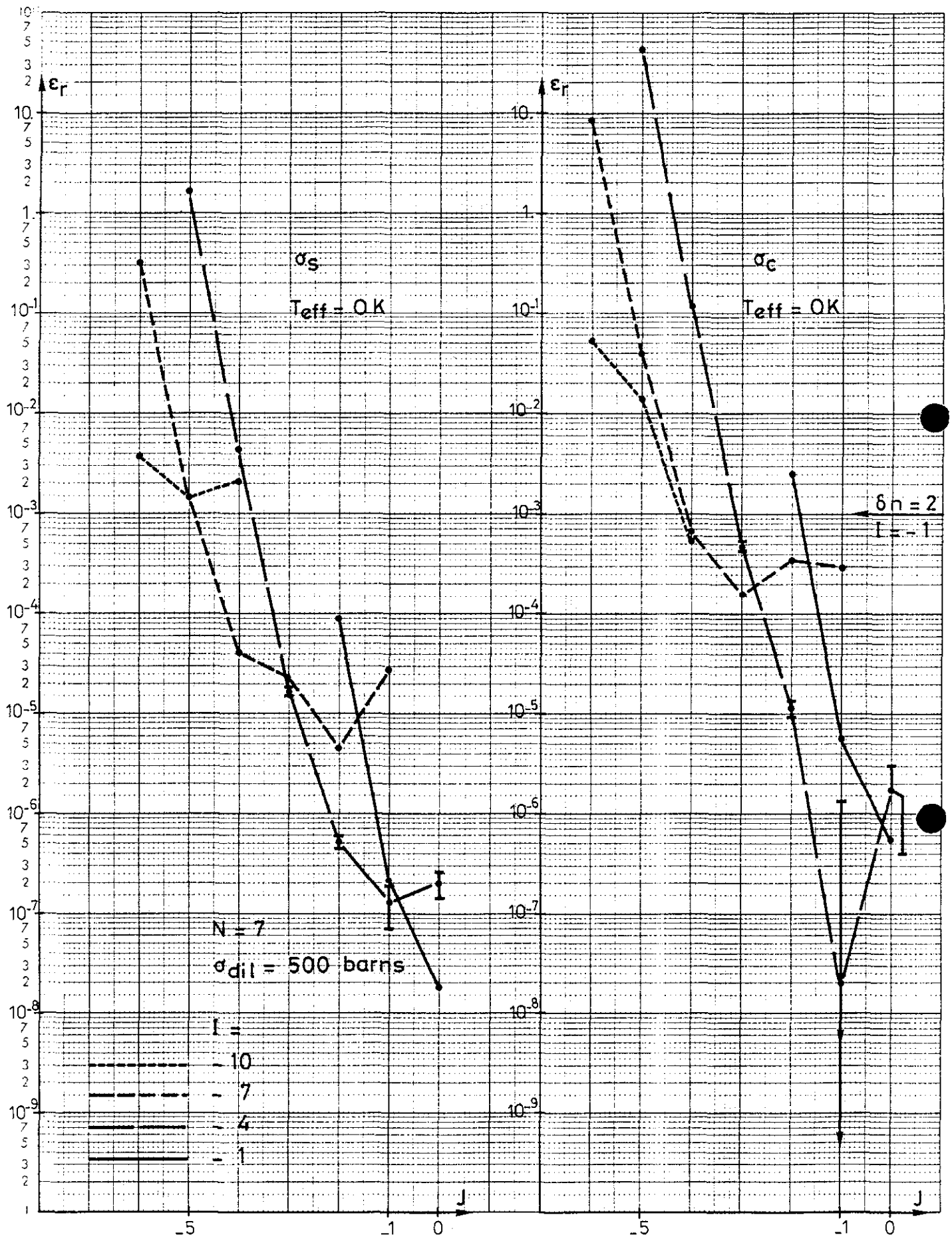


Figure 11 - C

Figures 12 A et B : Influence des moments partiels négatifs : choix de J.

Cas du 238 U de 4250 à 4750 eV, résonances "s" seulement : la somme quadratique des erreurs pour $\sigma_d = 1$ barn et pour $\sigma_d = 500$ barns est portée en fonction de J, valeur initiale des moments partiels pris en compte, dans les conditions suivantes :

- 2 températures (0 K : fig. 12 A ; 1500 K : fig. 12 B) ;
- 1 ordre : $N = 7$;
- 6 valeurs de I : $I = -3$ à -8 ; les courbes étant difficilement discernables à $T = 1500$ K, nous n'avons porté les résultats que pour 4 valeurs de I dans la figure 12 B.

Il apparaît, d'après la figure 12 A, que l'on a intérêt à diminuer J quand I diminue : relation $J \# -1 + 0,4 I$.

Cette dépendance est plus faible à 1500 K (fig. 12 B) : relation $J \# -2 + 0,2 I$.

Globalement, nous recommandons, pour l'établissement des tables de probabilité, le choix normal :

$$J = -N/2$$

étant entendu que, comme pour le choix de I, l'utilisateur pourra réduire l'ordre de la table en prenant J' plus grand ou égal à J.

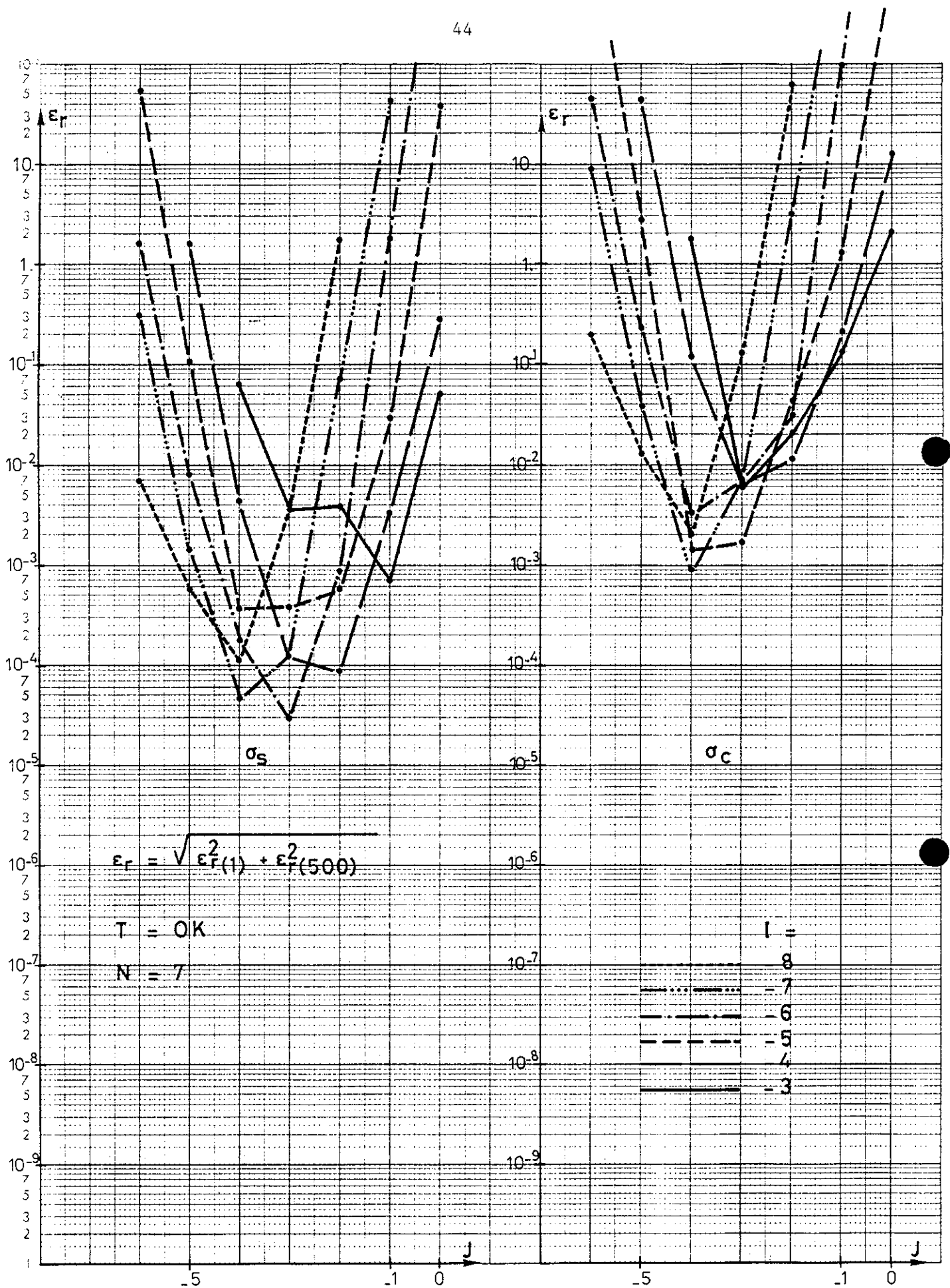


Figure 12 - A

2071034

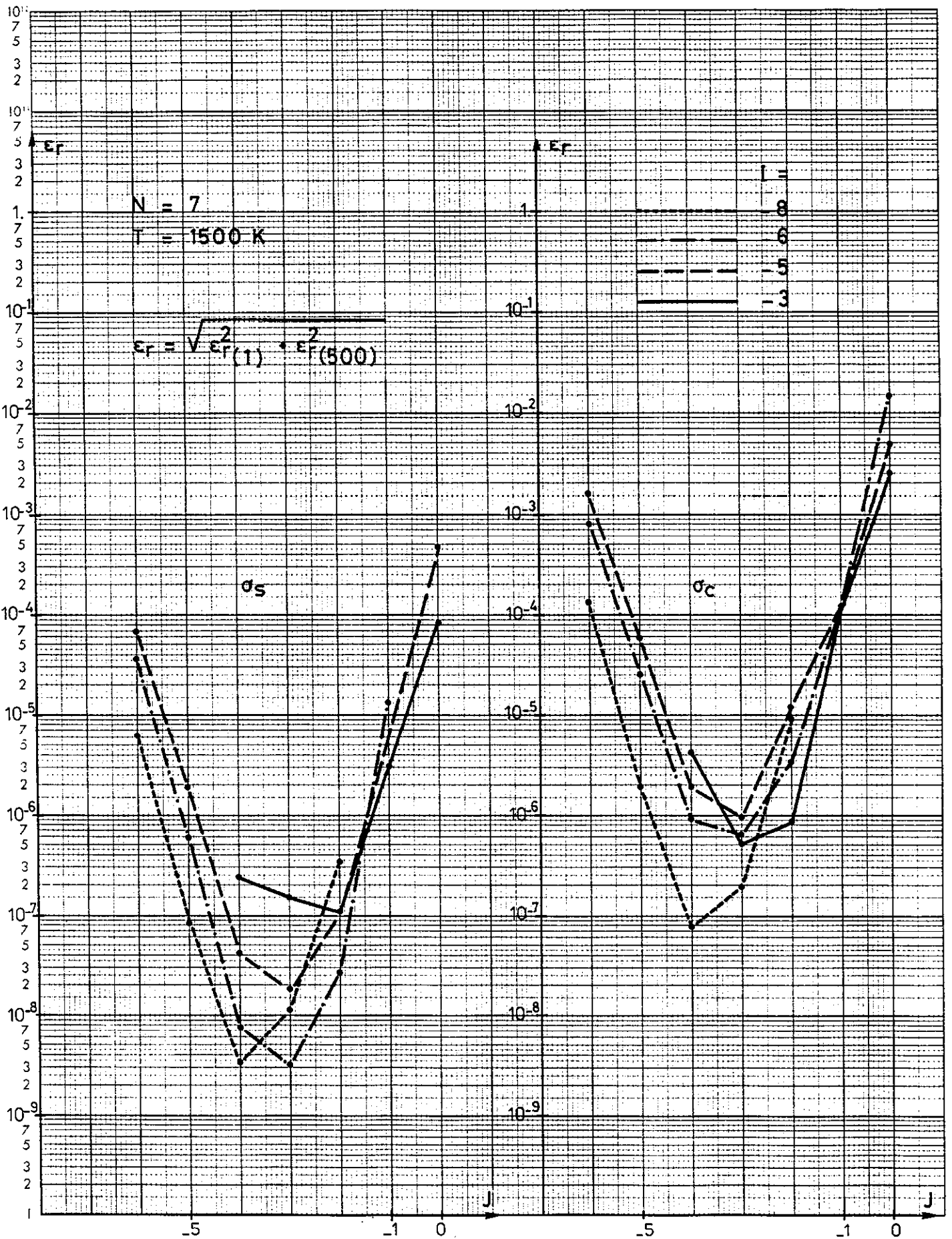


Figure 12. B

96110056

VII.2 - Valeurs de σ_{xi} négatives. Rien ne garantit que les sections efficaces partielles discrètes obtenues par la résolution du système 54 sont contenues dans les supports de σ_x . En fait, on obtient souvent des valeurs de σ_{xi} négatives, donc en dehors du support de σ_x .

Nous avons voulu étudier la probabilité d'occurrence de ces valeurs négatives, et leur sens "physique" ; pour cela, nous avons repris les 4 cas de calcul définis ci-dessus (^{238}U , résonances "s", 4 cas statistiquement indépendants).

Nous avons compté le nombre de σ_{xi} négatives pour $T = 0 \text{ K}$ et pour $T = 1500 \text{ k}$. Les résultats sont représentés dans le tableau 2 ; ils résultent de la moyenne des 4 cas étudiés : d'où des valeurs fractionnaires (0,25; 0,5; 0,75). Ces résultats comportent les cas non cohérents (ne satisfaisant pas la condition 55) ; on voit qu'il y a très peu de valeurs négatives sur l'axe du domaine cohérent ($J \neq I/2$), sans qu'on puisse jamais être sûr a priori qu'il n'y aura pas de valeur négative. L'examen des tableaux montre que les meilleurs sont $J = -N/2$ et $I = 1-N$ ou $I = 2-N$; il apparaît qu'il est toujours possible d'obtenir une T.P. avec des $\sigma_{xi} > 0$ en variant I ou J d'une unité autour de la valeur recommandée.

Ce tableau 2 donne, pour chaque ordre ($N = 2$ à $N = 7$), le nombre moyen de valeurs négatives de σ_{xi} observées (soit σ_{si} , soit σ_{ci} , étant entendu que la somme des 2 est positive) en fonction de I , ordre minimum de M_n , et de J , ordre minimum de $\mathcal{P}_m$. Les 2 lignes brisées délimitent la zone théorique des (I, J) cohérents, assurant $\sigma_{ti} = \sigma_{si} + \sigma_{ci}$ (voir § VI.5).

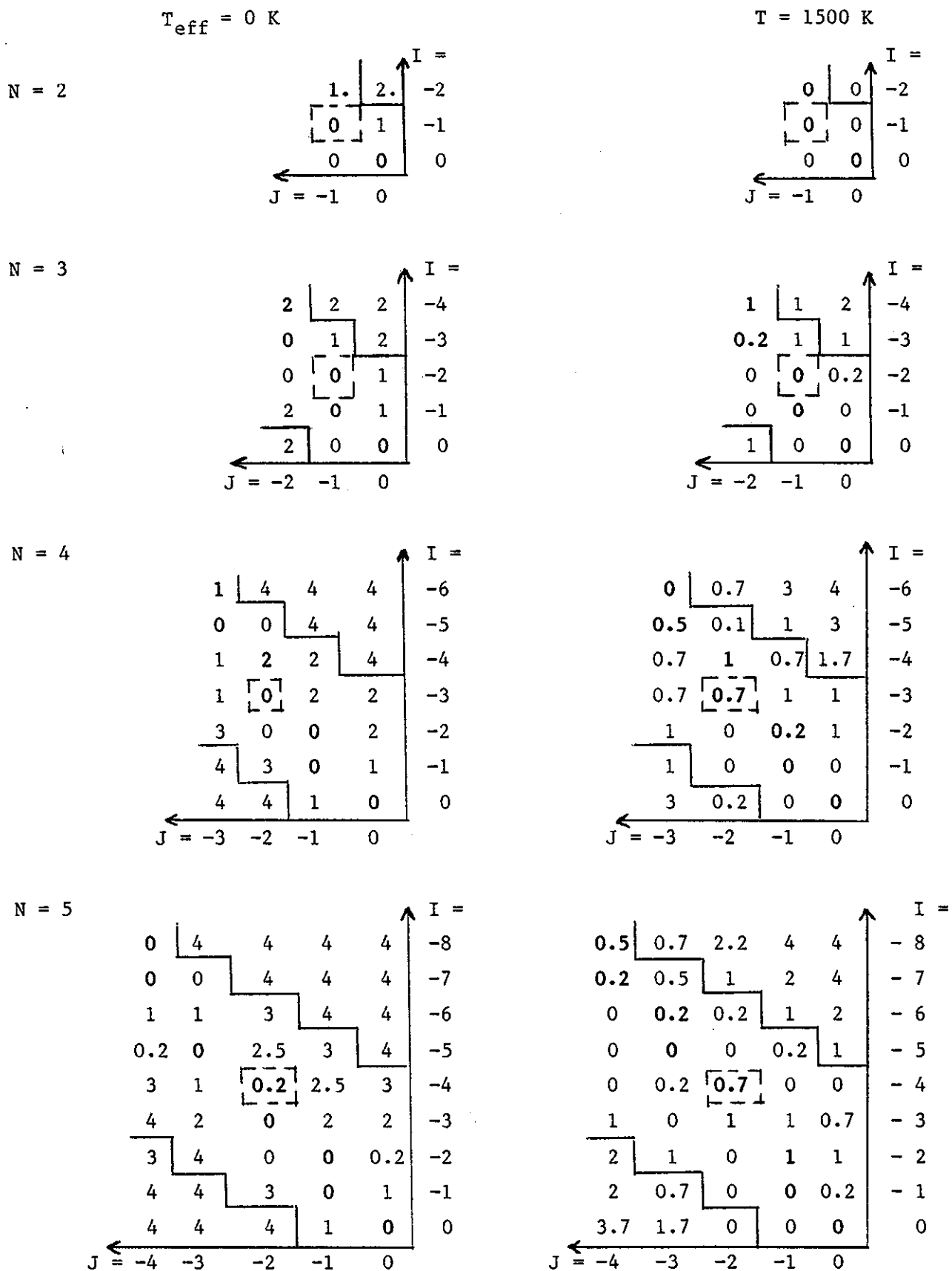
Les "0" (absence de sections efficaces partielles négatives) s'étendent de part et d'autre de la ligne $J = I/2$, dans la zone "cohérente" délimitée par les lignes brisées. Les valeurs en caractères gras correspondent au choix recommandé :

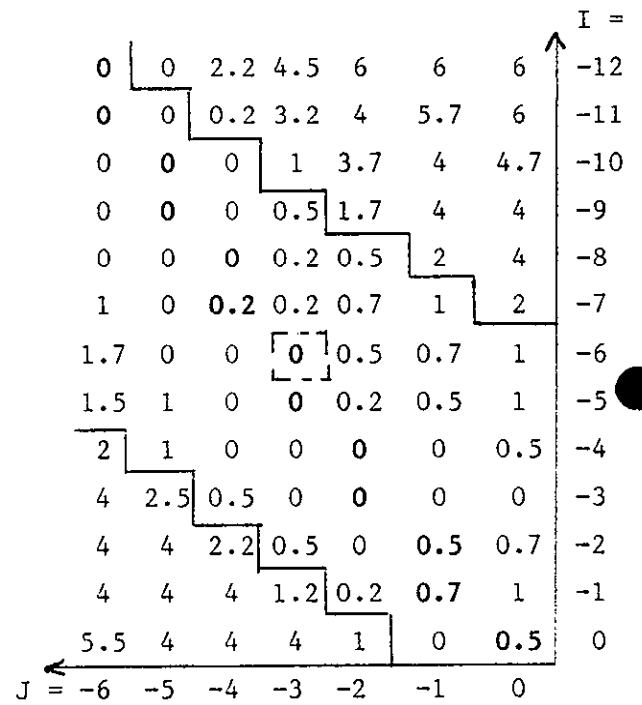
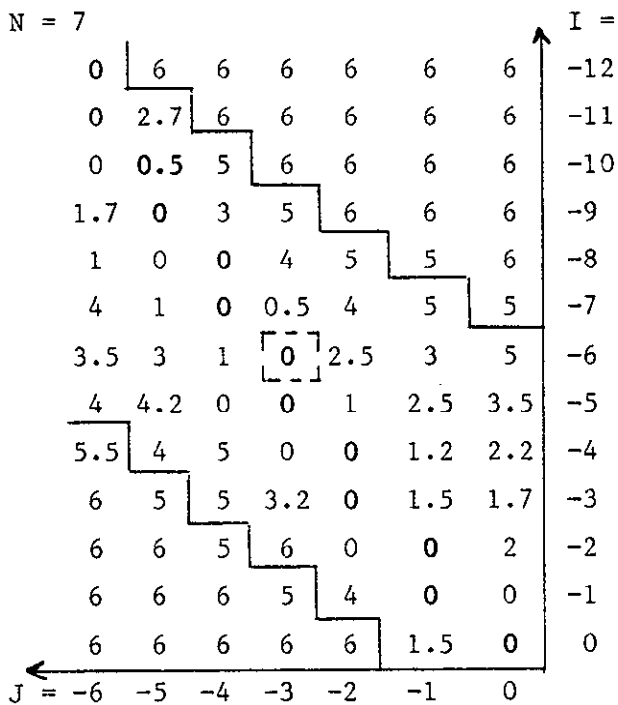
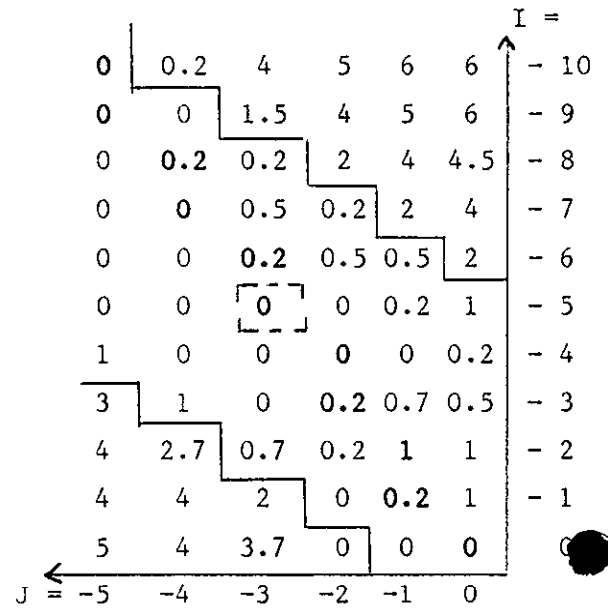
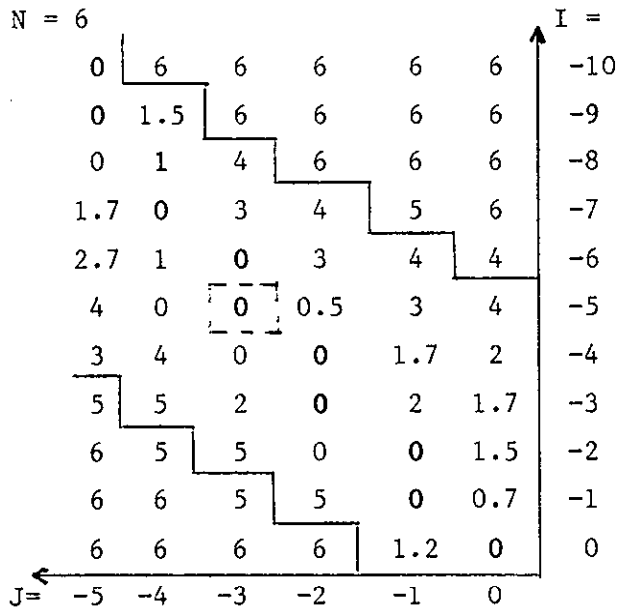
$$J = (I-1)/2$$

Pour chaque ordre N nous préconisons le choix encadré :

$$\begin{cases} I = 1-N \\ J = -N/2 \end{cases}$$

Tableau 2 - Nombre de sections partielles négatives obtenues pour des tables de probabilité d'ordre N en fonction de I et J.





Mais il ne suffit pas de compter le nombre de valeurs négatives : il faut les examiner. Les tableaux 3 représentent des exemples de tables d'ordre 4 construites autour de celle que nous recommandons : $I = 3$, $J = -2$. Pour celle-ci la première valeur de σ_{ci} est négative, de très peu : $\sigma_{c1} = -0,02$ barns. Il s'agit là d'un résultat général : au voisinage du fond de la vallée $J = (I-1)/2$ les valeurs négatives relevées :

- concernent toujours σ_c (pour notre noyau test),
- sont toujours très voisines de 0,
- concernent presque toujours la 1ère valeur de σ_c (correspondant à la plus faible valeur de σ_{ti}), parfois la 2ème (lorsque $I < N$).

Tableau 3-A - Table de probabilité pour $N = 4$ à $T = 1500$ K
avec $I = -3$ constant ($\ell = 0$ seulement)

p	σ_t	$J = -3$		-2		-1		0	
		σ_s	σ_c	σ_s	σ_c	σ_s	σ_c	σ_s	σ_c
0,018	89,03	89,61	-0,58	86,57	2,46	86,03	3,01	85,98	3,06
0,137	38,34	35,03	3,31	35,63	2,71	35,88	2,46	35,93	2,41
0,609	13,40	12,95	0,45	12,88	0,52	12,80	0,59	12,76	0,64
0,237	8,28	8,24	0,03	8,29	-0,02	8,39	-0,11	8,48	-0,21

Les tableaux 3 montrent comment varient les tables autour du choix recommandé. Dans ce cas on constate que si on veut rejeter le choix ($N=4$, $I=-3$, $J=-2$) parcequ'il contient une valeur légèrement négative ($\sigma_{c,1}=-0.02$), on peut accepter la table ($N=4$, $I=-2$, $J=-2$) qui ne contient pas de valeur négative mais donnera une plus faible précision dans les calculs.

Tableau 3-B - Table de probabilité pour $N = 4$ à $T = 1500$ K
avec $J = -2$ constant

	p	t	s	c
I = -6	0,087	57,05	59,42	2,79
	0,306	18,89	13,87	1,35
	0,566	10,50	11,99	0,12
	0,041	6,68	0,90	0,14
I = -5	0,050	69,74	66,81	2,93
	0,239	24,19	22,39	1,79
	0,644	11,16	10,93	0,23
	0,067	7,02	7,03	-0,01
I = -4	0,029	80,74	77,79	2,96
	0,185	30,87	28,67	2,20
	0,666	11,99	11,63	0,36
	0,120	7,53	7,61	-0,08
I = -3	0,018	89,03	86,57	2,46
	0,137	38,34	35,63	2,71
	0,609	13,40	12,88	0,52
	0,237	8,28	8,29	-0,02
I = -2	0,012	94,82	93,02	1,80
	0,096	46,13	42,95	3,18
	0,459	16,13	15,34	0,79
	0,433	9,18	9,11	0,08
I = -1	0,009	98,64	95,31	3,32
	0,065	53,72	50,94	2,77
	0,306	20,77	19,38	1,39
	0,620	10,04	9,89	0,15
I = -0	0,007	100,98	16,94	10,12
	0,045	60,39	88,25	-0,0005
	0,207	26,58	19,60	2,46
	0,741	10,83	10,93	0,19

Les cas $I = -6$ et $I = 0$ sont à rejeter a priori car ils ne satisfont pas les conditions de cohérence ($\sigma_{ti} = \sigma_{si} + \sigma_{ci}$).

984.0260

Conclusion - Les systèmes d'équations 11 et 54 nous amènent donc à définir des tables de probabilité :

$$[p_i, \sigma_{ti}, (\sigma_{xi})]_{N,I,J}, \quad i = 1 \text{ à } N$$

avec :

$$(65) \quad \begin{cases} 1-2N \leq I \leq 0 & (\text{option normale : } I = 1-N) \\ \text{MAX}(1-N, I-1) \leq J \leq 0 & (\text{option normale : } J = -N/2) \end{cases}$$

Ces choix assurent des valeurs "physiques" pour p_i et σ_{ti} , et garantissent la cohérence des sections partielles ($\sigma_{ti} = \sum_x \sigma_{xi}$) ; ils n'assurent pas toujours une valeur "physique" des σ_{xi} (une ou plusieurs de ces valeurs peuvent être en dehors du support de σ_x , l'option "normale" assurant le meilleur choix). Il est possible :

- soit de faire les calculs avec ces valeurs "non physiques" (éventuellement négatives) de ces σ_{xi} ; cela est choquant du point de vue physique, mais n'affectera pas la précision des calculs, au contraire.

- soit de chercher des valeurs de I' , J' voisines de I , J qui donneront une table physique. D'après notre expérience, cela paraît être généralement possible (nous ne possédons pas de contre-exemple).

VII.3 - Cas des tables $\delta n=2$ - Rappelons que J est alors imposé : pair, égal à I ou à $I-1$.

Précision - Les meilleurs résultats pour la capture, à 0 K avec $N=7$, sont portés sur les figures 11. Ils sont moins bons d'un facteur 10 à 1000 que ceux que l'on peut obtenir avec les tables $\delta n=1$.

Valeurs négatives de σ_{xi} - Le nombre moyen de valeurs négatives de σ_{xi} est donné par le tableau 4, pour $N=7$, $T=0$ K. Ces résultats sont à comparer à la diagonale $J = (I-1)/2$ du tableau 2 correspondant : ils sont plutôt plus mauvais.

Tableau 4 - Nombre de sections partielles négative pour une table $\delta n=2$, $N=7$, $T=0$ K

I	-12	-11	-10	-9	-8	-7	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0
nombre	1	1	0	0	0	0.7	0	0	0.2	0	0.7	1	1

Conclusion - Le choix $\delta n=2$, théoriquement possible, ne semble présenter aucun avantage sur le choix plus traditionnel $\delta n=1$, que nous retiendrons.

VIII - LES TABLES DE PROBABILITE : DONNEES FONDAMENTALES OU METHODE PHENOMENOLOGIQUE D'INTERPOLATION ?

Nous proposons donc d'établir les tables de probabilité à partir des moments des distributions des sections efficaces. Ces tables sont donc indépendantes de l'utilisation que l'on veut en faire, et décrivent aussi fidèlement que l'on veut les fluctuations des sections efficaces.

Au contraire, les Soviétiques avaient proposé d'établir ces tables à partir des résultats décrivant $\sigma_{x,eff}(d)$, d étant la dilution ; c'est la méthode utilisée actuellement dans plusieurs laboratoires [Go 71, Kh 72]. Ces tables peuvent être établies, par exemple, par moindres carrés. En pratique, elles constituent une méthode performante d'interpolation, basée sur le modèle de l'intégration par la méthode de GAUSS-JACOBI. Mais les paramètres ne sont plus une donnée fondamentale : ils sont ajustés pour décrire au mieux σ_{eff} , et dépendent de la méthode de calcul de σ_{eff} (en particulier, ils tiennent compte du ralentissement si σ_{eff} est calculé avec prise en compte du ralentissement).

Nous avons comparé ces deux méthodes, appliquées à un cas statistique du 238 U à 300 K entre 4400 et 4600 eV, avec les paramètres moyens suivants (ENDF-B-4).

A	$= 236.006$	R	$= 9.184 \text{ fm}$
$\overline{D}_{(J=0,5)}$	$= 19.98 \text{ eV}$	$\overline{D}_{(J=1.5)}$	$= 10.9719 \text{ eV}$
S_0	$= 1,05 \cdot 10^{-4}$	S_1	$= 1.5852 \cdot 10^{-4}$
Γ_γ	$= 0.0235 \text{ eV (constant)}$		

Les sections effectives ont été calculées pour 41 dilutions " d " régulièrement distribuées de $d = 1$ barn à $d = 10\,000$ barns, et pour $d(42) = 10^7$ barns. Les moindres carrés ont été effectués en minimisant les erreurs relatives δ [Ag 85] :

$$(66) \quad \delta = \left(\frac{\sigma_{x,eff} \text{ (calculé par T.P.)}}{\sigma_{x,eff} \text{ (exact)}} - 1 \right)$$

Précision - Le critère d'accord entre $\sigma_{x,eff}$ calculé directement pour chaque dilution (valeur qualifiée de "exacte") et la valeur calculée avec une T.P. est l'erreur quadratique moyenne sur les 42 points :

$$(67) \quad \varepsilon = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{42} \delta^2}{42}}$$

Les figures 13 représentent ε en fonction de l'ordre de la table pour la diffusion et la capture.

On constate que la précision est meilleure avec les tables de probabilité établies par moindres carrés sur $\sigma_{x,eff}$ (d) : pour une précision donnée, on aura besoin d'un ordre plus faible d'environ 1 unité par cette méthode.

Ce résultat est normal : les paramètres de la table (moindres carrés) sont calculés pour décrire au mieux $\sigma_{x,eff}$ (d), et rien d'autre.

Comparaison des tables - Le tableau 5 représente les tables de probabilité calculées par ces deux méthodes. Les tables (moments) et les tables (moindres carrés sur $\sigma_{x,eff}$ (d)) présentent le même comportement général. Il paraît difficile de déceler une différence systématique significative ; tout au plus peut-on remarquer que les valeurs des σ_i sont plus étalées dans le cas des tables (moments).

Conclusion - Si les tables de probabilité ne sont utilisées que pour effectuer le calcul par interpolation de $\sigma_{x,eff}$ (d), la seconde méthode (moindres carrés sur $\sigma_{x,eff}$ (d)) est préférable. Mais une telle table ne peut être utilisée pour d'autres calculs : le calcul des mélanges par composition des moments, par exemple, n'est pas possible.

Les tables de probabilité (moments) sont plus générales, permettent le calcul des mélanges et ouvrent la voie à la méthode des sous-groupes en neutronique [Bo 85, Ri 86].

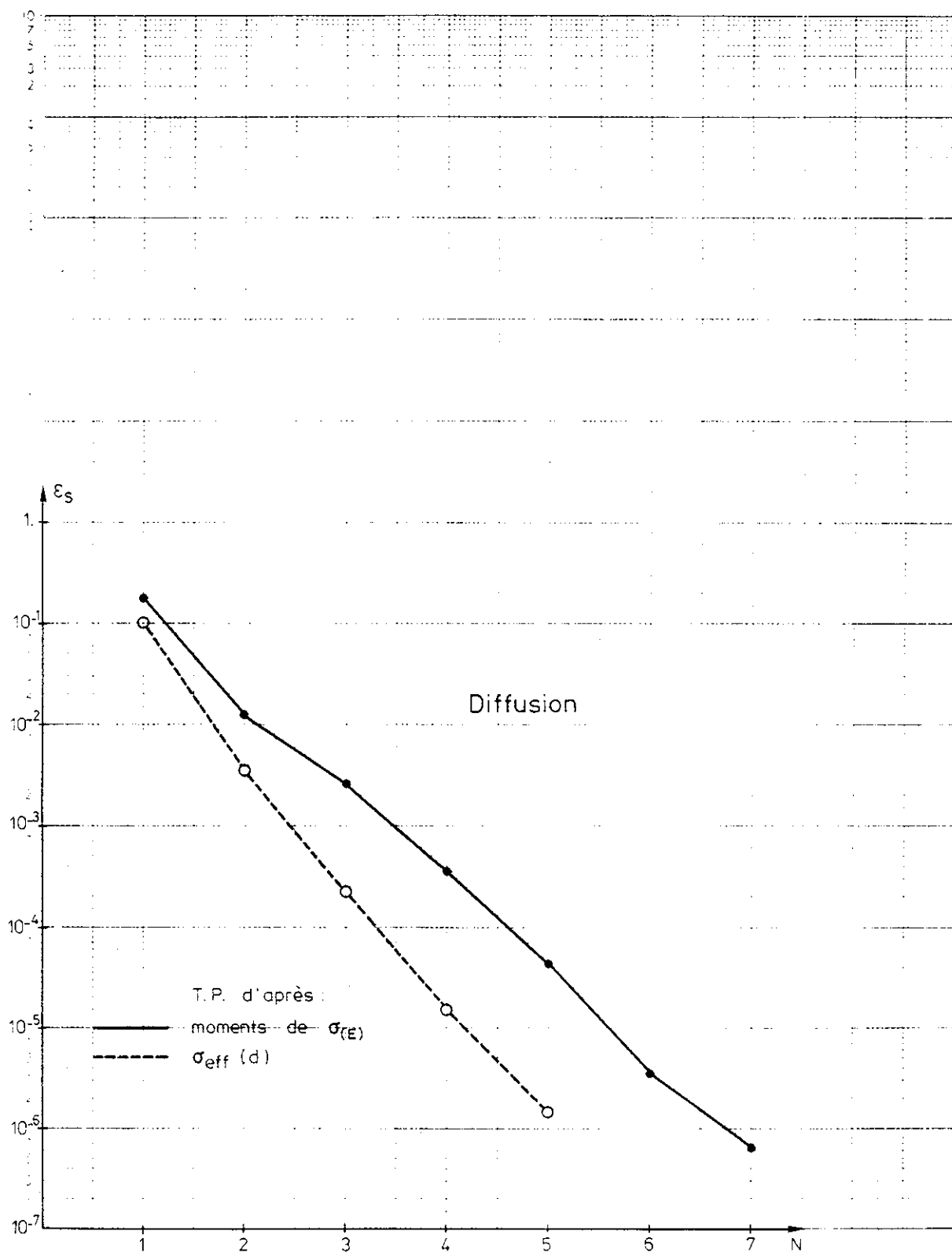
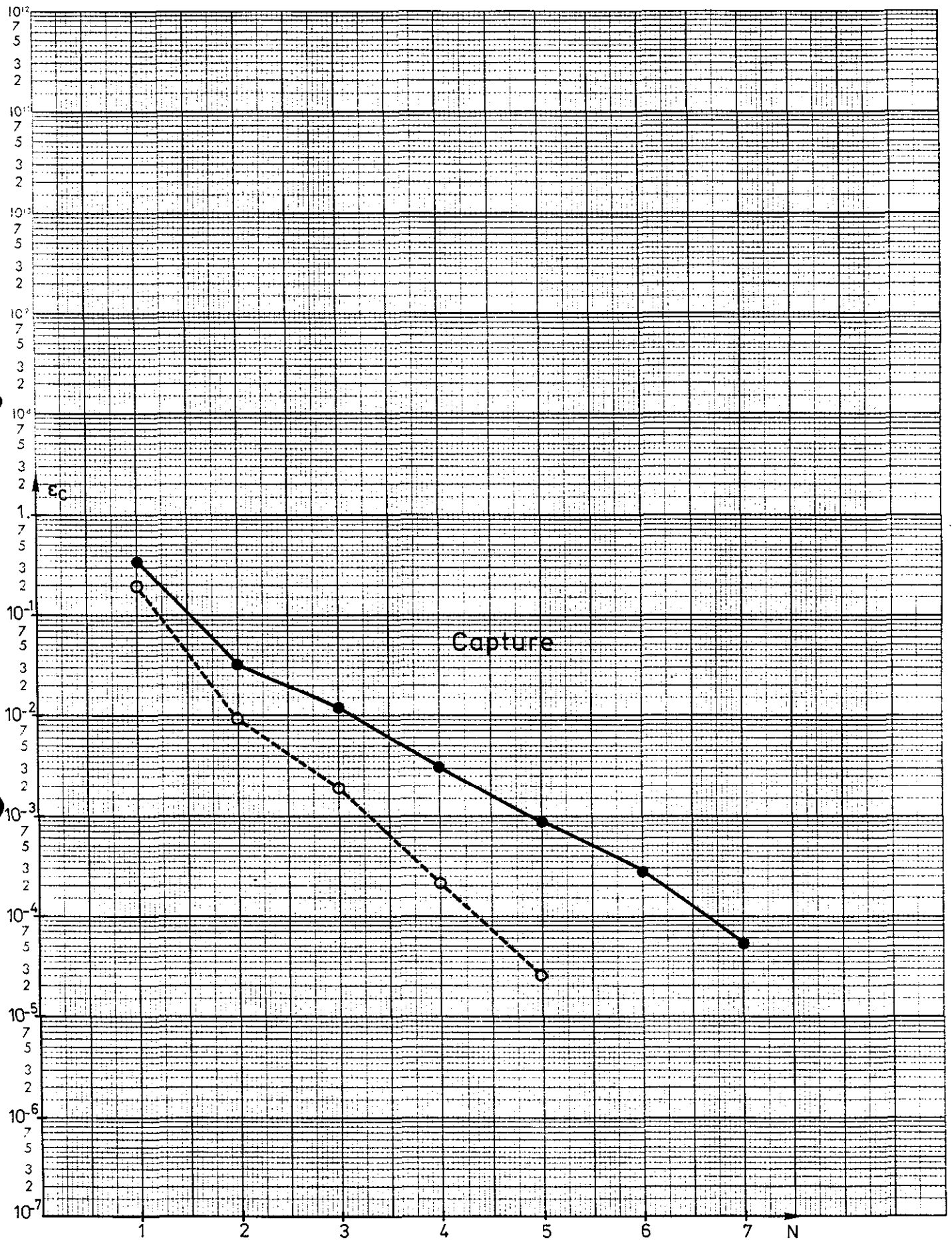


Figure 13 A

Figure 13 A et B : Valeur de l'erreur relative quadratique moyenne pour la diffusion (A) et la capture (B). Les résultats obtenus avec les T.P. établies par les moments sont en traits pleins, ceux avec les T.P. établies par moindres carrés sur $\sigma_{x,\text{eff}}(d)$ sont en tirets.



N° 2030

Figure 13 - B

9011006

Tableau 5

Comparaison des T.P. établies par la méthode des moments
et par ajustement sur 42 valeurs de $\sigma_{x,eff}$ (dilution)

Ordre de la table	T.P. d'après moments				T.P. d'après $\sigma_{x,eff}$ (d)			
	Pi	ti	si	ci	Pi	ti	si	ci
1	1.000	16.67	15.58	1.089	1.000	14.3	13.5	0.836
2	0.095	70.3	63.9	6.41	0.122	57.4	52.2	5.17
	0.905	11.04	10.51	0.530	0.878	10.94	10.42	0.525
3	0.036	102.6	94.7	7.92	0.049	89.4	81.9	7.48
	0.408	19.64	18.01	1.634	0.367	18.72	17.20	1.516
	0.556	8.94	8.69	.248	0.584	9.26	8.97	0.286
4	0.017	122.3	114.8	7.56	0.024	111.8	104.4	7.46
	0.101	45.0	40.2	4.83	0.103	39.4	35.1	4.31
	0.809	11.84	11.27	.573	0.754	12.08	11.49	0.599
	0.072	5.74	5.65	.087	0.118	6.55	6.45	0.099
5	0.011	132.1	123.9	8.18	0.015	125.3	117.5	7.88
	0.050	66.2	60.1	6.03	0.056	58.3	52.7	5.62
	0.212	21.11	19.10	2.02	0.175	21.07	19.02	2.05
	0.705	10.41	10.03	.374	0.719	10.72	10.32	0.405
	0.021	4.56	4.30	.267	0.035	5.10	4.87	0.226

IX - COMPOSITIONS DES SECTIONS EFFICACES

Un des problèmes posés par le concept de "section effective" est le fait que celle-ci concerne pratiquement toujours un mélange : il faudrait, en toute rigueur, calculer la section efficace du mélange point par point, puis calculer la section effective pour la dilution et la section équivalente voulues ; et ce pour chaque mélange. Cela n'est pratiquement jamais fait, des méthodes approchées sont utilisées.

La composition des moments permet un calcul très facile des propriétés d'un mélange, tout au moins lorsque la table de probabilité ne décrit que des moments positifs.

IX.1 - Cas des moments positifs - Nous ne considérons que les mélanges binaires, les résultats pouvant se généraliser très facilement (en pratique, nous proposons de traiter le mélange par récurrence, i.e. de considérer le mélange des n premiers noyaux et du $(n+1)$ ème comme un mélange binaire).

Soit donc un mélange constitué de noyaux 1 (proportion isotopique α) et de noyaux 2 (proportion isotopique β). Le mélange est :

$$(68) \quad \begin{cases} t = \alpha t_1 + \beta t_2 \\ p = \alpha p_1 + \beta p_2 \end{cases}$$

Les moments seront donnés par :

$$(69) \quad \left\{ \begin{aligned} \mathcal{M}_n &= \int t^n \frac{dE}{\Delta E} = \int (\alpha t_1 + \beta t_2)^n \frac{dE}{\Delta E} \\ &= \sum_{i=0}^n C_n^i \alpha^i \beta^{n-i} \int_{t_1}^i t_1^i t_2^{n-i} \frac{dE}{\Delta E} \\ &= \sum_{i=0}^n C_n^i \alpha^i \beta^{n-i} \langle t_1^i t_2^{n-i} \rangle \end{aligned} \right.$$

Dans l'hypothèse statistique dans laquelle nous nous sommes placés :

$$(70) \quad \mathcal{M}_n = \sum_{i=0}^n C_n^i \alpha^i \beta^{n-i} \langle t_1^i \rangle \langle t_2^{n-i} \rangle$$

On obtient de même, pour chaque section partielle :

$$(71) \quad \left\{ \begin{aligned} \mathcal{P}_m &= \int p \, t^m \frac{dE}{\Delta E} = \int (\alpha p_1 + \beta p_2) (\alpha t_1 + \beta t_2)^m \frac{dE}{\Delta E} \\ &= \sum_{i=0}^m C_n^i \alpha^i \beta^{m-i} \left(\langle p_1 t_1^i t_2^{m-i} \rangle + \langle t_1^i p_2 t_2^{m-i} \rangle \right) \end{aligned} \right.$$

dans l'hypothèse statistique :

$$(72) \quad \mathcal{P}_m = \sum_{i=0}^m C_n^i \left(\alpha^{i+1} \beta^{m-i} \mathcal{P}_{1,i} \mathcal{M}_{2,m-i} + \alpha^i \beta^{m-i+1} \mathcal{M}_{1,i} \mathcal{P}_{2,m} \right)$$

IX.2 - Cas des moments négatifs - On ne peut évidemment pas pratiquer la même algèbre sur les moments négatifs. Deux méthodes sont possibles :

- calculer les moments négatifs du mélange en appliquant une quadrature de Gauss :

$$(73) \quad \left\{ \begin{aligned} \int t_1^m(E) t_2^n(E) \frac{dE}{\Delta E} &= \sum_{i,j} p_{1,j} t_{1,i}^m p_{2,j} t_{2,j}^n \\ \int x_1(E) t_1^m(E) t_2^n(E) \frac{dE}{\Delta E} &= \sum_{i,j} p_{1,i} x_{1,i} t_{1,i}^m p_{2,j} t_{2,j}^n \end{aligned} \right.$$

valable quels que soient m et n, positifs ou négatifs ;

- en composant les moments positifs des tables de probabilité. Ces tables, bien qu'établies à partir de moments négatifs de $\sigma_t(E)$, sont décrites par la suite des moments positifs - cette suite étant, à partir d'un certain ordre, différente de la suite des moments positifs vrais (cette différence contient l'information sur les moments négatifs). La composition des moments positifs d'une table de probabilité établie à partir de moments négatifs devrait donc implicitement traiter cette information sur les moments négatifs.

Ces deux méthodes sont strictement équivalentes pour les moments positifs. Nous devons vérifier leurs qualités pour la composition des moments négatifs.

IX.3 - Conditions de la vérification numérique de la composition des moments

Si on génère aléatoirement une section efficace $t_1(E)$ (et les partielles correspondantes), et, indépendamment, une section efficace $t_2(E)$, on peut calculer les sections efficaces de leur mélange en fonction de l'énergie, par exemple:

$$(74) \quad \begin{cases} t(E) = \frac{1}{2} (t_1(E) + t_2(E)) \\ x(E) = \frac{1}{2} (x_1(E) + x_2(E)) \end{cases}$$

puis les sections effectives correspondantes.

On peut aussi calculer les tables de probabilité T_1 et T_2 de chacun de ces 2 noyaux, composer ces tables et calculer les sections effectives.

Les résultats seront toujours différents, car le mélange défini par les formules 74 constituent un cas particulier de mélange, alors que la combinaison des tables T_1 et T_2 constitue une moyenne statistique sur toutes les sections $t_1(E)$ et $x_1(E)$, $t_2(E)$ et $x_2(E)$ décrites par les moments de T_1 et T_2 .

Nous avons effectué des calculs sur un cas type (en fait le 238 U):

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{résonances "s" seulement : } \bar{D} = 22 \text{ eV} \\ S_0 = 1,05 \cdot 10^{-4} & \Gamma_Y = 0.0229 \text{ eV} \\ R_p = 9,184 \text{ fm} & T_{\text{eff}} = 300 \text{ K} \\ \text{1 zone statistique de 4250 à 4750 eV} \end{array} \right.$$

Les paramètres étaient générés par une méthode régularisée (Ri 85, Ri 86a), diminuant fortement les fluctuations. Nous avons traité 32 cas (les mêmes caractéristiques moyennes sont prises pour les noyaux 1 et 2).

La figure 14 représente la dispersion du rapport :

$$R = \frac{\sigma_c \text{ eff (mélange calculé par T.P.)}}{\sigma_c \text{ eff (mélange calculé directement)}}$$

pour une dilution de 20 barns ; la valeur moyenne de R , déterminée d'après les 32 cas étudiés est :

$$R = 0.99816 \pm 0.00202 \text{ (écart type)}$$

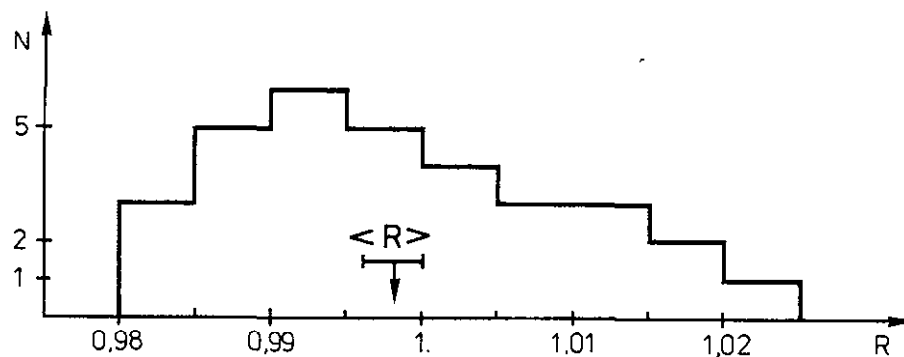


Figure 14

Figure 14 - Etude du mélange de 2 noyaux en proportions égales. Distribution de R , rapport de la section effective de capture calculée par composition des moments, à celle calculée directement à partir de $\sigma(E)$ du mélange pour une dilution de 20 barns. Les tables de probabilité utilisées pour ce calcul sont établies sur les moments positifs, et leur composition ne pose pas de problème de principe ; la précision relative sur $\sigma_{c,eff}$ (composition des moments) est d'environ 10^{-5} . La statistique porte sur 32 cas, N est le nombre de valeurs de R par intervalle de 0.005 unité. L'écart type de la distribution de R est $\epsilon = 0.0114$.

Il n'apparaît donc pas d'écart significatif ; mais, pour pouvoir garantir que cet écart est inférieur à 10^{-3} , il faudrait une précision statistique de l'ordre de $1/3 \cdot 10^{-3}$, c'est à dire 6 fois meilleure que celle que nous obtenons : il faudrait donc traiter plus de 1000 cas de mélanges aléatoires.

On ne peut donc juger de la qualité des résultats obtenus par composition des tables de probabilité en se référant aux calculs directs du mélange (formule 74), d'autant plus que nous voulons juger de cette qualité avec des précisions allant jusqu'à 10^{-5} . Nous avons donc été amené :

- à prendre comme référence les résultats obtenus à un ordre élevé (ordre 9), éventuellement extrapolé ;

- des désaccords apparaissant sur ces références, nous avons d'abord étudié un modèle théorique analytique.

Remarques 1) On aurait pu vouloir effectuer les calculs à des ordres encore plus élevés afin de mieux définir la "référence" ; mais des difficultés numériques apparaissent déjà, dans certains cas, à l'ordre 9 (par exemple la composition des moments positifs à l'ordre 9 implique le calcul de moments d'ordre 17).

2) La détermination de la table de probabilité résultant de la composition de 2 (ou plus) tables de probabilité élémentaires implique la définition de 3 ordres:

- 1'ordre NE des tables de probabilité élémentaires. Cet ordre peut être différent d'une table à une autre : soit NE1, NE2, ... ; pour simplifier nous prendrons toujours NE1 = NE2 = NE ;

- 1'ordre NC de composition : par exemple on compose les moments positifs jusqu'au moment d'ordre : $2 * NC - 1$;

- 1'ordre NM de la table du mélange : 1'ordre NC de la table calculée avec $2 * NC$ moments peut être réduit à une valeur $NM < NC$ sans trop perdre en précision parce que les fluctuations du mélange sont plus faibles que celles du noyau élémentaire.

Par exemple, si les noyaux élémentaires sont définis par des tables d'ordre NE = 5, la composition de leurs moments positifs peut être effectuée jusqu'à 1'ordre NC = 7, d'où une table d'ordre 7 définie sur ces moments positifs. Cette table définit aussi des moments négatifs, et on peut, sur l'ensemble des moments négatifs et positifs, définir une table d'ordre réduit NM = 3 ou 4 qui décrira correctement le mélange.

La distinction entre NC et NM n'existe pas lorsque l'on ne traite que des moments positifs, ou lorsque l'on calcule les moments négatifs par une quadrature de Gauss.

IX.4 - Modèle analytique - Ce modèle doit permettre :

- le calcul des moments ;
- le calcul de la convolution des distributions de probabilité des sections efficaces de chaque noyau ;
- le calcul des sections effectives.

Nous avons supposé que, pour chacun des 2 noyaux élémentaires, était distribué suivant la loi:

$$(75) \quad \begin{cases} p(\sigma) d\sigma = C e^{-a\sigma} d\sigma & 1 \leq \sigma \leq S \\ \text{avec : } C = \frac{a}{e^{-a} - e^{-aS}} \end{cases}$$

les sections efficaces partielles étant données par :

$$(76) \quad \begin{cases} x = \varepsilon + k \sigma \\ y = \sigma - x \end{cases}$$

avec : $0 \leq \varepsilon \leq 1$ $0 \leq k \leq 1$

On dispose donc de 4 paramètres : a, S, ε, k .

La distribution de la section efficace totale du noyau mélange résulte de la convolution de 2 lois $p(\sigma)$, et est donnée par :

$$(77) \quad \begin{cases} r(\sigma) d\sigma = \mathcal{C}(\sigma-1) e^{-2a\sigma} d\sigma & 1 \leq \sigma \leq \frac{1+S}{2} \\ r(\sigma) d\sigma = \mathcal{C}(S-\sigma) e^{-2a\sigma} d\sigma & \frac{1+S}{2} \leq \sigma \leq S \\ \text{avec : } \mathcal{C} = \frac{4a^2}{(e^{-a} - e^{-aS})^2} \end{cases}$$

Il est possible de calculer analytiquement tous les moments de $p(\sigma)$ et de $r(\sigma)$ (qui s'expriment en fonction de E_n , exponentielle intégrale), ainsi que les sections effectives (exprimées en fonction de E_1 ; on peut donc composer les tables de probabilité et comparer le résultat à une référence.

Les résultats reportés ci-après concernent y (76) calculée avec :

$$a = 0.1 \quad S = 50 \quad \varepsilon = 0.9 \quad k = 0.7$$

pour 3 dilutions = $d = 1, 20, 500$.

Nous avons limité le nombre de résultats reportés dans ce rapport.

Rappelons que le critère est la section efficace effective.

Précisions données par les tables de probabilité établies directement sur le mélange - Les valeurs sont données dans le tableau 6.

Ces valeurs constituent une référence pour juger de la qualité du résultat obtenu par composition des moments.

Tableau 6 - Précisions relatives obtenues sur $\sigma_{c,eff}$ calculées par des tables de probabilité établies directement sur le mélange. Ces valeurs constituent l'erreur minimum qu'on peut espérer atteindre par composition des tables de probabilité des noyaux élémentaires. Les erreurs sont données en 10^{-3} .

SDIL =	1			20			500		
ordre de la T.P.	3	6	9	3	6	9	3	6	9
T.P. sur moments positifs	72	5.8	.48	.75	<.001	0	<.001	0	0
T.P. sur moments positifs et négatifs (choix "normal")	4.0	.0045	0	3.2	.014	0	.0018	0	0

Précision des tables du mélange établies par composition des tables élémentaires - Ainsi que nous l'avons souligné, ces résultats dépendent de plusieurs paramètres. Nous avons reporté ceux établis dans le cas de tables élémentaires d'ordre NE = 3 (figure 15 A), NE = 6 (figure 15 B) et NE = 9 (figure 15 C).

Influence de NC - Elle est illustrée dans le cas NE = 6, à partir de NM = 9 : en réalité NM est l'ordre de composition de la table, que l'on peut réduire : ce sont les 3 flèches successives partant de ce point.

Bilan - Il n'y a pas de problème pour les grandes dilutions. Pour les dilutions moyennes et faibles, il apparaît une perte de précision d'un facteur 1,5 à 50 par rapport à ce que donnerait un calcul direct sur σ (E) du mélange (Tableau 7).

Tableau 7 - Modèle analytique - Comparaison des précisions relatives obtenues pour des tables d'ordre 6. Les erreurs sont en 10^{-3} .

Dilution	Noyaux élémentaires	Calcul direct	Mélange des 2 noyaux		
			Calcul par T.P.		
			Positive	Positive et négative	
				quadrature de GAUSS	moments positifs
20	0.060	0.014	< 0.001	0.021	0.0041
1	0.023	0.005	5.8	0.25	5.1
					3.1(+)

+ Composition à l'ordre 9, et réduction à l'ordre 6.

Figures 15 A, B, C - Modèle théorique, résultats du mélange de 2 noyaux élémentaires identiques en proportions égales. L'erreur sur $\sigma_{\text{eff}}(d)$ est calculée d'après les T.P. du mélange pour:

- 3 ordres des tables élémentaires: NE=3 (fig. 17 A), NE=6 (fig. 17B), et NE=9 (fig. 17 C)
- 3 dilutions : 1, 20 et 50 barns.

L'erreur est portée en fonction de l'ordre NM de la table secondaire, établie selon 3 méthodes différentes:

- a) d'après des T.P. élémentaires ne décrivant que les moments positifs (courbe en tirets);
- b) d'après des T.P. élémentaires décrivant des moments négatifs et des moments positifs en calculant par quadrature les moments négatifs et positifs du mélange (courbes en traits pleins);
- c) d'après des T.P. élémentaires décrivant des moments négatifs et des moments positifs, par composition des moments positifs (courbes en pointillés).

Les cas a) et b) sont équivalents, tant que $N < NE/2$, car les moments positifs pris en compte sont alors les mêmes.

Lorsque NM devient nettement plus grand que NE, la précision donnée par la méthode c tend vers celle de la méthode b.

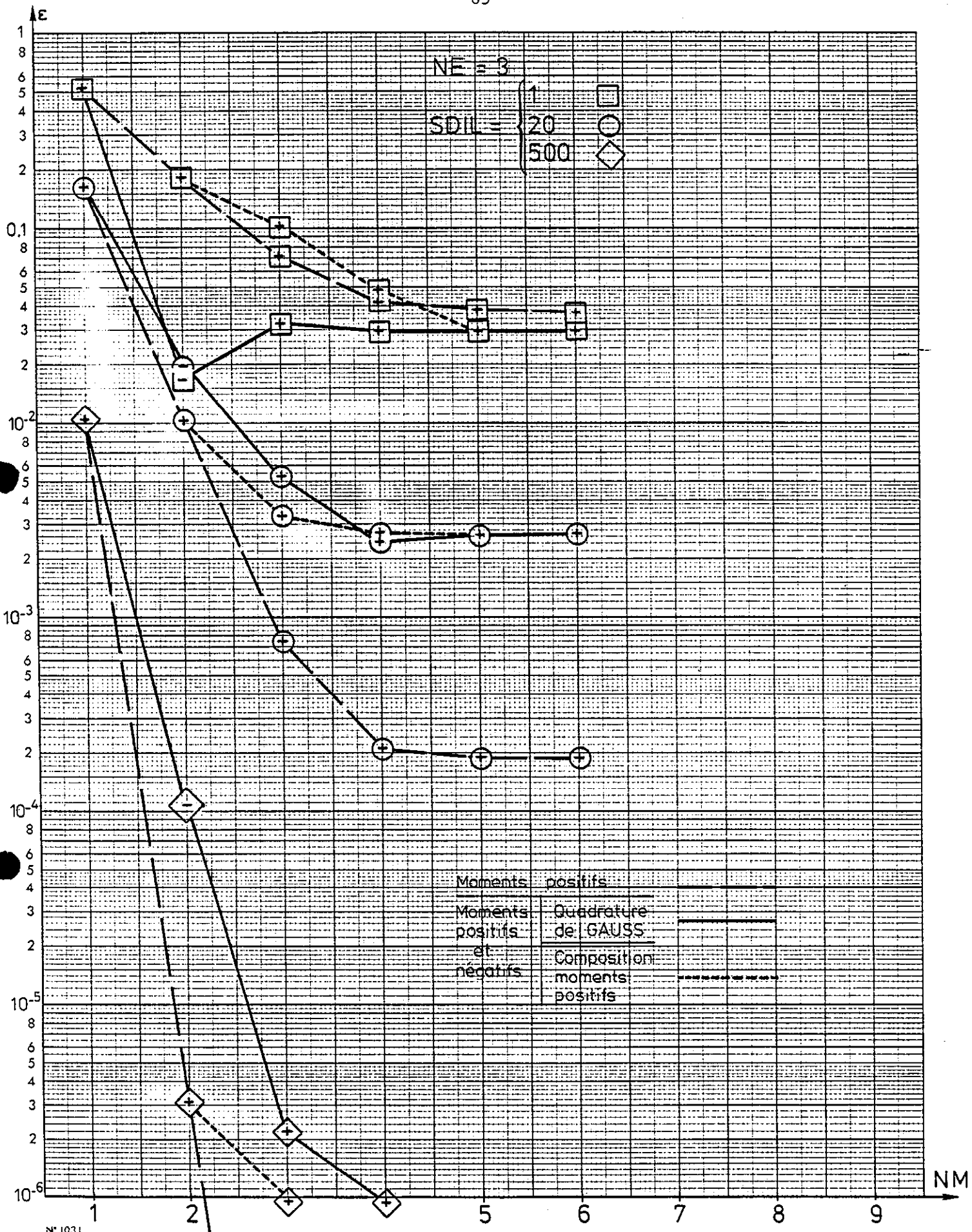


Figure 15 a

NE = 6

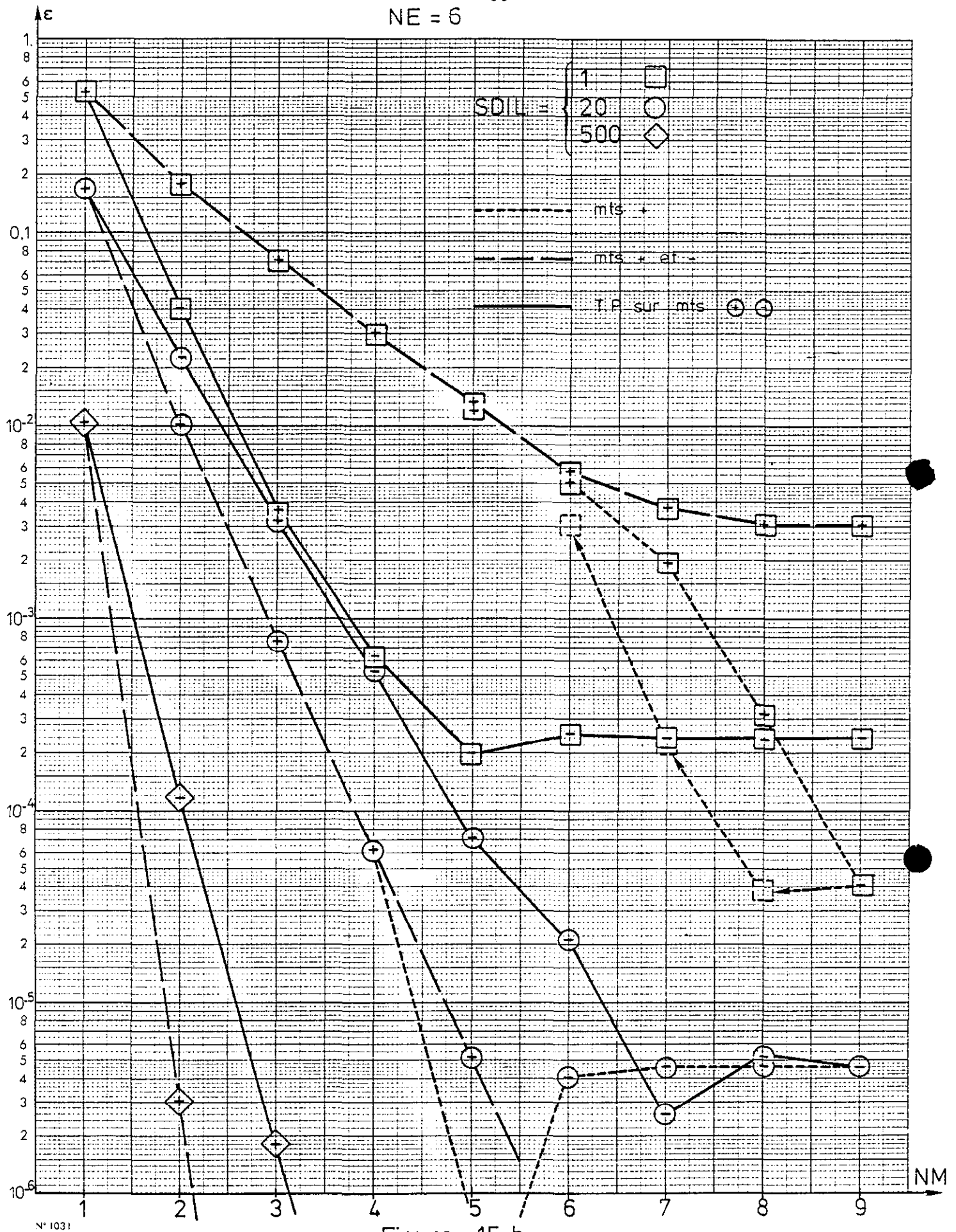


Figure 15 b

N° 1031

30/10/77

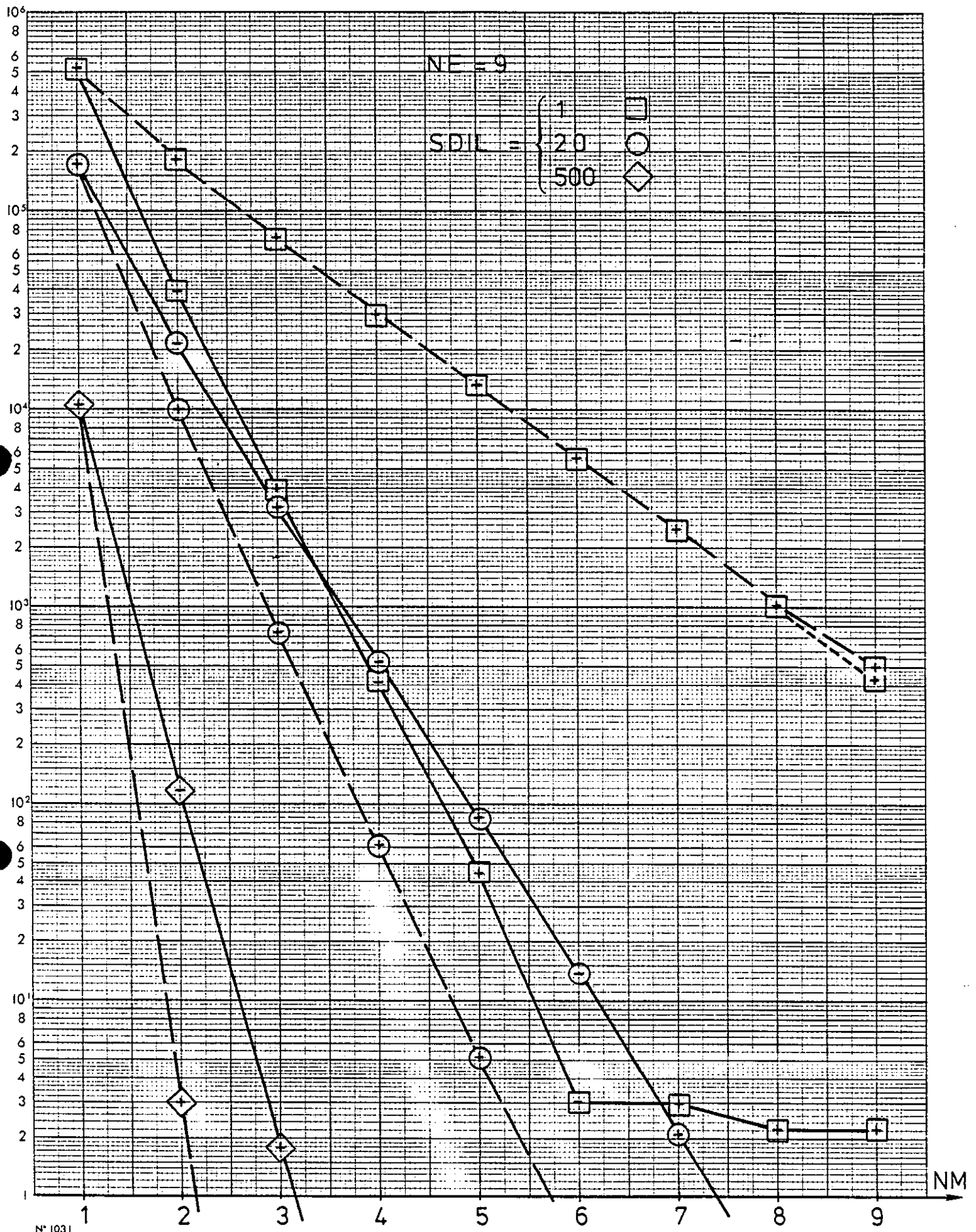


Figure 15 c

IX.5 - Conclusion - Nous avons aussi effectué des calculs avec des cas réels ; mais, ainsi que nous l'avons expliqué, l'interprétation des résultats est difficile car on ne possède pas de référence. Un problème apparaît : les valeurs extrapolées (que nous voulions prendre comme référence) diffèrent selon que les tables de probabilité sont construites par quadrature de GAUSS ou par combinaison des moments positifs.

Globalement, nous concluons que la composition des tables de probabilité établies sur des moments négatifs et positifs est possible, que la méthode de la quadrature paraît meilleure, mais qu'il en résulte une perte de précision. Il faut étudier ce phénomène (aléatoire, ou systématique) qui doit être comparé à la dispersion aléatoire des résultats obtenus par le calcul direct des mélanges (1% dans notre exemple - cf. § VIII.3).

X - REUNION DE DOMAINES D'ENERGIE ADJACENTS

Outre le calcul de mélanges de noyaux, une opération fréquente consiste à calculer le résultat (au sens sections efficaces) de la réunion de 2 groupes adjacents. Cela est impossible avec la seule connaissance de $\sigma_{\text{eff}}(d)$ pour chacun des groupes*. C'est immédiat avec les T.P. définies par les moments.

Le moment résultant R de la réunion des groupes k et l est en effet donné par (en notant K et L les moments des groupes k et l) :

$$\begin{aligned} R_n &= \int_{\Delta E_k + \Delta E_l}^n \frac{\sigma_t(E) dE}{\Delta E_k + \Delta E_l} \\ &= \frac{1}{\Delta E_k + \Delta E_l} \left(\int_{\Delta E_k}^n \sigma_t(E) dE + \int_{\Delta E_l}^n \sigma_t(E) dE \right) \\ &= \frac{\Delta E_k K_n + \Delta E_l L_n}{\Delta E_k + \Delta E_l} \end{aligned}$$

Les moments résultants sont donc une somme pondérée des moments des différents groupes réunis. La prise en compte d'une dépendance avec l'énergie du flux de pondération des sections efficaces ne ferait que changer les facteurs de pondération.

Remarque importante : Il faut souligner qu'il est théoriquement faux de faire une moyenne pondérée des T.P. ; cela est général : quand on interpole, il faut interpoler les moments. Les T.P. constituent la représentation de l'information, mais toute algèbre doit être effectuée sur les moments.

* Nota: cela est aussi possible avec les formalismes faisant intervenir des taux de réaction.

CONCLUSION

Nous avons essayé de généraliser et de rendre plus rigoureux le concept de "table de probabilité" introduit il y a une quinzaine d'années. En les définissant par les moments, nous basons ce concept sur des théories mathématiques bien établies et fructueuses ; nous rendons aussi possible toute une algèbre basée sur ces moments.

Les T.P. constituent des données fondamentales qui transforment toute intégrale sur les énergies en une quadrature de GAUSS. Si l'application est évidente pour le calcul des sections effectives, elle existe aussi pour le traitement du transport.

En dehors d'une utilisation pour le calcul des sections effectives, les tables de probabilité sont peu utilisées en neutronique analytique (elles le sont un peu plus pour les calculs par Monte Carlo). Elles devraient permettre :

- une description simple mais aussi exacte que requis de tout mélange de noyaux pour toute gamme d'énergie ; mais cela suppose leur extension aux cas non statistiques (vers les basses énergies) ;
- des calculs de transport en associant à chaque section totale discrète un flux dont le comportement spatial sera différent : c'est le principe de la méthode des sous-groupes.

L'extension aux cas non statistiques implique notamment :

- la prise en compte du ralentissement ;
- la prise en compte du recouvrement non aléatoire des résonances.

Nous donnons, en annexe, un aperçu des solutions pour ces extensions.

Une approche du traitement du transport par la méthode des sous-groupes est considérée par ailleurs [B085].

REMERCIEMENTS - Au fil des ans plusieurs personnes se sont intéressées ou ont participé à ce travail. Nous citerons, et nous remercions de leur intérêt, Messieurs A. Kavenoky, P. Reuss, H. Tellier, R. Westfall, V. Sauvinet.

Nous remercions également la Société BE FRANCE pour la préparation du texte et des figures.

REFERENCES

- Ag 85 - P. AGERON et P. RIBON, "Description par une formulation du type "sous-groupes" des sections effectives en fonction de la dilution", note SERMA-T-1673 (1985).
- Ak 65 N. I. AKHIEZER, "The classical moments problem", OLIVER and BOYD, ed. (1965).
- Ba 65 G.A. BAKER Jr, "The theory and application of PADE approximant method", Adv. Theor. Phys. 1, 1 (1965).
- Ba 75 G.A. BAKER Jr, "Essential of PADE approximants", Academic Press New York (1975).
- Ba 80 G.A. BAKER Jr, "The PADE Approximants in Theoretical Physics", Academic Press, New York (1980).
- Bo 55 A.D. BOOTH, "Numerical methods", BUTTERWORTHS SCIENTIFIC PUBLICATIONS, Londres 1955 (p. 37-41).
- Bo 85 S. BOUAUDIA et alii, "Contribution à l'étude de l'équation du transport par une méthode de tables de probabilités pour des géométries à une dimension dans le cas isotrope", note SERMA T-1671 (1985).
- Br 80 C. BREZINSKI, "PADE - type approximation and general orthogonal polynomials", BIRKHAUSER VERLAG, Basel (1980).
- Ch 77 J.S.R. CHISHOLM, "N-variable rational approximants", dans "PADE and Rational Approximation", édité par E.B. SAFF et R.S. VARGA, Academic Press, 1977 (p. 23 à 42).
- Cu 74 D.E. CULLEN, "Application of the probability table method to multi-group calculations of neutron transport", Nucl. Sc. Eng. 55, 387-400 (1974).

- Cu 77 D.E. CULLEN, "Calculation of Probability Table parameters to include intermediate resonance self-shielding", UCRL 79761 ; ANS Winter Meeting, San Francisco, Nov. 1977 (CONF 771109-8).

D.E. CULLEN, "Correction of Probability table parameters to include intermediate resonance self-shielding", UCRL 79761 (1977).

- Cu 78 D.E. CULLEN et alii, "Cross section probability tables in multi-group transport calculations", RSIC Seminar-Workshop, Oak Ridge, Mars 1978 ; CONF 780334-1 ; aussi reprint UCRL-80655.

- Cu 80 D.E. CULLEN, "Program GROUPIE : calculation of BONDARENKO self-shielding neutron cross-sections and multiband parameters from data in the ENDF/B format", UCRL 50400, 17, D (1980).

D.E. CULLEN and G.C. POMRANING, "The multiband method in radiative transfer calculations", J. Quant. Spect. Radiat. Transfer, 24, 97-117, 1980.

- Cu 83 Annie A.M. Cuyt, "Multivariable PADE - Approximants", J. Math.-Anal. Appl., 96, 283-293 (1983).

- Dr 83 A. DRAUX, "Polynômes orthogonaux formels", Lecture notes in mathematics, 974, SPRINGER-VERLAG (1983).

- Go 71 P. GOVAERTS, "Notes sur la physique des réacteurs à neutrons rapides", rapport PNR/SETR - R - 041 (Mars 1971).

- Kh 72 A. KHAIRALLAH et J. RECOLIN, "Calcul de l'autoprotection résonnante dans les cellules complexes, par la méthode des sous-groupes, AIEA-SM-154/37 (1972).

- Le 72 L.B. LEVITT, "The probability table method for treating unresolved neutron resonances in Monte-Carlo calculations", Nucl. Sci. Eng. 49, 450-457 (1971) ; abrégé Trans. Am. Nucl. Soc., 14-2, 648-649 (1971).

- Mu 81 J.G. MUNOZ-COBOS, "PAPIN: a Fortran IV program to calculate cross-section probability tables,... in the unresolved resonance region", ORNL/TM-7883, ENDF 310 (1981).

- Ni 63 M.N. NIKOLAEV et V.V. FILIPPOV, "Mesure des paramètres de résonances des sections efficaces totales de certains éléments pour des neutrons de 0.3 à 2.7 MeV", Energie Atomique, traduction de Atomnaia Energiia, 15, 6, p. 68 (1963).
- Ni 69 M.N. NICOLAEV et V.F. KHOKHLOV, "Système de constantes en sous-groupes", INDC(CCP) 4/G (1969).
- Ni 70 M.N. NICOLAEV et alii, "Méthode des sous-groupes pour la prise en compte de la structure résonnante des sections efficaces dans les calculs neutroniques (1ère partie)", Atomnaia Energiia (1970).
- Ot 71 J.M. OTTER, "Application of the Probability Table method of treating unresolved resonances to an analytical calculation", Trans. Am. Nucl. Soc., 14-2, 649-650 (1972).
- Ot 72 J.M. OTTER et alii, "U3R, A code to calculate unresolved resonance cross-section probability tables", AI-AEC-13024 (1972).
- Pl 71 E.F. PLECHATY et alii, "Application of the probability table method to practical problems", UCRL-79759 ; ANS-Winter meeting, Nov. 1977, San Francisco (CONF 771109-41).
- Re 84 P. REUSS, communication privée.
- Ri 85 P. RIBON et alii, "Etude des méthodes de calcul de l'autoprotection dans les résonances", CEA-N-2426/NEACRP-A-696 (1985).
- Ri 86 P. RIBON et alii, à paraître.
- Ri 86a P. RIBON, "Resonance self shielding calculation with regularised random ladders", Annals of Nucl. En., 13,4, p. 209 (1986).
- Sz 59 G. SZEGO, "Orthogonal Polynomials", American Mathematical Society, 1959.
- Wa 74 P.J.S. WATSON, "Two-variable rational approximants: a new method", J. Phys. A, Vol. 7, n°18 (1974) L167.

ANNEXES

L'extension aux cas non statistiques

Nous évoquons brièvement, dans cette annexe, trois des extensions que nous envisageons ou étudions.

1 - Prise en compte du ralentissement - L'hypothèse statistique signifie qu'un neutron est diffusé dans la table de probabilité proportionnellement aux p_i quelle que soit son origine.

Au contraire, une description plus réaliste implique une probabilité de renvoi ω_{ji} du sous-groupe j vers le sous-groupe i dépendant de j et i (dans l'hypothèse statistique, $\omega_{ji} = p_i q_j$). Cela se traduira par un tableau des probabilités à double entrée, qui décrira la corrélation des sections efficaces sur la largeur de ralentissement.

Le calcul de ces tables implique le calcul des comoments sur la longueur de ralentissement par une intégrale double du type :

$$c_{mn} = \int_{\text{groupe}} \sigma^m(E) dE \int_E^{E/\alpha} \sigma^n(E') dE'$$

Ces comoments seront égaux aux valeurs données par la table de probabilité :

$$c_{mn} = \sum_{ji} \omega_{ji} \sigma_j^m \sigma_i^n$$

Il nous paraît donc possible de nous affranchir de l'hypothèse statistique par une table de probabilité croisée ; mais il faudra résoudre :

- le mélange de noyaux (avec des valeurs de α différentes) ;
- la réunion de groupes adjacents en énergie (corrélation des sous-groupes d'un groupe avec ceux du groupe inférieur) ;
- une représentation simplifiée de la table (pour la description des cas quasi-statistiques).

2 - Mélange non statistique de noyaux - Cela ne pose pas de problème de principe si on se restreint aux moments positifs (cf. § VIII.1) : il suffit de connaître toutes les valeurs des comoments.

$$C = \langle \begin{matrix} n & m \\ t_1 & t_2 \end{matrix} \rangle$$

$$D = \langle \begin{matrix} n & m \\ t_1 & t_2 \end{matrix} \begin{matrix} x_1 & x_2 \end{matrix} \rangle$$

grandeurs qui sont indépendantes des proportions des constituants du mélange et peuvent être calculées une fois pour toutes et tabulées.

Mais d'une part nous ne savons pas comment tenir compte des comoments négatifs ; d'autre part le nombre d'informations à introduire peut être inutilement très grand : pour chaque couple de noyaux, il faudrait en plus $(N-1)*(2N-1) \# 2N^2$ comoments. De plus le nombre d'informations nécessaires croît pour des mélanges ternaires, quaternaires, ... alors que l'on tend vers la statistique.

Le nombre d'informations nécessaires au calcul du mélange doit pouvoir être réduit dans la plupart des cas pratiques, et nous avons considéré 3 méthodes (il ne faut pas oublier que les moments calculés doivent être cohérents) :

1 - un modèle mathématique simple - en écrivant par exemple que les 2 noyaux t_1 et t_2 comportent une partie commune τ , qui décrira la corrélation, et des parties indépendantes T_1 et T_2 :

$$\begin{cases} t_1 = T_1 + \tau \\ t_2 = T_2 + \tau \\ T_1, T_2, \tau \text{ statistiquement indépendants.} \end{cases}$$

Les valeurs de $\langle \tau^n \rangle$ seront déduites du tableau des comoments.

Un tel modèle assure la cohérence des moments calculés, mais implique des choix qui peuvent sembler arbitraires (quels comoments doivent être pris en compte pour décrire $\langle \tau^n \rangle$?).

2 - Ainsi que le montre la figure A-1, les comoments C_{mn} ont une variation très régulière avec leurs indices. Une utilisation immédiate de cette dépendance nécessiterait peu de données, mais ne respecterait sans doute pas la cohérence des moments calculés.

3 - La méthode qui nous semble actuellement la plus prometteuse repose sur l'introduction d'une T.P. croisée ω_{mn} . Le nombre d'informations nécessaires (en plus des T.P. propres à chaque noyau) est $(N-1)^2 \# N^2$: cela implique un choix parmi les $2 N^2$ comoments à écrire (on retrouve l'ambiguïté inhérente aux approximations de PADE à 2 dimensions).

L'utilisation de cette méthode, telle que, présente un paradoxe : le nombre d'informations $\omega_{ijkl...}$ nécessaire augmentera avec le nombre v de noyaux mélangés, à peu près comme N^v , alors que le mélange devient de plus en plus statistique ! En réalité l'information intéressante, à enregistrer, est l'écart au cas statistique, i.e. :

$$d_{ijkl...} = \omega_{ijkl...} - p_i p_j p_k p_l \dots$$

i, j, k, l symbolisant les différents noyaux du mélange. Il devrait suffire de quelques éléments d pour caractériser l'écart à l'hypothèse statistique.

Il faut par ailleurs remarquer que des noyaux tels que ^{235}U ($\bar{D} \# 0,5$ eV) et ^{238}U ($\bar{D} \# 20$ eV) doivent pouvoir être considérés comme "statistiquement indépendants", sauf à basse énergie (résonance à 6 eV du ^{238}U) ; il doit donc être possible de traiter un mélange de N noyaux en les séparant en groupes de noyaux semblables, à fort recouvrement (tels ^{232}Th , ^{238}U , ^{240}Pu) mais pratiquement "statistiquement indépendants" d'autres groupes de noyaux (tels que ^{233}U , ^{235}U).

3 - Interaction de 2 milieux contenant le même noyau à des températures différentes. La corrélation est alors quasi-totale.

Par analogie au paragraphe précédent, nous suggérons de représenter l'écart à cette corrélation totale, i.e. :

$$d_{ij} = \omega_{ij} - \delta_{ij} p_i$$

δ_{ij} étant le symbole de Kronecker.

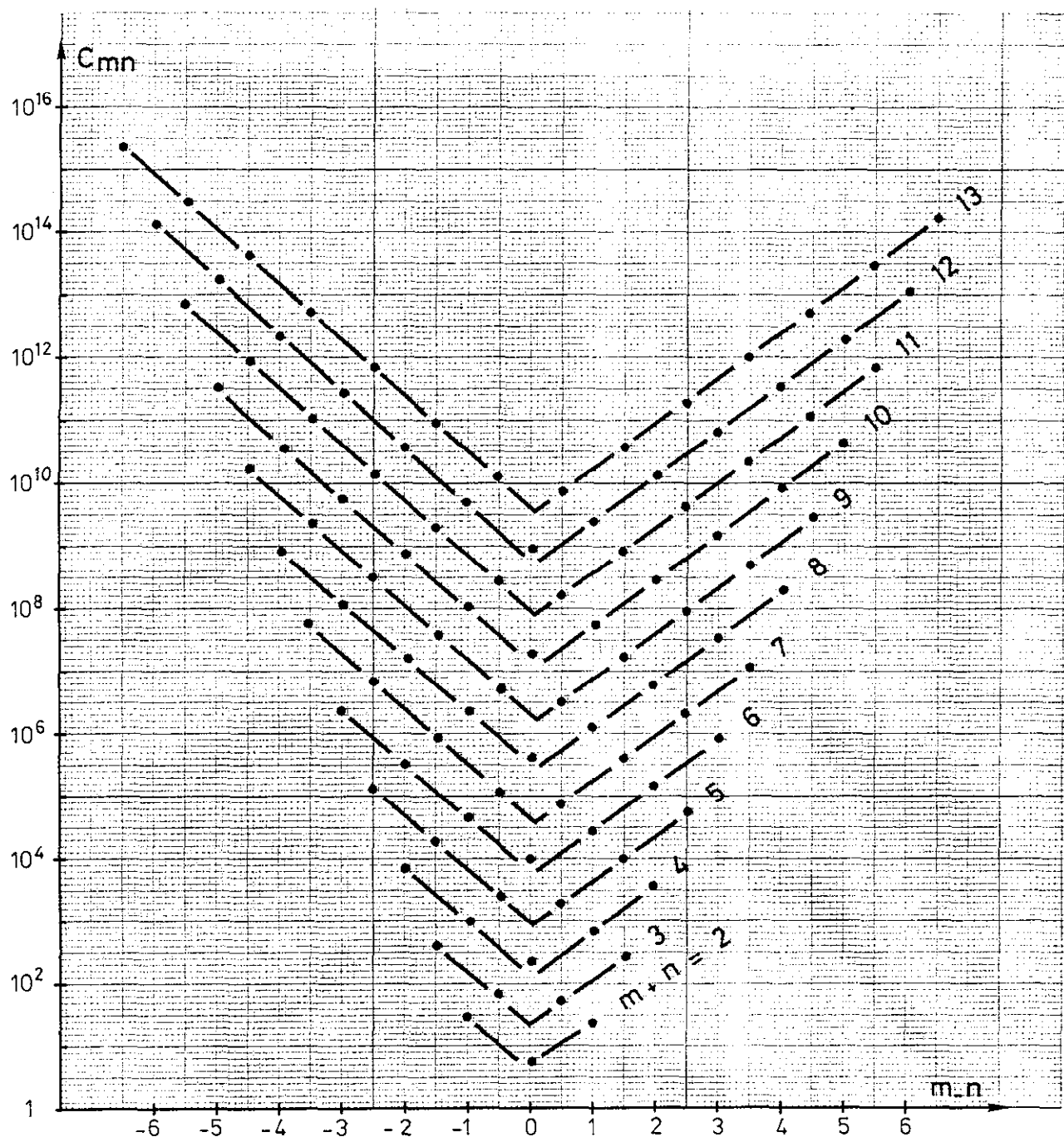


Figure A1 : Distribution des comoments C_{mn} :

$$C_{mn} = \frac{1}{\Delta E} \int_{t1}^m \sigma(E) \int_{t2}^n \sigma(E) dE$$

Les distributions sont centrées sur la diagonale $m=n$: on a donc porté C_{mn} en fonction de $(m-n)$; les lignes tracées relient les comoments à $(m+n)$ constant.

Cette figure illustre clairement la régularité des distributions. Ces données correspondent au couple $^{238}\text{U} - ^{232}\text{Th}$ dans un groupe du domaine résolu (< 4 keV).