Mathématiques et énergie nucléaire

Jean-Christophe Trama

CEA, DEN, SERMA, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Mathématiques, probabilités et statistiques.

Qui ne se rappelle avoir attendu avec excitation la sortie d'un 6 pour sortir du box de départ ou d'un 1 pour rentrer dans l'écurie lors d'une partie de petits chevaux ? Le dé à 6 faces, comme le jeu de pile ou face, sont deux illustrations ludiques de la notion de *hasard*. Mais si c'est bien un fait qu'il n'est pas possible de prédire l'issue d'un jet de dé, cela ne signifie pas pour autant qu'on ne puisse rien en dire d'autre. En supposant que le dé n'est pas truqué, on peut en effet annoncer que chaque nombre de 1 à 6 a autant de chances de sortir lors d'un jet. On peut rajouter que deux lancers successifs donneront deux résultats indépendants, ou en d'autres termes que le fait d'obtenir par exemple un 6 lors d'un premier jet n'affectera en rien l'issue d'un deuxième jet. En particulier le joueur gardera une chance sur 6 d'obtenir un deuxième 6 ou n'importe quelle autre valeur parmi les possibles. La branche des mathématiques qui s'occupe de ces événements *hasardeux* s'appelle probabilités. Elle permet de formaliser dans un langage rigoureux un grand nombre de situations. Le lancer d'un dé à 6 faces s'apparente à une expérience de la pensée, que l'on appellera une variable aléatoire, dont les valeurs possibles sont les nombres de 1 à 6. Le résultat d'un lancer effectif, donc un des nombres de 1 à 6, sera appelé réalisation de cette variable aléatoire. L'information qui nous dit que l'on a autant de chances d'avoir une réalisation égale à 1, 2, 3, 4, 5 ou 6 s'appelle la loi de cette variable aléatoire. L'information qui nous dit que deux tirages successifs du dé, c'est-à-dire deux réalisations successives, n'ont pas de lien peut également se formaliser mathématiquement avec la notion d'indépendance de deux variables aléatoires : le premier et le second lancer de dé. Tout l'enjeu des probabilités est de construire des informations sur les lois de variables aléatoires, rencontrées ou bien dans des situations concrètes de sciences autres que mathématiques (physique, biologie, économie etc.) ou bien dans le contexte des mathématiques pour elles-mêmes.

Dans l'univers mathématiques, les probabilités ont une branche sœur : les statistiques. Les statistiques ont pour objet, à partir de l'observation des réalisations d'un variable aléatoire, de remonter aux lois de la variable aléatoire. Par exemple, supposons qu'une personne ignore a priori si un dé à 6 faces est truqué. Comme cette personne dispose du dé en question, elle peut s'amuser à le lancer un grand nombre de fois consécutivement et de façon indépendante, et noter la suite des valeurs obtenues. En observant cette série elle peut obtenir des informations sur le dé lui-même. Regardons par exemple la série suivante : 6 2 3 Difficile d'en tirer quelque chose n'est-ce pas ?

Les joueurs de dés
Murillo

Considérons maintenant : 6 2 3 4 2 6 5 4 2 4 5 6 3 2 4 3 5 6 2 6 5 3 4 2 3 4 5 6 2 3 4 5 4 4 6 5 2 3 4 5 2 4 5 6 6 3. Voilà 38 résultats successifs, et pas une seule fois le nombre 1 n'est sorti : est-ce normal ?
On ne peut pas affirmer directement que c'est normal ou pas, en revanche voilà ce que l'on peut dire : si le dé n'est pas truqué, à chaque réalisation il y a 1 chance sur 6 d'avoir 1 et 5 chances sur 6 d'avoir autre chose que 1. En termes mathématiques on dira que la réalisation de l'événement *j'obtiens 1* a une probabilité de 1/6, alors que la réalisation de l'événement *j'obtiens autre chose que 1* a une probabilité de 5/6. La théorie des probabilités nous dit également que la probabilité de l'occurrence de deux événements indépendants est le produit des probabilités des deux événements pris séparément. En étendant ceci à 38 événements indépendants nous pouvons en conclure que :
Si le dé n'est pas truqué, la probabilité d'obtenir 38 fois de suite, de manière indépendante, un résultat différent de 1 est : $(5/6)^{38}$, soit $9{,}8 \times 10^{-4}$, ou encore moins d'une chance sur 1000 ($9{,}8 \times 10^{-4} < 1/1000$).
Certes l'observateur d'une telle série de jets de dés ne pourra pas garantir absolument que le dé est truqué, mais il pourra en revanche affirmer qu'il y a 999 chances sur 1000 qu'il le soit !
Car s'il ne l'était pas, il n'y aurait qu'une chance sur 1000 d'obtenir 38 tirages successifs et indépendants différents de 1.

Résumé :

Les probabilités nous donnent des informations sur les lois des variables aléatoires, comme par exemple : pour un dé non truqué on a autant de chances d'avoir 1, 2, 3, 4, 5 ou 6.

Les statistiques nous permettent à partir de réalisations de variables aléatoires de faire des hypothèses sur la loi des variables aléatoires concernées : par exemple décider à partir de résultats de jets d'un dé s'il est truqué ou non.

Physique nucléaire, probabilités et statistiques.

En mécanique classique nous disposons de modèles déterministes. Dit autrement : quand les conditions d'entrée d'une expérience sont parfaitement connues on obtient à l'issue de l'expérience toujours le même résultat.

Prenons par exemple l'exemple classique du choc élastique de deux boules de pétanque, l'une à l'arrêt, la seconde en mouvement. Si l'on connaît exactement la vitesse de la boule incidente, le point d'impact, les dimensions des boules et les masses des deux boules on peut très exactement prédire la trajectoire comme la vitesse des deux boules après le choc. Le modèle de choc est déterministe. Quiconque a jamais joué à la pétanque, au bowling, ou à tout autre jeu approchant, sait pourtant combien aléatoire est le résultat de deux lancers de boules… C'est simplement qu'il est absolument impossible à un humain de lancer exactement de la même façon deux fois de suite une boule ! Mais si c'était possible, les trajectoires des boules seraient rigoureusement identiques.

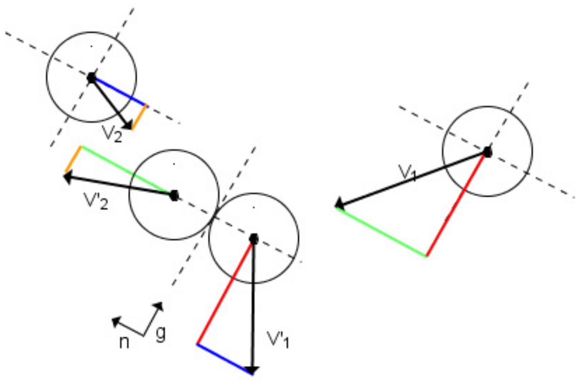


Figure 1 : Collision élastique de 2 boules de même masse
Wikipedia, auteur Jlpons

Plongeons à des distances bien plus petites que celles d'un terrain de boule, regardons la matière à une échelle de 10^{-10} m et examinons le choc de deux petites *boules* : un neutron et un noyau. Le noyau est un assemblage de neutrons et protons au centre de chaque atome constituant la matière. Un neutron, comme un proton d'ailleurs, peut vivre sa vie seul, et se mouvoir avec une certaine vitesse dans la matière constituée d'atomes. Au cours de ses déplacements, toujours en ligne droite, il peut entrer en interaction avec des noyaux d'atomes au repos. Mais contrairement à ce qui arrive aux boules de pétanque, les modèles qui régissent ces chocs sont probabilistes. Autrement dit, comme pour le lancer de dé, on ne peut dire avec certitude l'issue du choc, mais seulement donner des informations sur la loi de probabilité des particules issues du choc, et sur les lois qui vont

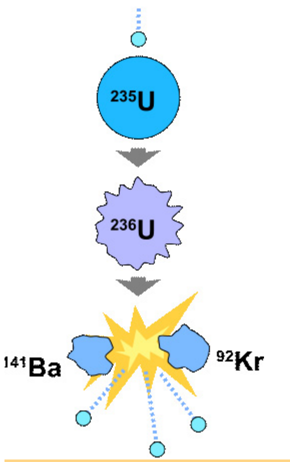


Figure 2 : Exemple de fission d'un noyau d'uranium 235 par un neutron
Wikipedia, auteur fastfission

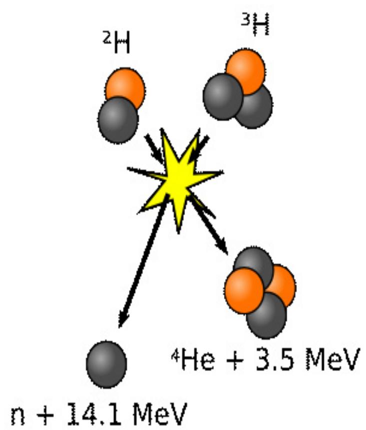


Figure 3 : Exemple de réaction de fusion deuterium-tritium,
Wikipedia auteur Aarchiba

régir la nature des particules en sortie du choc, leur vitesse et leur direction. Des physiciens théoriciens travaillent à établir ces modèles probabilistes d'interaction nucléaire (nucléaire car mettant en œuvre des neutrons), et d'autres physiciens, expérimentateurs, conçoivent des expériences pour valider ces modèles et en estimer les paramètres. Notons au passage que ces physiciens expérimentateurs font un travail de statisticiens : ils recueillent des mesures, c'est-à-dire des réalisations de variables aléatoires, dont ils doivent déduire des informations sur les modèles probabilistes des chocs.

Résumé :
Des physiciens, théoriciens et expérimentateurs, utilisent des modèles probabilistes et des techniques statistiques pour décrire les chocs des neutrons avec la matière.

Informatique, probabilités et statistiques.

Faire des calculs avec ses doigts reste toujours possible, mais pouvoir les déléguer à des machines nous facilite la vie, et nous rend possibles des calculs difficiles à conduire avec nos dix doigts (ou avec nos vingt doigts pour les plus souples d'entre nous !). Le boulier chinois, ou la machine de Pascal en leur temps ont représenté des progrès conséquents. Le calcul électronique, né au milieu du 20ème siècle, et dont les développements continuent à un rythme soutenu, nous permet des calculs toujours plus complexes, dans un temps toujours plus court. Pour cela nous donnons une liste d'instructions, appelée programme, à un ordinateur pour qu'il effectue les calculs que nous attendons. Ainsi, nous pouvons dorénavant jouer aux petits chevaux électroniques, laissant le loisir à l'ordinateur de lancer le dé et bouger les chevaux à notre place. C'est franchement moins amusant que jouer *à l'ancienne*, et ça coûte plus cher, mais ça nous montre au moins qu'il est possible d'apprendre à un ordinateur à tirer des variables aléatoires. Notons au passage que les instructions qui permettent à l'ordinateur de créer des variables aléatoires sont aussi l'œuvre de mathématiciens qui maîtrisent les probabilités. Au-delà du dé électronique à 6 faces, nous pouvons aussi programmer des variables et modèles aléatoires bien plus complexes, comme ceux qui président aux chocs des neutrons dans la matière. Ainsi, nous pouvons écrire un programme qui simule suivant les lois probabilistes de la physique le cheminement d'un neutron dans un matériau.

Résumé :
L'informatique permet de simuler numériquement les lois de probabilités qui décrivent le parcours d'un neutron dans la matière.

Énergie nucléaire, méthodes Monte Carlo et réacteurs du futur.

Nous avons parlé des chocs des neutrons dans la matière. Le terme plus couramment employé est celui de *réaction nucléaire*. Par analogie avec la chimie et ses réactions chimiques, ce terme traduit le fait qu'il peut y avoir transformation des particules et émission ou consommation d'énergie dans une réaction nucléaire.

Le neutron incident peut disparaître, tout comme l'atome cible peut être transformé en un autre atome, de nouveaux neutrons peuvent apparaître, et une certaine quantité d'énergie peut être dégagée. C'est par exemple le cas de la *réaction de fission* d'un noyau d'uranium 235 par un neutron : quand cette réaction se produit, sous l'impact d'un neutron incident, un noyau d'uranium 235 est cassé en deux noyaux plus petits, et ceci s'accompagne d'un dégagement d'énergie et de la production d'un certain nombre de nouveaux neutrons. Il est possible de concevoir des systèmes dans lesquels ce type de réaction se produit en chaîne, les neutrons issus d'une fission pouvant à leur tour rencontrer un noyau d'uranium 235 et produire à nouveau une réaction de fission. En contrôlant adéquatement la réaction en chaîne, on peut en tirer de l'énergie. Ce principe, breveté en France en 1939 (Kowarski, Joliot, Halban, brevet 976.541 déposé le 1er mai 1939) est à l'origine du développement de l'énergie nucléaire. Les systèmes dans lesquels on crée et contrôle cette réaction en chaîne s'appellent des réacteurs nucléaires, la chaleur dégagée par les fissions est récupérée par exemple par de l'eau, qui est ensuite transformée en vapeur pour faire tourner des turbines. Les turbines produisent enfin de l'électricité suivant le principe de la dynamo.

Le domaine de l'énergie nucléaire s'est développé à partir du milieu du vingtième siècle, en parallèle avec les débuts de l'informatique. Dès l'origine, des chercheurs, mathématiciens, physiciens, informaticiens se sont intéressés à la simulation du parcours des neutrons dans la matière. L'objectif affiché était de prédire la façon dont la population de neutrons se répartissait dans le réacteur, en fonction des paramètres de contrôle du réacteur. Ceci permettait d'en optimiser la conception. L'équation à résoudre est connue sous le nom d'équation du transport (sous-entendu des neutrons) ou encore équation de *Boltzmann linéaire*. Cette équation est une équation du type bilan, c'est-à-dire une équation qui relie la variation du nombre total de neutrons dans un système nucléaire pendant un court intervalle de temps à la différence entre les neutrons nouvellement apparus suite à des réactions nucléaires de fission et ceux disparus par exemple par suite de réactions nucléaires de capture.

Résolution de l'équation de Boltzmann.

Deux familles de méthodes existent pour résoudre cette équation, la première est dite déterministe et la seconde Monte Carlo. C'est à cette seconde famille que nous nous intéressons dans ce court article.

Une méthode Monte Carlo est une méthode de résolution d'équations qui repose sur le recours à des variables aléatoires, dont les réalisations, répétées suffisamment de fois vont nous amener à une estimation de la solution recherchée.

Regardons un exemple simple de méthode Monte Carlo pour déterminer la valeur de π.

Considérons un disque de rayon 1, par conséquent d'aire π, circonscrit dans un carré de côté 2, par conséquent d'aire 4. On suppose le disque et le carré centrés au point (0,0) dans un repère cartésien. Tirons *au hasard* des points dans ce carré. Nous avons vu plus haut qu'il fallait être plus explicite pour parler de ce *hasard* : ici nous voulons dire de façon uniforme. Un point de coordonnées (x,y) appartient au carré si et seulement si x comme y sont compris entre -1 et 1. Il appartient en plus au disque circonscrit si en plus $x^2 + y^2 <= 1$. Par tirage uniforme du point (x,y) nous entendons que si l'on découpait le segment [-1,1] de l'axe Ox et le segment [-1,1] de l'axe Oy en un nombre quelconque de sous-segments de même taille les coordonnées x et y auraient autant de chances de tomber dans n'importe lequel de ces segments. Par exemple, si l'on découpait les deux segments en 20 sous-segments de longueur 1/10, les points x et y auraient tous une même probabilité de 1/20 de tomber dans n'importe lequel des sous-segments. Supposons que l'on simule un très grand nombre N de points de coordonnées (x,y) dans le carré, et que l'on compte parmi ceux-ci le nombre de points M qui en plus d'être dans le carré sont aussi dans le disque. Le rapport M/N va être une estimation du rapport des deux surfaces. Ce serait d'ailleurs vrai pour tout type de figure dont l'une est totalement incluse dans l'autre. Si l'on est capable de lancer *au hasard* c'est-à-dire avec une loi uniforme des points sur ces figures, le rapport du nombre de points dans la plus petite sur le nombre de points dans la plus grande va approcher le rapport des deux surfaces. Dans le cas de notre carré et de notre disque, le rapport des deux surfaces est π/4, et puisque l'on sait estimer ce rapport par notre méthode on peut en déduire une estimation de π. Mais pour que cette estimation soit bonne il faut un grand nombre de tirages N, plus grand est N, meilleure est la qualité de l'estimation de π. On peut même montrer avec des calculs de probabilité simples que la qualité de l'estimation varie comme 1/ N . Pour améliorer d'un facteur 10 la qualité de l'estimation, il faut augmenter le nombre de tirages N par un facteur 100.

Les premières démonstrations de ce type d'utilisation de variables aléatoires pour résoudre des équations mathématiques sont le fait de deux français : Georges-Louis Leclerc de Buffon et Pierre-Simon de Laplace.

La première utilisation moderne de la méthode de Monte Carlo pour résoudre une équation est précisément celle qui concerne l'équation du transport des neutrons. En effet un moyen pour déterminer le comportement d'une population de neutrons dans un système est la simulation du parcours d'un nombre *suffisant* de ceux-ci dans le système grâce à un programme d'ordinateur, et nous avons vu plus haut que les mathématiciens, les physiciens et les informaticiens nous donnaient tous les éléments pour le faire. Pour connaître la répartition relative des neutrons dans deux endroits différents du système, il suffit de compter dans

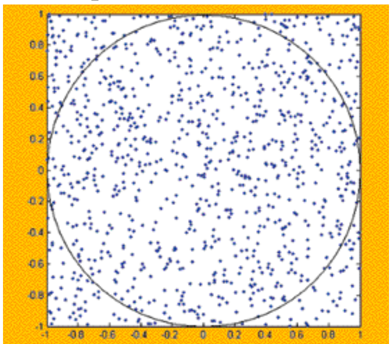


Figure 4 : N=1000, M = 782, estimation Monte Carlo de π : 4M/N = 3.128

Image CEA

notre simulation le nombre de neutrons qui sont passés par chacun des deux endroits, exactement comme pour l'estimation de π.

Avant d'illustrer ce type de simulation, revenons sur le nom de cette méthode : Monte Carlo. C'est une boutade d'un des scientifiques américains à l'origine des premiers travaux sur le sujet au milieu du vingtième siècle, il aurait déclaré que tant qu'à jouer avec des variables aléatoires pourquoi ne pas aller au casino à Monte Carlo…Le terme est resté, et la méthode a connu de nombreux développements dans des domaines scientifiques très variés où peu de gens qui l'emploient aujourd'hui connaissent son rapport avec le transport des neutrons.

Nous avons vu que toutes choses égales par ailleurs, la précision d'un calcul Monte Carlo était liée au nombre de tirages aléatoires. Dans les années 60 on pouvait simuler un millier de neutrons, dans les années 70 on allait jusqu'à 10000, jusqu'à 100000 dans les années 80, plusieurs millions dans les années 90, le milliard au milieu des années 2000 et en 2010 la centaine de milliards. La barrière des 10^{12} neutrons sera franchie dans la décennie qui s'ouvre, avec des machines informatiques de nouvelle génération, disposant de centaines de milliers de processeurs. Des progrès sont également attendus et nécessaires en physique pour affiner les modèles probabilistes des chocs de neutrons, et en mathématiques pour développer de nouveaux algorithmes pour estimer les grandeurs statistiques attachées

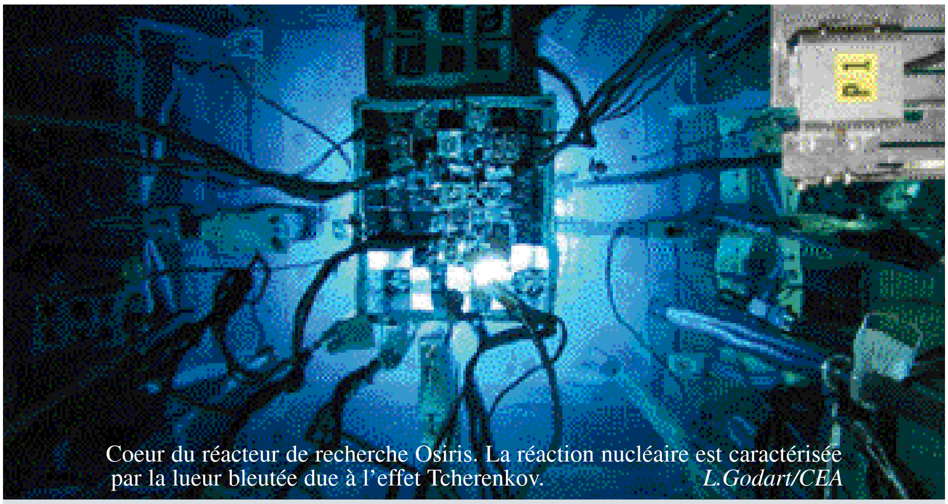
Réactions du futur.

Aujourd'hui en France, les trois-quarts de l'électricité produite sont d'origine nucléaire (58 réacteurs), et près de 450 réacteurs sont en opération dans le monde. La recherche est très active pour travailler sur des concepts de réacteurs innovants appelés à remplacer les réacteurs existants. Des progrès sont en particulier attendus pour une meilleure gestion (en particulier une plus grande économie pour une sûreté encore améliorée) du combustible nucléaire (les matériaux dans lesquels les neutrons créent des réactions de fission). La communauté internationale a lancé d'ambitieux programmes de recherche pour étudier de nouveaux *réacteurs à fission*, dits de quatrième génération, mais également à fusion. Dans ce deuxième cas la réaction qui produit de l'énergie n'est plus la cassure (fission) d'un gros noyau d'uranium 235, mais au contraire l'agglomération (fusion) de deux noyaux légers (deuterium et tritium). Le projet ITER à Cadarache est destiné à réaliser un tel réacteur à fusion. Dans un cas comme dans l'autre, il importe pour affiner les concepts, en mesurer la pertinence technologique comme économique, de pouvoir simuler toujours plus finement le parcours des neutrons dans la matière. Comme dans d'autres domaines, la simulation prend de plus en plus d'importance, car elle est de plus en plus prédictive. Nous voulons dire par là que les résultats sont dans certains cas si précis, qu'ils permettent de diminuer le nombre de maquettes expérimentales à réaliser avant de construire effectivement le réacteur désiré. Certaines expériences deviennent en effet inutiles, car on peut obtenir numériquement par le calcul les résultats qu'elles donneraient, en revanche d'autres plus générales se révèlent nécessaires pour approcher de plus près les phénomènes physiques modélisés. Ceci n'est pas spécifique à l'énergie nucléaire, il suffit de penser à la réalisation des nouveaux modèles d'avions civils, pour lesquels on ne réalise plus certaines maquettes destinées à des tests de résistance mécanique, car ces tests peuvent être réalisés numériquement sur ordinateur.

Conclusion.

C'est en alliant les forces de ces trois disciplines mathématiques, physique et informatique qu'il sera possible d'affiner toujours plus les calculs de transport des neutrons pour la définition des centrales nucléaires de demain et d'après-demain, qu'elles reposent sur la fission comme les réacteurs de quatrième génération ou la fusion comme ITER et son successeur DEMO.

J.C. T.



Coeur du réacteur de recherche Osiris. La réaction nucléaire est caractérisée par la lueur bleutée due à l'effet Tcherenkov. *L.Godart/CEA*

Pour en savoir (un peu) plus

Première évocation de l'usage des nombres aléatoires pour résoudre un problème mathématiques : **Georges de Buffon,** *Essai d'arithmétique morale,* L'Histoire naturelle, volume 4, 1777.

Calcul de π par échantillonnage aléatoire : **Pierre-Simon de Laplace,** *Théorie Analytique des Probabilités*", Livre 2, pp 356-366

Théorie cinétique des gaz, calcul Monte Carlo " à la main " avec 5000 particules **Lord Kelvin,** " *Nineteenth Century Clouds Over the Dynamical Theory of Heat and Light* ", Philosophical Magazine, series 6, 2, 1 (1901).

Première application moderne (avec calculateur électronique) et appellation calcul Monte Carlo : **Metropolis et Ulam,** " *The Monte Carlo Method* ", Journal of the American Statistical Association, 44, 335 (1949)

Exemple de code Monte Carlo moderne développé en France : *TRIPOLI-4 : A 3D continuous-energy Monte Carlo Transport code*, ***ICAPP 2007***, mai 2007, Nice, communication 7380