RÔLE ET MÉTHODES DE CALCUL DANS LES ÉTUDES DE RADIOPROTECTION

P. HILLION *

(Manuscrit reçu le 24 juin 1968)

RÉSUMÉ

Après avoir défini le problème des calculs dans les études de radioprotection et montré qu'il se réduit à la recherche des solutions de l'équation de Boltzmann, on discute trois méthodes numériques pour résoudre cette équation en insistant sur leur domaine de validité et la précision des résultats qu'elles fournissent.

I - INTRODUCTION

Le but que se propose d'atteindre ce colloque est de mettre au courant les expérimentateurs sur les possibilités des méthodes de calcul numérique dans la recherche des solutions aux problèmes de la protection contre le rayonnement nucléaire en se limitant aux cas des neutrons et des photons qui se rencontrent le plus habituellement. On aurait pu aussi naturellement inclure l'étude de la protection contre les particules chargées mais celles-ci exigent des études mathématiques plus délicates dont l'exposé exigerait un temps très supérieur à celui que l'on s'est fixé, sans apporter de nouveaux enseignements à l'auditeur non mathématicien.

De quoi s'agit-il et que faut-il entendre par protection contre le rayonnement nucléaire ? Le problème n'est pas seulement de calculer l'épaisseur de fer ou de béton à placer entre une source de rayonnement et des individus pour abaisser le taux de dose à des valeurs acceptables pour l'organisme mais il réside dans la connaissance du spectre différentiel de dose, c'est-à-dire la valeur du taux de dose par intervalle unité d'énergie, derrière un blindage donné et ceci pour deux raisons : la première est que la plupart des appareils de mesure ont une énergie de coupure en dessous ou au-dessus de laquelle ils n'enregistrent pratiquement rien, de sorte qu'il est important de connaître la fraction de dose qui se trouve dans la bande passante du détecteur, la seconde raison est analogue et concerne le cas où le détecteur est le corps humain car là aussi la pénétration du rayon-

* Docteur ès-sciences, Attaché aux Services Techniques des Armées - Laboratoire Central de l'Armement, 16 bis avenue Prieur-de-la-Côte-d'Or - 94-Arcueil.

nement dans le corps dépend de l'énergie de ce rayonnement. En bref, les problèmes que l'on a à envisager sont essentiellement de deux types :

a) évaluation du spectre différentiel de dose dans l'air à une certaine distance d'une source;

b) évaluation de ce spectre quand il a traversé une épaisseur donnée d'un matériau servant d'écran.

On emploie le mot évaluation car on a toujours en principe deux possibilités, soit le mesurer, soit le calculer, mais en réalité la mesure est souvent délicate, voire impossible, c'est le cas par exemple des études entreprises dans le but de se protéger contre le rayonnement des explosions nucléaires de sorte que l'on est amené à envisager si l'on peut obtenir le résultat par des calculs. Comme les situations physiques auxquelles on a affaire sont compliquées, il semble que l'on ait alors deux points de vue possibles : soit prendre la réalité dans toute sa complexité et tenter des calculs nécessairement très approchés, soit simplifier la réalité à un modèle permettant d'effectuer des calculs sinon rigoureux du moins dont on est sûr qu'ils fournissent un ordre de grandeur convenable. C'est ce deuxième point de vue que l'on a adopté au Laboratoire Central de l'Armement, car si les résultats obtenus ne coïncident pas avec les mesures expérimentales, on sait que cela provient d'une trop grande simplification de la réalité physique qu'il est alors possible de retoucher légèrement sans nuire à la qualité des calculs effectués et ceci jusqu'à ce que l'on approche de façon satisfaisante les résultats expérimentaux.

Tout calcul est précédé d'une étude physique pour déterminer la connaissance des processus élémentaires du rayonnement avec la matière. Pour les photons, on peut se limiter dans les domaines d'énergie que l'on considère ici (disons de 1 keV à 10 MeV) aux trois processus fondamentaux suivants : effet photoélectrique, diffusion Compton, effet de paires (aux basses énergies il vaut mieux parfois tenir compte de la diffusion cohérente ou effet Rayleigh). Pour les neutrons (du domaine thermique à des énergies de 16 MeV), on doit envisager la capture (avec production de gammas dits de capture, les réactions élastiques, les réactions inélastiques (avec production de gammas inélastiques). Chacun de ces processus est caractérisé par une section efficace $\sigma(E^*, \Omega \rightarrow E', \Omega')$ dont la dimension est celle d'une surface et qui, multipliée par le flux de particules $\Phi(x, E, \Omega)$ nombre de particules/cm² à la position x d'énergie E dans l'angle solide Ω permet d'évaluer la probabilité par unité de temps $\Phi(x, E, \Omega) \sigma(E^*, \Omega \rightarrow E', \Omega')$ qu'une particule subissant un choc en x se trouve après le choc avec une énergie E' dans l'angle solide Ω' .

Un calcul est possible quand on connaît les valeurs des sections efficaces $\sigma(E, \Omega \rightarrow E', \Omega')$ (où $\sigma(E \rightarrow E')$ quand elle est indépendante de Ω ou que l'on ne s'intéresse pas au comportement angulaire). Bien que la mécanique quantique permette le calcul de σ pour certains processus comme l'effet photoélectrique et la diffusion Compton, on est en fait tributaire des tables de sections efficaces existantes, établies d'après les résultats des mesures effectuées dans les différents laboratoires mondiaux spécialisés sur ces questions. La recherche et la discussion des données numériques est un travail important préliminaire à tout calcul.

On a introduit précédemment la quantité $\Phi(x, E, \Omega)$ que l'on appelle le spectre différentiel numérique angulaire et énergétique mais la plupart du temps les détecteurs sont isotropes de telle sorte qu'il suffit de calculer l'expression

$$\Phi_0(x, E) = \int \Phi(x, E, \Omega) d\Omega$$

spectre différentiel numérique, c'est-à-dire nombre de particules à la distance x par unité de temps dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$. A partir de cette quantité on obtient le spectre différentiel d'énergie :

$$I_0(x, E) = E \Phi_0(x, E)$$

d'où l'on déduit le spectre différentiel de dose ou du taux de dose exprimé en röntgen ou en rad par seconde (r/s) c'est-à-dire la quantité que l'on cherche à atteindre par l'une des deux expressions suivantes :

$$\begin{aligned} D(x, E) &= k_1 \mu_a E \Phi_0(x, E) \quad \text{r/s pour les photons} \\ D(x, E) &= k_2 \Phi_0(x, E) \quad \text{r/s pour les neutrons} \end{aligned}$$

μ_a est la section efficace d'absorption dans l'air exprimée en cm^{-1} (on rappelle qu'à la section efficace σ pour un diffuseur exprimée en cm^2 par exemple, on associe $\Sigma = n \sigma$ en cm^2/g où Σ est la section efficace pour un matériau contenant n diffuseurs par gramme et $\mu = \rho \Sigma$ en cm^{-1} où ρ est le poids spécifique en g/cm^3 , tandis que k_1 est un coefficient numérique qui transforme les MeV/cm^3 en röntgen ou en rad. Pour les neutrons k_2 est un coefficient donné, par les tables empiriques de Snyder et Neufeld, par exemple.

Ainsi avec les données numériques σ , l'étude se réduit au calcul de $\Phi(x, E, \Omega)$ et l'on est amené immédiatement à la question suivante : à quelle équation satisfait $\Phi(x, E, \Omega)$? On verra dans le prochain paragraphe que Φ est une solution de l'équation de Boltzmann, remarquons seulement que $\Phi(x, E, \Omega)$ est une fonction dépendant de six paramètres, trois pour la position x , un pour l'énergie E , deux pour l'angle solide Ω . Mais heureusement dans beaucoup de problèmes de protection, convenablement idéalisés au sens que l'on a donné à cette expression précédemment, on a, soit des sources ponctuelles, avec une symétrie sphérique de sorte que x se réduit à la distance r à la source, soit à des sources planes avec une symétrie autour de la perpendiculaire du plan, de sorte que x se ramène ici à la distance au plan. Ce sont ces cas particuliers mais néanmoins intéressants que l'on discutera dans ce colloque. Un cas un peu plus compliqué est celui d'une symétrie cylindrique mais on ne l'envisagera pas ici.

II - L'ÉQUATION DE BOLTZMANN

L'équation de Boltzmann ou équation de transport comme on l'appelle encore, déterminant sous certaines hypothèses (en particulier il n'y a que des chocs binaires et pas d'influence des particules situées à grande distance, notons que pour les particules chargées, l'existence du champ coulombien invalide cette hypothèse donc l'emploi de l'équation de Boltzmann) l'évolution d'un système de particules n'est rien d'autre que l'équation de continuité dans l'espace de phase à six dimensions (x, E, Ω) .

Elle exprime simplement le vieil adage de nos aïeux que rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme.

Pour établir l'équation de Boltzmann, il est plus simple de remarquer que E et Ω déterminent la vitesse v de composantes v_x, v_y, v_z . Pendant un temps dt dans l'élément de volume $dW = dx dE d\Omega = dx dv$ où le flux est $\Phi(x, E, \Omega) \equiv \Phi(x, v)$ le nombre de particules $N(x, v)$ varie de la quantité :

$$dN = \frac{\partial \Phi}{\partial t}(x, v, t) dx dv dt \quad (1)$$

cette variation provient :

a) de l'existence d'un terme de sources à l'intérieur de dW

$$dN_1 = S(x, v, t) dx dv dt \quad (2)$$

b) des particules qui viennent après choc d'un autre élément de volume dW'

$$dN_2 = \left(\int \sigma(x, v \rightarrow x', v') \Phi(x', v', t') dv' \right) dx' dv' dt' \quad (3)$$

c) de la perte de particules par les parois de l'hypercube dW

$$dN_3 = -v \text{ grad } \Phi(x, v, t) dx dv dt \quad (4)$$

d) de la perte des particules subissant des chocs dans dW

$$dN_4 = -\mu \Phi(x, v, t) dx dv dt \quad (5)$$

où μ est la section efficace totale, d'où en portant (2), (3), (4), (5) dans (1) :

$$\frac{\partial \Phi(x, v, t)}{\partial t} = S(x, v) + \int \sigma(x, v \rightarrow x', v') \Phi(x', v', t') dv' - v \cdot \text{grad } \Phi(x, v, t) - \mu \Phi(x, v, t)$$

ceci est l'équation de Boltzmann qui en revenant à nos anciennes notations s'écrit :

$$\frac{\partial \Phi(x, E, \Omega, t)}{\partial t} = \Omega \cdot \text{grad } \Phi(x, E, \Omega, t) + \mu \Phi(x, E, \Omega, t) - \int \sigma(E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi(x, E, \Omega, t) dE' d\Omega' + S(x, E, \Omega) \quad (6)$$

en régime stationnaire $\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$ et il vient :

$$\Omega \cdot \text{grad } \Phi(x, E, \Omega) + \eta \Phi(x, E, \Omega) = \int \sigma(E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi(x, E, \Omega) dE' d\Omega' + S(x, E, \Omega) \quad (7)$$

Pour simplifier la présentation et l'écriture, on a admis que la matière dans laquelle se propage le rayonnement est homogène, c'est-à-dire que les sections

efficaces ne dépendent pas de x mais il n'y a aucune difficulté théorique à lever cette hypothèse. Dans la pratique cela complique considérablement les calculs.

Ainsi les calculs de radioprotection se ramènent à la recherche des solutions de (6) ou (7). En effectuant une transformée de Laplace sur la fonction Φ par rapport au temps; posons :

$$\tilde{\Phi}(x, E, \Omega, s) = \int_0^{\infty} e^{-st} \Phi(x, E, \Omega, t) dt$$

alors comme $\frac{\partial \Phi}{\partial t}$ a pour transformée $-s \tilde{\Phi}$, on voit que $\tilde{\Phi}$ satisfait à (7) avec μ remplacé par $\mu' = \mu - s$. Formellement au moins il n'y a pas plus de difficultés à calculer $\tilde{\Phi}$ que Φ mais le problème est de trouver la transformée inverse de $\tilde{\Phi}$ c'est-à-dire de remonter de $\tilde{\Phi}$ à Φ . Je laisserai de côté cette question délicate pour laquelle M. NURDIN proposera dans son exposé une solution pour un cas particulier.

Revenant à (7), on peut se demander immédiatement : existe-t-il une solution analytique ? Dans les problèmes qui nous préoccupent la réponse est négative. Dans certaines études, liées à la théorie des réacteurs, en particulier quand la section efficace peut être considérée comme indépendante de l'énergie, il existe de telles solutions. On ne développera pas ici un tel point de vue pour plusieurs raisons : il est inutile en ce qui nous concerne, il exige l'emploi de méthodes mathématiques aussi poussées que la théorie des opérateurs dans un espace de BANACH et la théorie des distributions, ce qui nous entraînerait trop loin, par ailleurs deux excellents livres viennent récemment de lui être consacré. Ici on se limite aux méthodes numériques nécessitant l'emploi d'un ordinateur permettant de trouver des solutions pratiques de (7). On ne passera pas en revue toutes les méthodes possibles mais seulement celles que l'on a effectivement utilisées au Laboratoire Central de l'Armement, nous contentant d'en signaler d'autres si nécessaire.

On peut se demander pourquoi il est nécessaire d'utiliser plusieurs méthodes pour résoudre (7). C'est qu'en fait elles sont toutes des approximations valables dans des domaines déterminés d'énergie, de distance à la source et même de géométrie, les unes en symétrie sphérique, les autres en symétrie plane et qu'en général les domaines de validité ne se recoupent pas sauf peut être en ce qui concerne les méthodes de Monte-Carlo mais celles-ci, comme on le verra, sont soumises par leur nature même à d'autres limitations. Dans cet exposé, on donnera la philosophie générale sous-jacente à ces différentes méthodes en notant soigneusement leurs possibilités et leurs limitations. Dans les exposés qui suivront, on définira de façon un peu plus précise, sans rentrer dans des détails fastidieux, les algorithmes mathématiques utilisés et plusieurs exemples de calculs effectués seront montrés et discutés.

Dans la plupart des études que nous avons faites, la source est de l'un des trois types suivants :

a) ponctuelle et isotrope c'est-à-dire émettant autant de particules dans toutes les directions, soit monoénergétique, soit avec une répartition spectrale $S(E)$. Ce dernier cas à cause de la linéarité de l'équation de Boltzmann est une

extension triviale du cas monoénergétique car on peut numériquement approcher de $S(E)$ par une somme de sources monoénergétiques.

b) plane, indéfinie, isotrope : la source a une extension infinie et émet dans toutes les directions;

c) source plane, infinie, parallèle. La source d'extension infinie n'émet que dans une direction.

On va maintenant étudier les trois classes suivantes de méthodes : méthode des moments, méthode de Monte-Carlo, méthode du plongement invariant.

III - LA MÉTHODE DES MOMENTS

En général, si une fonction $f(x)$ définie sur un domaine D est telle que ses moments $\bar{x}^n = \int x^n f(x) dx$ existent quel que soit n , on montre alors que sous certaines conditions, la connaissance des $\bar{x}^n$ est équivalente à celle de $f(x)$. Partant de cette idée, on pose :

$$\Phi(x, E, \Omega) = \sum_{nl=0}^{\infty} B_{nl}(E) x^n P_l(\Omega) \quad (8)$$

où l, n sont des entiers positifs variant de 0 à l'infini et où $P_l(\Omega)$ est le polynôme de Legendre d'ordre l qui permet de se débarrasser du comportement angulaire de $\Phi(x, E, \Omega)$.

Les moments $B_{nl}(E)$ qui interviennent dans (8) sont calculés par la relation :

$$B_{nl}(E) = \int_{-1}^1 d\Omega \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n P_l(\Omega) \Phi(x, E, \Omega) \quad (8')$$

cette égalité n'a de sens que si $\lim_{x \rightarrow \infty} x^n \Phi(x, E, \Omega)$ décroît assez rapidement à l'infini, ce qui pour des raisons physiques semble vraisemblable et montre que la méthode ne peut être employée simplement qu'en milieu semi-indéfini. On ne peut, par exemple, l'utiliser pour calculer le taux de dose derrière une plaque d'épaisseur finie.

Multiplions les deux membres de (7) par $x^n P_l(\Omega)$ et intégrons sur $dx, d\Omega$, on obtient alors une double infinité d'équations sur $B_{nl}(E)$ qui par exemple pour les photons s'écrit (on utilise pour des raisons de commodité, la longueur d'onde $\lambda = 0,511/E$ plutôt que E)

$$\mu(\lambda) B_{nl}(\lambda) = a \int_0^{\lambda} K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) B_{nl}(\lambda) d\lambda + \frac{\mu_0}{2l+1} \{ (l+1) B_{n-1, l+1} + n B_{n-1, l-1} \} + \mu_0 S_n(\lambda) \delta_{l0} \quad (9)$$

δ_{l0} est le symbole de Kronecker $\delta_{l0} = 1$ si $l = 0$, $\delta_{l0} = 0$ si $l \neq 0$ de sorte qu'au lieu de (7) on est ramené à résoudre (9) qui est apparemment plus

compliquée mais dont une solution est assez facile à trouver à l'ordinateur comme le montrera M. NURDIN en calculant successivement B_{00} , puis B_{10} , B_{11} , puis B_{20} , B_{21} , B_{22} ... etc.

En fait, comme on l'a indiqué dans l'introduction, ce n'est pas $\Phi(x, E, \Omega)$ que l'on désire, mais :

$$\Phi_0(x, E) = \int \Phi(x, E, \Omega) d\Omega$$

et comme

$$\int P_l(\Omega) d(\Omega) = \delta_{l0}$$

on a d'après (8)

$$\Phi_0(x, E) = \sum_{n=0}^{\infty} B_{n,0}(E) x_n \quad (10)$$

Ainsi on n'a pas besoin de tous les B_{nl} mais seulement des $B_{n,0}$. En fait, numériquement on peut obtenir un nombre N fini de $B_{n,0}$ et même très limité ($N = 7$ ou 8) à cause de la durée du calcul de sorte qu'il se pose le problème suivant : Comment estimer $\Phi(x, E, \Omega)$ avec seulement N moments $B_{n,0}$ car si (10) est le meilleur estimateur de Φ_0 avec N infini, rien ne prouve qu'il en soit de même avec N fini.

On aborde là une des difficultés inhérentes au calcul numérique. Supposons par exemple que $f(x)$ admette le développement en série de FOURIER :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{inx}$$

alors

$$a_n = \int f(x) e^{-inx} dx$$

il est bien connu que ces formules ne sont pas celles qui approchent le mieux $f(x)$ si on calcule un nombre fini de a_n .

Ici se présente le même problème, appelé par les auteurs de la méthode, problème de la reconstitution du flux. Ces auteurs suggèrent comme estimateur pour la partie diffusée du flux (le calcul du flux non diffusé est immédiat)

$$\Phi_0^*(x, E) = \frac{1}{2} e^{-\mu_0(x)} \sum_{j=0}^N \alpha_j(E) Q_j(|\mu_0 x|) \quad (11)$$

avec

$$\alpha_j(E) = \sum_{h=0}^j (j_h) (-1)^h B_{2h,0}(E)$$

et où $Q_j(x)$ sont certains polynômes orthogonaux.

(11) est la solution cherchée à l'équation de Boltzmann (7).

Comme on l'a déjà indiqué, la méthode est valable en régime stationnaire, en milieu homogène infini, pratiquement l'air, jusqu'à des distances de la source de l'ordre de 15 à 20 livres parcours moyens pour des sources ponctuelles (en géométrie sphérique) et pour des sources planes infinies (géométrie rectiligne). Nous avons effectué des calculs dans le cas des photons et des neutrons (pour ces derniers en se limitant à un domaine d'énergie où la diffusion inélastique est négligeable, mais récemment on a pu lever cette restriction).

On a étendu cette méthode dans deux directions, d'une part pour un milieu dont la densité varie d'une façon continue suivant l'une des coordonnées, d'autre part pour une source non stationnaire supposée être une brève impulsion.

En conclusion, les limitations de la méthode proviennent de la nécessité de considérer un milieu semi-infini et de l'emploi de l'estimateur (11). Pour ce dernier on a essayé une autre forme de l'estimateur qui nous a donné pratiquement les mêmes résultats, ce qui prouve que ces derniers ne sont pas très sensibles à la forme précise de l'estimateur pourvu que celui-ci ait un support physique.

Notons pour terminer que si l'on multiplie les deux membres de (7) par E on peut résoudre directement l'équation de Boltzmann pour le spectre différentiel d'énergie $I(x, E, \Omega) = E \Phi(x, E, \Omega)$.

IV - LES MÉTHODES DE MONTE CARLO

On désigne par méthode de Monte-Carlo un ensemble de techniques probabilistes pour la recherche des solutions de problèmes mathématiques ou physiques qui ne sont pas nécessairement de caractère aléatoire. Bien qu'il soit possible de justifier rigoureusement d'un point de vue mathématique l'emploi d'une méthode probabiliste pour résoudre l'équation (7), il est plus simple et plus compréhensible, peut-être, d'introduire cette technique d'un point de vue physique, en montrant sur un exemple simple que le calcul n'est rien d'autre qu'une description des incidents de parcours d'une particule dans la matière.

Avant tout, on est censé disposer d'une table de nombres aléatoires uniformément répartis sur (0,1) ou d'un moyen de construire de tels nombres, ceci parce que l'on désire associer à ces nombres la probabilité de voir se produire certains événements et que comme il est bien connu, la probabilité est toujours comprise entre 0 et 1. On ne discute pas ici le problème délicat de la constitution de ces tables de nombres aléatoires, Mme MARQUIÉ en dira quelques mots dans un des exposés qui vont suivre.

Supposons que l'on veuille évaluer la protection offerte par une plaque d'un métal donné d'épaisseur e au rayonnement γ , que fait l'expérimentateur ? Il place une source d'un côté, un détecteur de l'autre et il évalue la protection par le rapport de l'activité mesurée dans le détecteur à celle de la source. Le théoricien en « Monte-Carlo » va procéder de façon similaire. Il sait qu'un photon qui rentre dans ce métal a les probabilités respectives p_a et p_d d'être diffusé ou absorbé lors d'un choc

$$p_a = \frac{\sigma_c}{\sigma_c + \sigma_p + \sigma_{pc}} \quad p_d = \frac{\sigma_p + \sigma_{pc}}{\sigma_c + \sigma_p + \sigma_{pc}}$$

où σ_c , σ_p , σ_{pc} sont respectivement les sections efficaces, Compton, photoélectrique, création de paires qui sont connues par des tables. Il sait en outre que la probabilité p_x de parcourir une distance x sans choc est :

$$p_x = e^{-(\sigma_c + \sigma_p + \sigma_{pc}) x}$$

Muni de ces renseignements et d'une table de nombres aléatoires, on procède de la façon suivante : on prend un photon (on suppose pour simplifier qu'ils

arrivent tous perpendiculairement à la plaque) d'un côté de la plaque et on tire un nombre aléatoire ξ_1 . La relation $p_x = \xi_1$ fixe une distance x_1 parcourue dans la plaque, on prend un second nombre ξ_2 et on convient que si $\xi_2 \leq p_a$ la particule est absorbée, son histoire est terminée, on recommence avec une autre tandis que si $\xi_2 > p_a$ la particule subit une diffusion dont l'angle est calculé par la formule de Compton dans laquelle on introduit un autre nombre aléatoire ξ_3 . Maintenant un quatrième nombre ξ_4 fixe dans cette direction la distance du choc suivant et l'on continue jusqu'à ce que la particule soit ou absorbée ou qu'elle sorte de la plaque.

Chaque photon traité marque un score, zéro s'il est absorbé ou s'il sort par la face où on l'a fait rentrer et un s'il sort par la face opposée. Si le score total est m pour N photons étudiés, le coefficient de protection de la plaque de métal est m/N .

Le problème pour le calculateur comme pour l'expérimentateur est d'évaluer l'erreur sur le résultat fourni. Comme il est usuel dans les études statistiques, il faut donc connaître la variance σ sur m/N . En gros si une variable aléatoire x a la moyenne $\bar{x}$ et la variance σ on a 60 % de probabilité que le résultat soit dans l'intervalle $(\bar{x} - \sigma, \bar{x} + \sigma)$ et 90 % dans $(\bar{x} - 2\sigma, \bar{x} + 2\sigma)$. Dans l'exemple simple choisi, le calcul de la variance est facile et l'on trouve :

$$\sigma^2 = m \left(\frac{N - m}{N^2} \right)$$

comme en général $m \ll N$ on arrive à ce résultat remarquable, $\sigma = \sqrt{\frac{m}{N}}$.

Donc pour avoir $\sigma = 10\%$ il faut au moins qu'il sorte 100 photons de la plaque, d'où la question : quel est l'ordre de grandeur de N ? On touche là le nœud des difficultés rencontrées par les méthodes de Monte-Carlo dans les calculs de radioprotection. Car supposons que l'on veuille connaître non seulement le nombre de neutrons qui sortent de la plaque mais encore leur répartition dans dix intervalles d'énergie toujours avec un écart de 10 %. D'après ce qui précède, il faudra au moins enregistrer 1 000 événements à la sortie mais si c'est un bon matériau de protection, il aura un bon coefficient d'affaiblissement, disons 10^6 ; de ce fait, il faudra étudier 10^9 histoires de photons de sorte que même avec un temps moyen pour une histoire de l'ordre de 0,01 s, on aboutit à des temps de calcul qui même avec les ordinateurs les plus puissants actuellement sur le marché, sont prohibitifs.

Pour résoudre cette difficulté on emploie différents artifices dont les uns apparaissent naturellement tandis que les autres sont plus compliqués. Il est clair dans l'exemple précédent, que l'on perd son temps et son argent quand on étudie une particule qui est absorbée, il est plus astucieux d'affecter un poids p à chaque photon à son départ, d'admettre qu'il n'y a jamais absorption mais à chaque choc de multiplier le poids par le rapport de sa probabilité d'être absorbée à celle d'être diffusée. Il est facile de prouver que, pour le même nombre de photons tirés : N dans l'exemple donné, l'on retrouve la même valeur du coefficient de protection mais avec un écart quadratique beaucoup plus faible. En termes techniques, on dit que l'on a utilisé un nouvel estimateur non truqué (c'est-à-dire donnant la même valeur moyenne) mais avec une variance plus faible.

Il existe un théorème général prouvant que pour la solution par Monte Carlo de l'équation de Boltzmann, il existe un estimateur à variance nulle, c'est-à-dire fournissant le résultat exact. Malheureusement le théorème prouve seulement son existence mais non la forme précise qu'il doit prendre, néanmoins il est d'un intérêt fondamental car il montre qu'un peu d'ingéniosité et d'intuition permettent de fournir des classes intéressantes d'estimateurs. Les uns viennent d'études mathématiques assez spécialisées, les autres comme celui utilisé plus haut découlent de raisonnements physiques. Par exemple, pour une particule dans une plaque, non seulement on ne jouera pas l'absorption, mais aussi on peut par un estimateur convenable l'empêcher de sortir jusqu'à ce que son énergie tombe à un seuil fixé. Je ne m'étendrai pas sur ces questions qui seront succinctement développées par Mme MARQUIÉ.

La difficulté fondamentale liée à l'emploi d'estimateurs sophistiqués est l'impossibilité de connaître la formule exacte de la variance σ et donc l'impossibilité de savoir si l'évaluation que l'on peut en faire à partir des résultats effectivement obtenus est correcte ou grossièrement pessimiste ou optimiste. Une façon de s'en rendre compte est de recommencer les calculs en doublant par exemple le nombre de particules que l'on étudie et de comparer les résultats que l'on obtient aux précédents. Les essais que l'on a effectués dans ce domaine semblent indiquer que les évaluations des variances pourraient être grossièrement pessimistes, ce qui donnerait plus de valeur à la méthode de Monte Carlo. Une cause de cette mauvaise évaluation pourrait provenir de la variance propre des nombres aléatoires utilisés, en principe pour de tels nombres uniformément répartis sur $(0,1)$ la variance est faible, mais comme en fait on a affaire à des nombres pseudo-aléatoires, le résultat pourrait être très différent. Il y a là des études importantes à entreprendre.

En conclusion, il n'y a théoriquement aucune limitation d'emploi aux méthodes de Monte-Carlo, d'un point de vue complexité de la géométrie, de l'inhomogénéité du matériau, de l'étendue de la source, de la distance à la source, etc., mais pratiquement on est très vite limité par les temps de calcul qui deviennent vite prohibitifs, non seulement par leur prix, mais aussi par l'organisation actuelle des grands centres de calculs. En outre, l'impossibilité d'évaluer avec une bonne précision la variance laisse planer un doute sur la qualité des calculs, de sorte que lorsque cela est possible on essaye d'obtenir par un autre procédé les résultats atteints par la méthode de Monte-Carlo qui reste néanmoins le seul outil utilisable dans les situations compliquées.

Au Laboratoire Central de l'Armement nous avons mis au point différents codes tels que Diphon ou Dineu qui fournissent la répartition spectrale de la dose dans l'air pour des sources ponctuelles monoénergétiques de photons ou de neutrons ou les codes Alpho, Trapho, Altran permettant d'obtenir le spectre de dose réfléchi et transmis pour des rayonnements gammas et neutroniques à travers des blindages. En particulier M. CHAPOT montrera tout à l'heure une comparaison du calcul du facteur de transmission dans une plaque de fer par deux méthodes différentes dont l'une est Monte-Carlo et cette comparaison tend à justifier ce que l'on affirmait à l'instant à savoir que l'estimation des variances est grossièrement pessimiste.

V - LA MÉTHODE DU PLONGEMENT INVARIANT

La méthode du plongement invariant ne s'applique qu'en géométrie plane mais alors elle est l'outil idéal pour traiter les problèmes de protection liés à l'emploi de blindages ou d'écrans et ceci en tenant compte de toute la complexité des processus physiques, la seule limitation pouvant provenir de l'absence de données pour les sections efficaces comme dans la production des gammas lors des réactions inélastiques des neutrons dans certains domaines d'énergie.

Comme pour présenter les méthodes de Monte-Carlo on peut soit utiliser un formalisme mathématique rigoureux mais abstrait, soit procéder d'un point de vue plus physique mais peut-être plus intuitif. Disons qu'elle n'est pas philosophiquement parlant, sans rapport avec ce que les électrotechniciens appellent la théorie des quadripôles en ce sens qu'elle permet de lier deux grandeurs de sortie à deux grandeurs d'entrée sans connaître le détail de ce qui se passe entre les deux extrémités, on voit là qu'elle diffère fondamentalement de la méthode de Monte-Carlo. Par ailleurs il y a une autre analogie avec la méthode de Wiener-Hopf parce qu'en fait les deux grandeurs d'entrée (ou de sortie) sont la même quantité physique considérée l'une dans la plaque, l'autre extérieure à la plaque.

Le nom de plongement invariant s'introduit pour les raisons suivantes : l'invariance est un principe déjà évoqué au début de cet exposé, rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme ou en termes plus précis en considérant le cas d'une plaque verticale tout ce qui arrive de l'ouest et qui n'est pas absorbé est soit transmis à l'est ou réfléchi vers l'ouest et symétriquement pour tout ce qui vient de l'est. Le nom plongement lui, a pour origine le fait que les frontières de la plaque ne sont pas considérées comme ayant une propriété particulière mais comme des points d'abscisse quelconque, on plonge ainsi le problème dans un problème plus vaste où la position des frontières n'est pas fixée a priori. Il est plus facile à l'ordinateur de résoudre ce problème que l'équation (7) car il n'existe pas de méthode numérique pour avoir une solution de cette équation quand on se donne les conditions aux limites sur une frontière non connexe comme c'est le cas pour une plaque plane où l'on sait initialement que la source est d'un côté et qu'il n'y a rien de l'autre.

Désignons par $\Phi^+(y)$ et $\Phi^-(y)$ les flux de particules réfléchis et transmis par l'élément de la plaque situé à un point d'abscisse y compris entre les abscisses x et z des extrémités, alors $T(z, y, x)$, $T(x, y, z)$ sont les coefficients de transmission de z vers x et de x vers z évalués au point y , $R(z, y, x)$, $R(x, y, z)$ sont les coefficients de réflexion de x vers z et z vers x évalués également au point y , on a les relations :

$$\begin{cases} \Phi^+(y) = T(z, y, x) \Phi^+(z) + R(x, y, z) \Phi^-(x) \\ \Phi^-(y) = R(z, y, x) \Phi^+(z) + T(x, y, z) \Phi^-(x) \end{cases}$$

soit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \Phi^+(y) \\ \Phi^-(y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T(z, y, x) & R(z, y, x) \\ R(x, y, x) & T(x, y, z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^+(z) \\ \Phi^-(x) \end{pmatrix} = M(x, y, z) \begin{pmatrix} \Phi^+(z) \\ \Phi^-(x) \end{pmatrix}$$

d'où l'on déduit sur les frontières :

$$\begin{pmatrix} \Phi^+(x) \\ \Phi^-(x) \end{pmatrix} = M(x, x, z) M^{-1}(x, z, z) \begin{pmatrix} \Phi^+(z) \\ \Phi^-(z) \end{pmatrix} \quad (12)$$

En général, les données sont $\Phi^-(x)$ et $\Phi^+(z)$ (ce dernier est dans les cas pratiques égal à zéro), c'est alors un exercice trivial de réécrire la relation précédente sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \Phi^+(x) \\ \Phi^-(z) \end{pmatrix} = G(x, z) \begin{pmatrix} \Phi^-(x) \\ \Phi^+(z) \end{pmatrix} \quad (13)$$

on n'explicitera pas la forme précise de $G(x, z)$. Les expressions (12) et (13) justifient l'analogie dont on a parlé précédemment avec la théorie des quadripôles.

Les relations précédentes prouvent qu'il suffit de calculer des coefficients de transmission T et de réflexion R à partir de l'équation de Boltzmann (7). Nous allons montrer comment on y arrive dans le cas particulier où l'équation de transport (7) se simplifie à la forme suivante :

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial y}(y, \mu) + \Sigma \Phi(y, \mu) = \Sigma \int_0^1 \Phi(y, \mu') d\mu' + S(y, \mu) \delta(y-z) \quad (14)$$

$\mu = \cos \theta$ est l'angle avec la normale à la plaque, Σ la section efficace totale. Cette équation correspondrait à la propagation de neutrons sans perte d'énergie et diffusion isotrope; on réécrit (14) sous la forme équivalente :

$$\begin{aligned} \mu > 0 : \mu \frac{\partial \Phi^+(y, \mu)}{\partial y} + \Sigma \Phi^+(y, \mu) &= \\ &= \Sigma \left[\int_0^1 \Phi^+(y, \mu') d\mu + \int_{-1}^0 \Phi^-(y, \mu') d\mu' \right] \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \mu < 0 : \mu \frac{\partial \Phi^-(y, \mu)}{\partial y} + \Sigma \Phi^-(y, \mu) &= \\ &= \Sigma \left[\int_0^1 \Phi^+(y, \mu') d\mu' + \int_{-1}^0 \Phi^-(y, \mu') d\mu' \right] \\ &\text{avec } \Phi^+(x, \mu) = 0 \quad \Phi^-(z, \mu) = S(z, \mu) \end{aligned} \quad (16)$$

et l'on veut calculer :

$$\Phi^+(z, \mu), \quad \Phi^-(x, \mu) \quad (17)$$

on pose alors

$$\begin{aligned} \Phi^+(y, \mu) &= \int_{-1}^0 R(y, \mu, \mu', z) S(z, \mu') d\mu' \\ \Phi^-(y, \mu) &= \int_{-1}^0 T(y, \mu, \mu', z) S(z, \mu') d\mu' \end{aligned} \quad (18)$$

que l'on porte dans (15) et (16), ce qui fournit les équations satisfaites par R et T . Quand on les a résolues, (18) permet d'obtenir immédiatement (17). Notons sans entrer dans le détail que la dérivée de $\Phi^\pm$ par rapport à y fait intervenir la dérivée de R et T par rapport à y prise au point x , c'est ce résultat qui justifie la dénomination de plongement.

Dans les cas d'équations plus compliquées le processus est le même et M. CHAPOT en parlera succinctement dans son exposé.

Cette méthode a le seul inconvénient d'être limitée aux géométries planes parce que comme on vient de le voir, elle nécessite le calcul de la dérivée dans la direction normale à la frontière qui peut dépendre de plusieurs paramètres même si la frontière a une forme convexe simple mais dans ce cadre la méthode du plongement invariant est sans rivale parce qu'elle permet de traiter, sans pratiquement beaucoup plus d'efforts tous les types de matériaux stratifiés même de composition chimique compliquée en tenant compte de tous les processus secondaires que l'on est habituellement amenés à négliger dans les autres sortes de méthodes, par exemple, les gammas de capture ou les gammas inélastiques créés par le passage des neutrons dans la matière. Pour donner un ordre de grandeur les temps de passage à l'ordinateur pour calculer les mêmes grandeurs sont de 50 à 80 fois plus faibles par la méthode du plongement invariant que par la méthode de Monte-Carlo. En outre, la précision sur les résultats ne dépend pratiquement que de la précision avec laquelle on effectue les calculs à l'ordinateur (bien sûr il faut tenir compte des erreurs dues aux sections efficaces mais celles-ci sont les mêmes pour toutes les méthodes de calculs).

Dans son exposé, M. CHAPOT donnera plusieurs exemples de calculs pour illustrer la méthode et l'un d'eux me semble d'un intérêt tout particulier en ce qu'il permet d'évaluer la répartition spectrale du taux de dose neutronique à l'intérieur du corps humain idéalisé par un cube dont l'épaisseur est celle d'un individu moyen rempli d'une matière ayant une composition chimique voisine de celle du corps humain. Ceci permet de connaître l'énergie du rayonnement qui pénètre dans un organe placé après une épaisseur donnée de tissu. Ceci pourrait être d'un grand intérêt pour les études médicales et permettrait de déterminer la partie du spectre réellement dangereuse.

VI - CONCLUSIONS

On ne prétend pas avoir, dans cet exposé, fait le tour de toutes les méthodes possibles de calcul numérique dans les études de radioprotection. On a laissé en particulier de côté des méthodes importantes comme les méthodes multi-groupes ou S_n qui sont une discrétisation de l'équation de Boltzmann par rapport à l'énergie et la distance. Il existe par exemple, en géométrie sphérique un code NIOBE qui utilise ces principes. Nous n'insisterons pas car nous n'avons aucune expérience qui nous permette de déterminer le domaine de validité de ces méthodes et la précision des résultats que l'on peut en attendre.

Nous espérons avoir convaincu les expérimentateurs qu'il est possible de faire des calculs satisfaisants sur des problèmes compliqués. Ces calculs pourraient intervenir à trois stades différents, d'abord pour obtenir un ordre de grandeur en vue d'une expérimentation ultérieure, ensuite pour corroborer des résultats

de mesure en étudiant par exemple l'influence de la réponse de l'appareillage, enfin pour remplacer une expérimentation impossible ou trop coûteuse.

Le peu d'enthousiasme des expérimentateurs pour les calculs théoriques est essentiellement d'ordre psychologique et se comprend facilement car la complexité des calculs, surtout avec l'emploi des ordinateurs est telle qu'un non spécialiste s'y perd et que les résultats imprimés par la machine lui font l'effet du lapin sorti du chapeau par le prestidigitateur. Je serais heureux si j'ai été assez simple et assez clair pour avoir démystifié certaines des techniques de calcul utilisées. Mais je crois que cette difficulté psychologique ne sera vaincue que si les expérimentateurs font effectuer des calculs sur des résultats qu'eux seuls connaissent de façon à ce que la comparaison des calculs et de leurs mesures leur fasse venir la foi qui semble actuellement leur faire défaut.

Il faut en outre que les expérimentateurs se persuadent de deux choses : la première c'est que les théoriciens sont à leur service et qu'ils n'effectuent pas de calculs pour les beautés de l'art surtout qu'avec l'emploi des ordinateurs ce n'est plus de l'art mais de la grande série, la seconde est que les théoriciens sont bien conscients qu'ils font des calculs sur des modèles idéalisés qui sont parfois de grossières approches de la réalité et qu'ils ne considèrent donc pas que leurs résultats sont le nec plus ultra. La seule chose qu'un théoricien espère c'est que ses calculs sont corrects et si ses résultats sont en désaccord avec l'expérience il pense que cela signifie qu'une de ses hypothèses est fausse mais non le raisonnement logique.

Dans des problèmes aussi compliqués que ceux de la radioprotection, un progrès ne peut être atteint que par un mélange harmonieux de mesures et de calculs se vérifiant les uns les autres et nous sommes tous prêts, au Laboratoire Central de l'Armement, à accueillir toutes les suggestions qui permettraient d'avancer plus rapidement sur cette voie de la connaissance.