IRSN
INSTITUT
DE RADIOPROTECTION
ET DE SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Faire avancer la sûreté nucléaire

La Méthode de Monte Carlo

Formation CRISTAL

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE
cea

Sommaire

Sommaire

Introduction

- Historique
- Généralités

Application au calcul de criticité

- Simulation
- Vie du neutron
- Sections efficaces
- Convergence
- Estimateurs

Voies de calcul CRISTAL

- Multigroupe
- Ponctuelle

Introduction : Historique

Première version connue

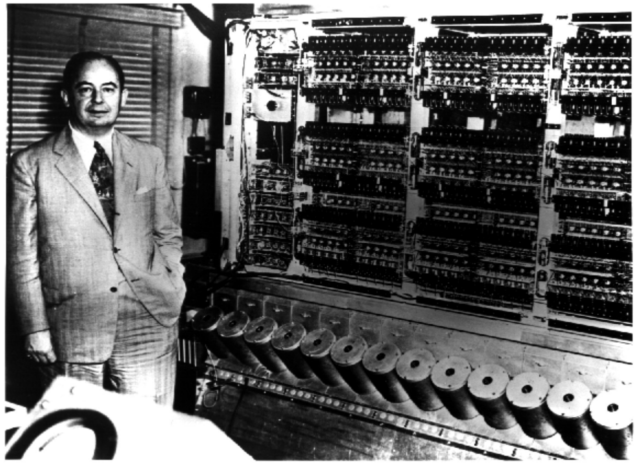
- Expériences des Aiguilles
- Comte de Buffon – XVIIIe siècle – « Essai d'arithmétique morale »

Projet Manhattan

- 1946 – ENIAC – Modèle diffusion neutron dans la matière
- S. Ulam, N. Metropolis, J. Von Neumann

The question was what are the chances that a Canfield solitaire laid out with 52 cards will come out successfully? … , I wondered whether a more practical method than "abstract thinking" might not be to lay it out say one hundred times and simply observe and count the number of successful plays.

S. Ulam



Von Neumann

A ce jour : méthode répandue

- Physique des particules, radiothérapie, météorologie …

Monte Carlo : Une première approche

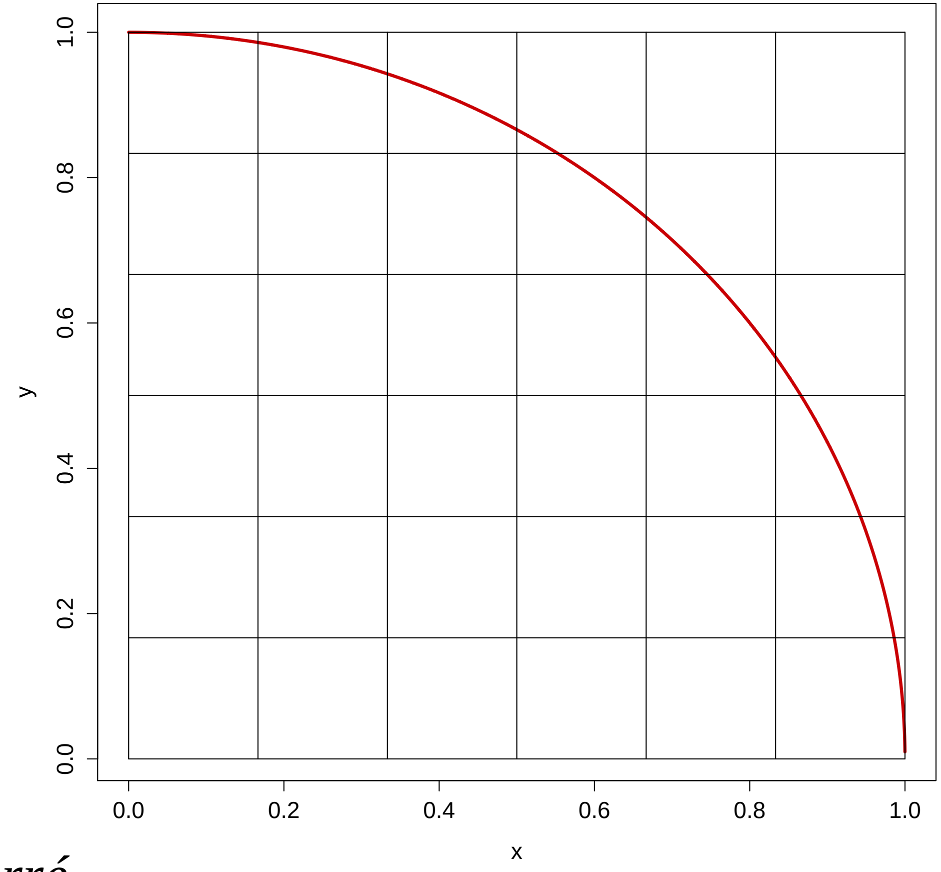
Calcul de π

- Cercle de rayon 1
  - aire = π/4
- inscrit dans carré de coté 1
  - aire = 1

méthode du rejet

- échantillonne coordonnées
  - lance deux dés
- Le point est-il dans le disque?
  - oui : point accepté
  - non : point rejeté
- Aire du disque

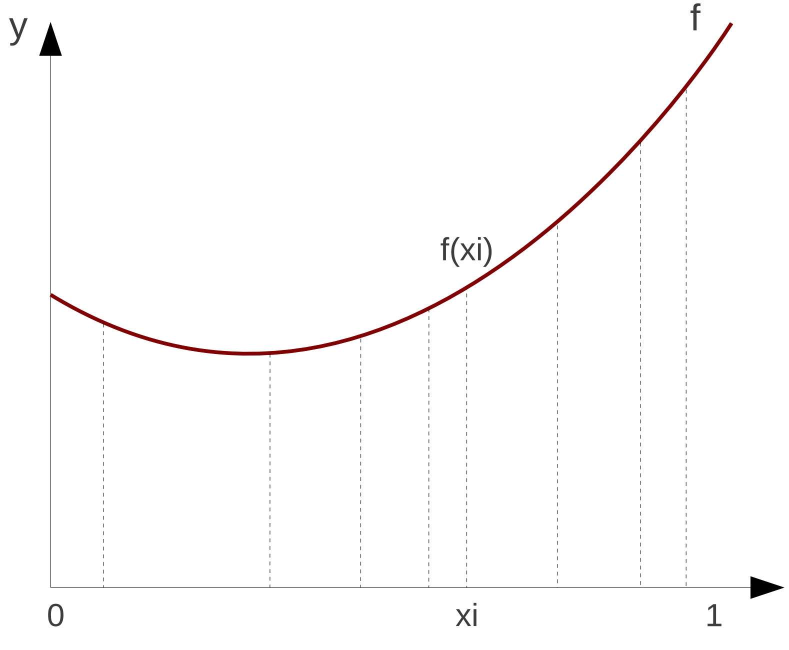
$$\frac{Nb\ tirages\ réussis}{Nb\ total\ tirages} \times aire\ carré$$



Introduction : Calcul d'intégrale

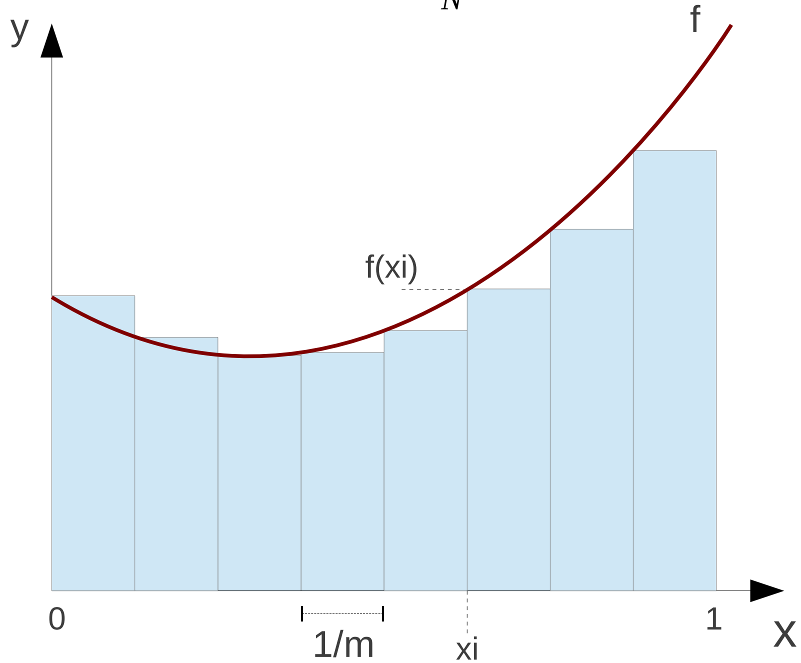
Monte Carlo

- choix aléatoire des xi dans [0,1]
- intégrale : moyenne des f(xi)
- convergence : $\frac{1}{\sqrt{N}}$



Déterministe

- f approchée par fonction en escalier
- xi imposés par la discrétisation
- intégrale : surface des rectangles
- convergence : $\frac{1}{N^{2/d}}$



Introduction : Généralités

Déterministe

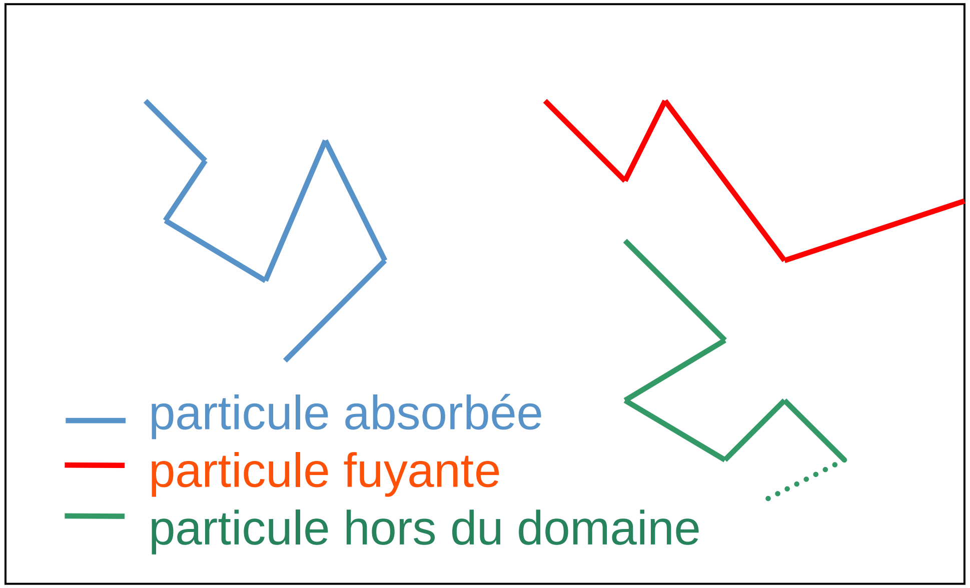
- Résolution de l'équation de transport sur un espace discrétisé
- Pas d'incertitude sur le résultat
- Obtention rapide des résultats
- Requiert approximations (ralentissement, collision)
- Vitesse de convergence dépend dimension du problème
- Limitation à des configuration 1D/2D

Monte Carlo

- Simulation d'un grand nombre de neutrons - comportement moyen
- Incertitude sur le résultat
- Vitesse de convergence indépendante de la dimension
- Possibilité de traiter toutes les configurations géométriques
- Continu en angle, énergie, espace

Application à la neutronique

- Simulation de la vie d'un certain nombre de particules
  - N : naissance
  - T : transport
  - C : collision
  - F : fuite
  - A : absorption
  - D : disparition
    hors du domaine d'intérêt



- Comportement moyen
  - Moyenne sur le comportement des particules simulées

Sommaire

- Introduction
  - Historique
  - Généralités
- Application au calcul de criticité
  - Simulation
    - Organisation, nombres aléatoires
  - Vie du neutron
  - Sections efficaces
  - Convergence
  - Estimateurs
- Voies de calcul CRISTAL
  - Multigroupe
  - Ponctuelle

Equation de Boltzmann

- Équation d'équilibre sur le flux neutronique

$$\phi = v.n$$

- Bilan sur : Transport, Collisions, Diffusions, Fissions

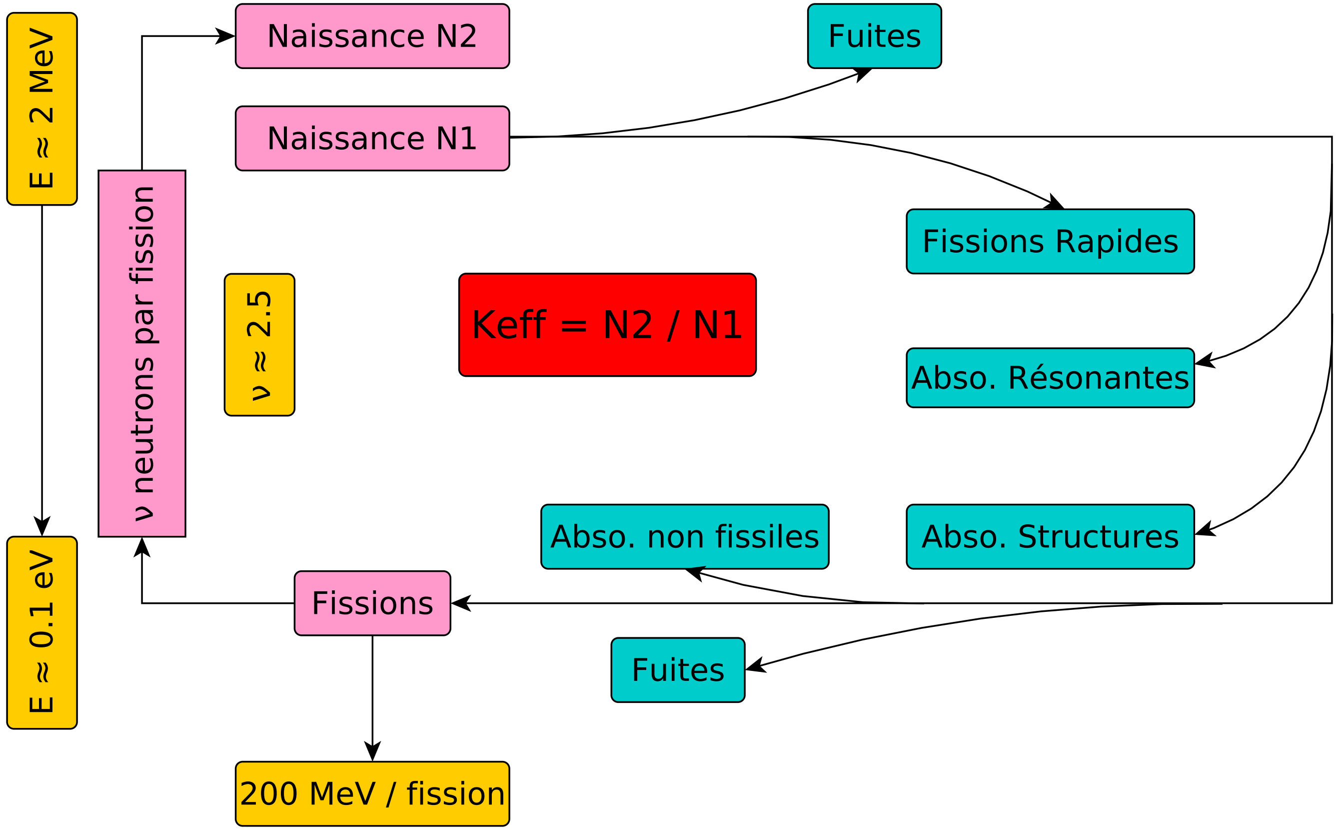
- A priori pas de raisons qu'il y ait l'équilibre
  - Utilisation d'une constante pour ajuster les fissions

$$\underbrace{\Omega.\nabla\phi}_{Transport} + \underbrace{\Sigma_t\phi}_{Collision} = \underbrace{\boldsymbol{S}\phi}_{Diffusion} + \frac{1}{k_{eff}}\underbrace{\mathbf{F}\phi}_{Fission}$$

- keff : distance à la criticité
  - facteur par lequel doit être divisé v pour atteindre la criticité
  - v : nombre moyen de neutron par fission

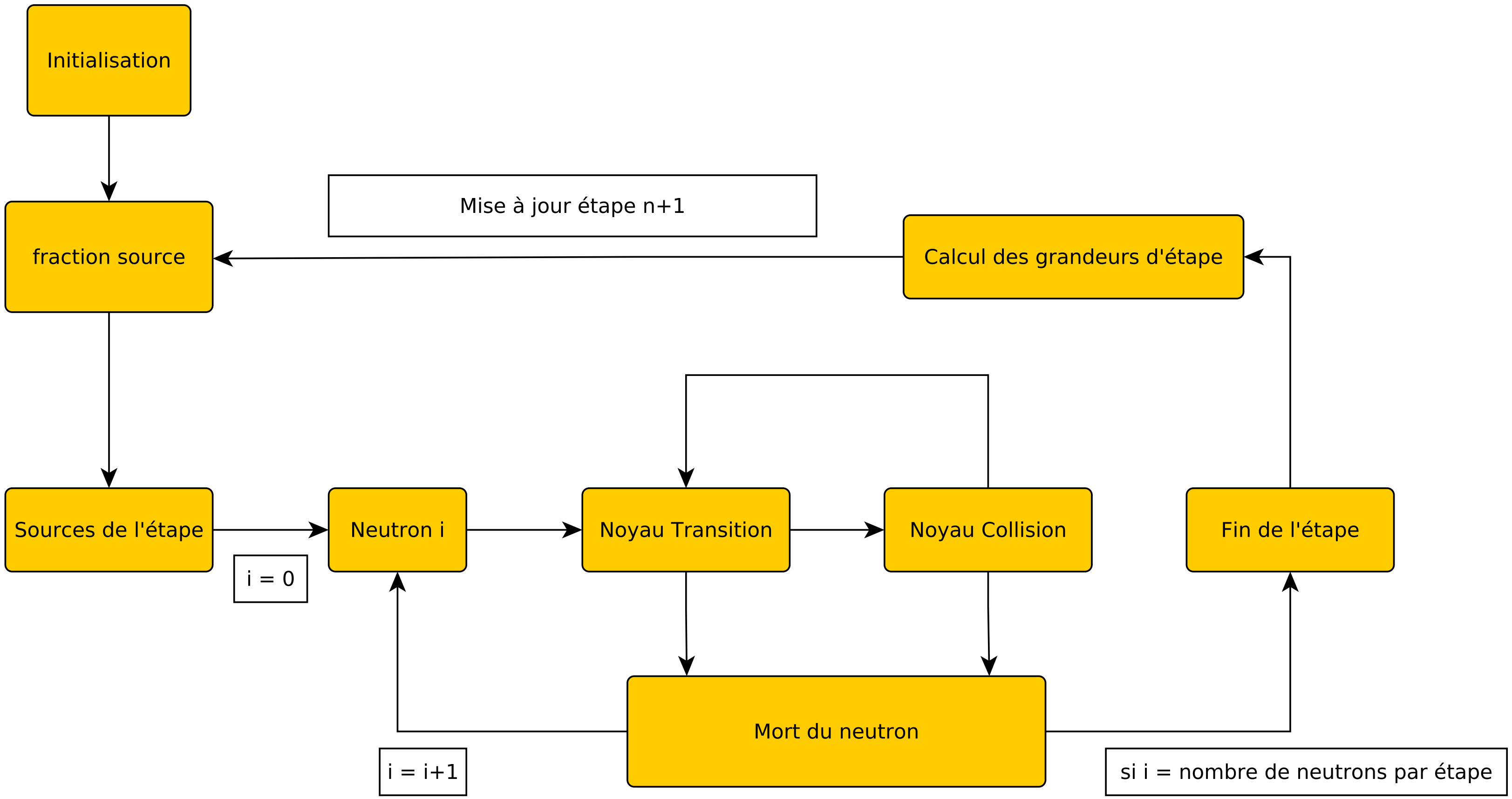
Application à la criticité

- Simulation de générations de neutrons
  - Dépendance d'une génération à l'autre
  - Calcul aux valeurs propres



Simulation

- Naissance, Transport, Collision
- Phénomènes modélisés grâce à des lois de probabilité



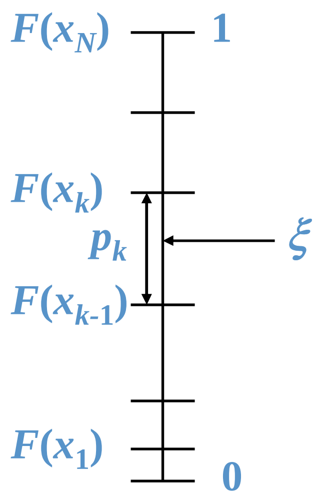
Echantillonnage d'une probabilité

Tirage d'un nombre aléatoire ξ sur [0,1]

- f une densité de probabilité
- F la cumulée associée

Lois discrète (N valeurs possibles)

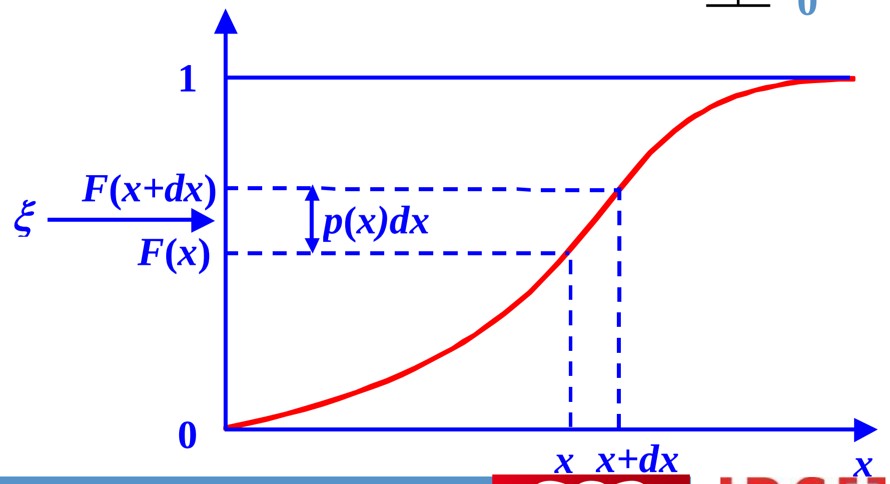
- Dé à 6 faces : x_i = face i
- $f(x_i) = 1/6$
- $F(x_i) = i/6$



$$F(i-1) \le \xi \le F(i)$$

Lois continue

- Recherche de x tel que
- $F(x) = \xi$



Nombres aléatoires

- Nombres pseudo-aléatoires en réalité
- Suite périodique déterministe (très grande période) de réels obtenus entre 0 et 1
- Permet d'obtenir une distribution « uniforme » dans un espace à n dimensions
- « Changer l'aléa » revient à éliminer un certain nombre de premiers termes de la suite
- Ex sur Tripoli4 : $(x_k, a_i \in \{0,1\})$

$$x_k \equiv \sum_{i=1}^{p} a_i \, x_{k-i}$$

$$W_i = x_i \, x_{i+d} \cdots x_{i+(l-1)d}$$

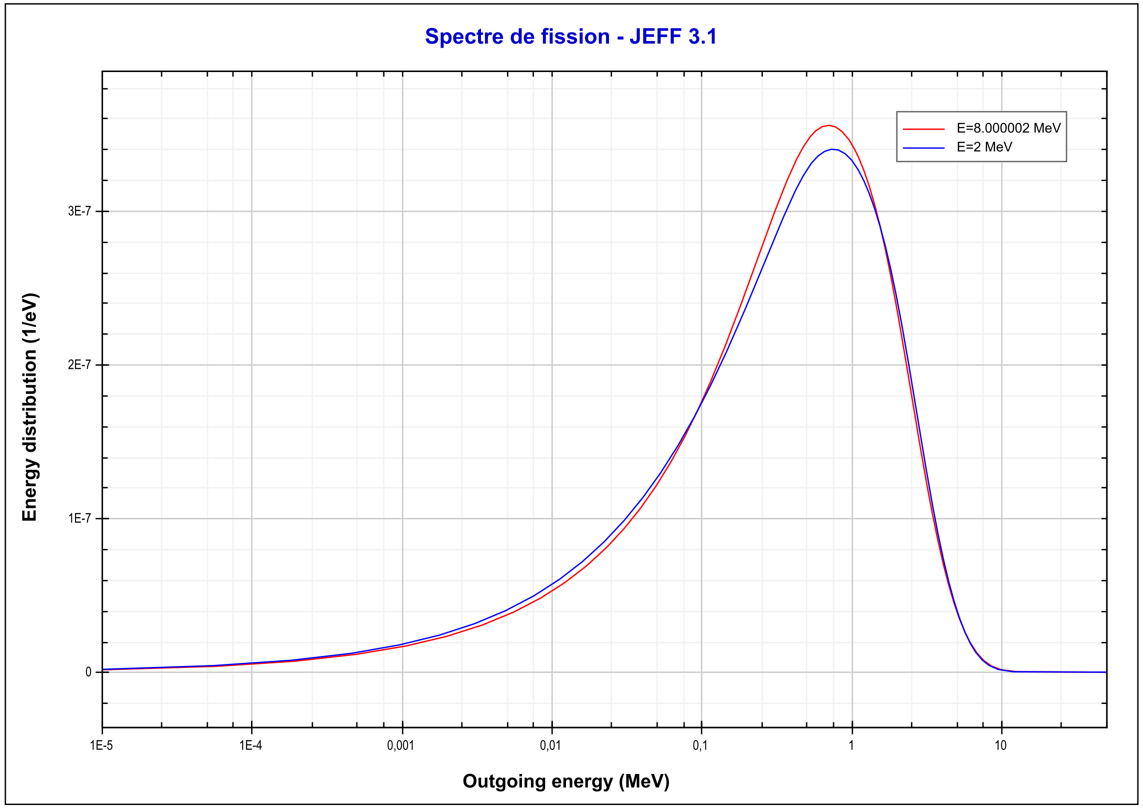
GFSR (Generalized Feed-back Shift Register)
S. Aluru, G.M. Prabhu and J. Gustafson
« A random number generator for parallel computers »
PARALLEL COMPUTING 1992 vol. 18

Sommaire

Naissance

- Coordonnées modifiées : position, énergie, angle
  - distribution géométrique de production, Spectre énergétique, Isotrope

- Distribution énergétique



Sites de naissances pour la génération suivante

- MORET-4
- sites de collision
- Position
  - x,y,z
- poids : $w.\nu.\frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}$
  - poids neutron
  - × nb neutrons produits par fission
  - × proba que le choc soit une fission)
  - intérêt : multiplier le nombre de sites - plusieurs sites par neutron simulé

- TRIPOLI-4
- sites de fission
- Position
  - x,y,z
- poids : $w.\nu$
  - poids neutron
  - × nb neutrons produits par fission

Transport

- Coordonnées modifiées : position
  - Lois de transport

- Loi de probabilité en milieu infini
  - Probabilité de parcourir une distance l sans interactions
  - Interaction entre l et l+dl

$$T(r \rightarrow r') = \Sigma_t \exp(-\Sigma_t l)$$

- Probabilité d'interaction avec traversée de plusieurs milieux
  - Probabilité de parcourir une distance l sans interactions
  - Interaction entre l et l+dl

$$T(r \rightarrow r') = \Sigma_{t,N} \exp(-\sum_{n=1}^{N} \Sigma_{t,n} l_n)$$

Transport

- *Déterminer la distance parcourue sans collision*

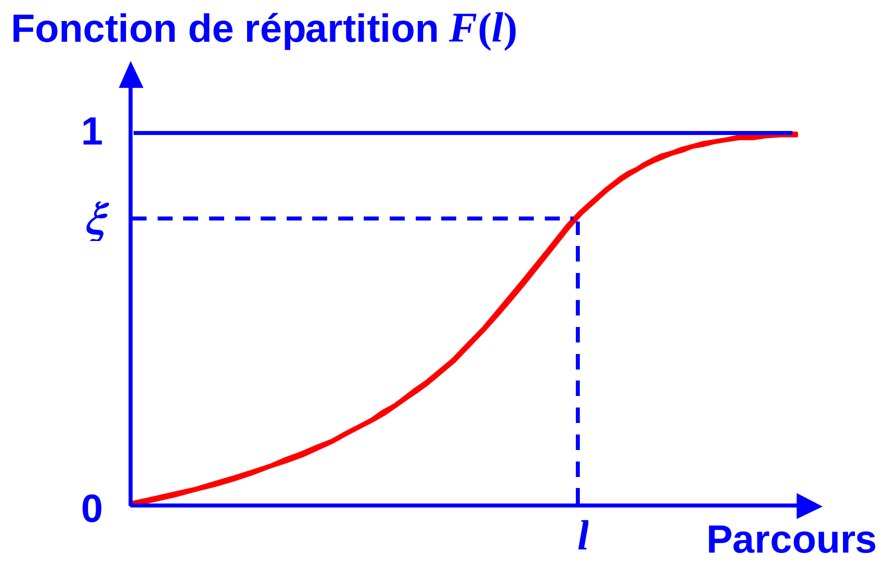
- La fonction de répartition

$$F(l) = \int_0^l p(l)\,dl = 1 - \exp(-\Sigma_t l)$$

- Tirage d'un nombre aléatoire ξ sur [0,1]

- Distance parcourue

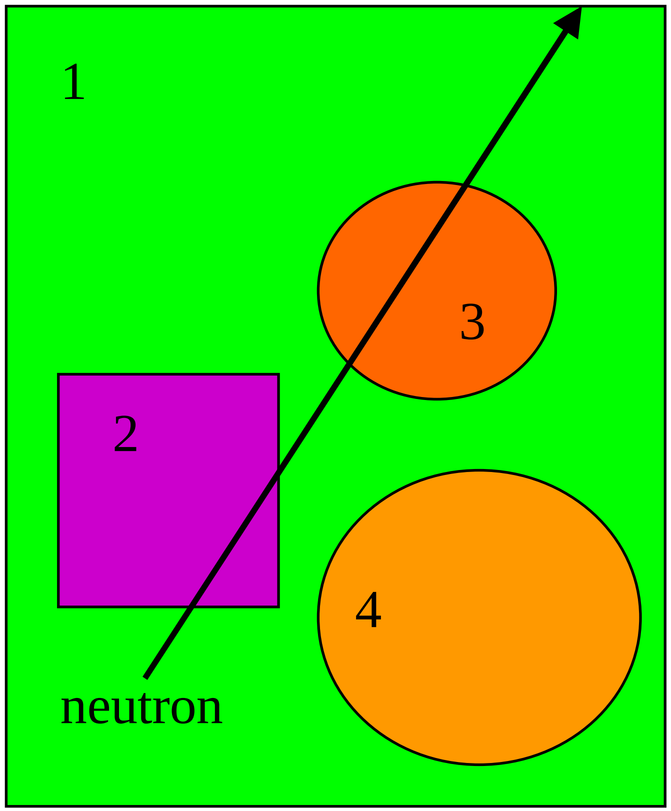
$$l = F^{-1}(\xi) = -\frac{1}{\Sigma_t}\ln(1-\xi)$$



Géométrie

Calcul de la trajectoire dans la géométrie

- Volume courant
- Volume voisins
- Distances aux frontières des volumes
- Intersection de la trajectoire du neutron
- Nécessité de traiter chaque volume
  que le neutron est susceptible de « voir »



Coût de calcul important

- Temps de calcul augmente avec nb volumes

Description

- Volumique (MORET, TRIPOLI)
- Surfacique (MCNP)

Collision

- Coordonnées modifiées : Energie, Angle

- Choix du noyau collisionné
  - en multigroupe : un seul noyau « équivalent »

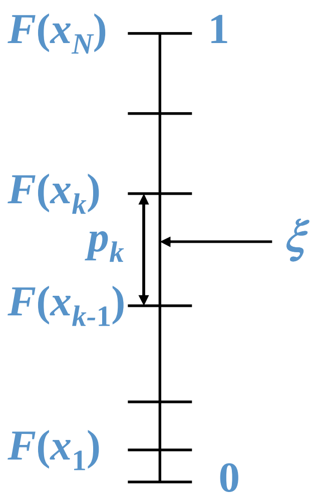
- Choix de l'interaction
  - Diffusion, capture, fission, (n,xn)

- Capture stérile ou fission
  - Traitement équivalent : Absorption
  - Mort du neutron

- Diffusion
  - Lois de détermination des (E,omega) de sortie
  - Lois de la cinématique + sections efficaces : E continu

Collision

- Choix du noyau collisionné parmi N noyaux
  - N_i : nombres d'atomes de chaque noyau (utilisateur)
  - $\sigma_{t,i}$: section microscopique totale de chaque noyau (données nucléaires)
- Probabilité d'interaction avec noyau i $\quad p(i)=\dfrac{N_i\sigma_{t,i}}{\sum_{i=1}^{N} N_i\sigma_{t,i}}$
- Fonction de répartition $\quad F(i)=\sum_{k=1}^{i} p(k)$
- Tirage d'un nombre aléatoire ξ sur [0,1]
- Interaction avec le noyau i tel que $F(i-1)\leq \xi \leq F(i)$
- Cas calcul multigroupe
  - Calcul avec un seul noyau « équivalent »



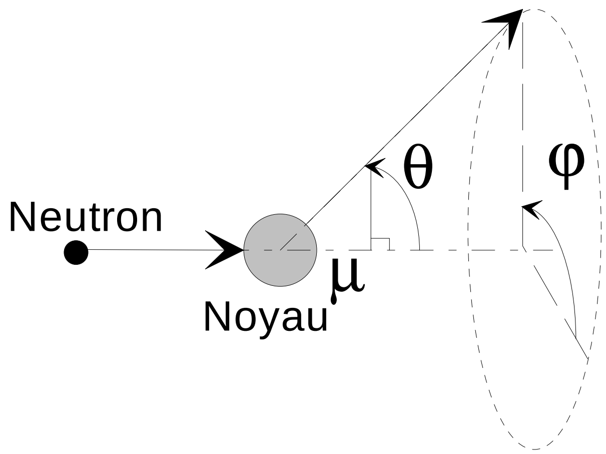
Collision

- Choix de l'interaction
  - $\sigma_{j,i}$: section efficace de l'interaction j du noyau i
- Probabilité de l'interaction j $p_i(j) = \dfrac{\sigma_{j,i}}{\sum_{j=1}^{M} \sigma_{j,i}} = \dfrac{\sigma_{j,i}}{\sigma_{t,i}}$
- Fonction de répartition $F(j) = \sum_{k=1}^{j} p_i(k)$
- Tirage d'un nombre aléatoire ξ sur [0,1]
- Interaction j tel que $F(j-1) \leq \xi \leq F(j)$
- Interaction différentes selon traitement énergie
  - Continu : traitement de toutes les réactions
  - multigroupe : réactions « équivalente »
    - pas de distinction entre les différentes diffusions

Collision

- Détermination des cosinus et énergies de sortie

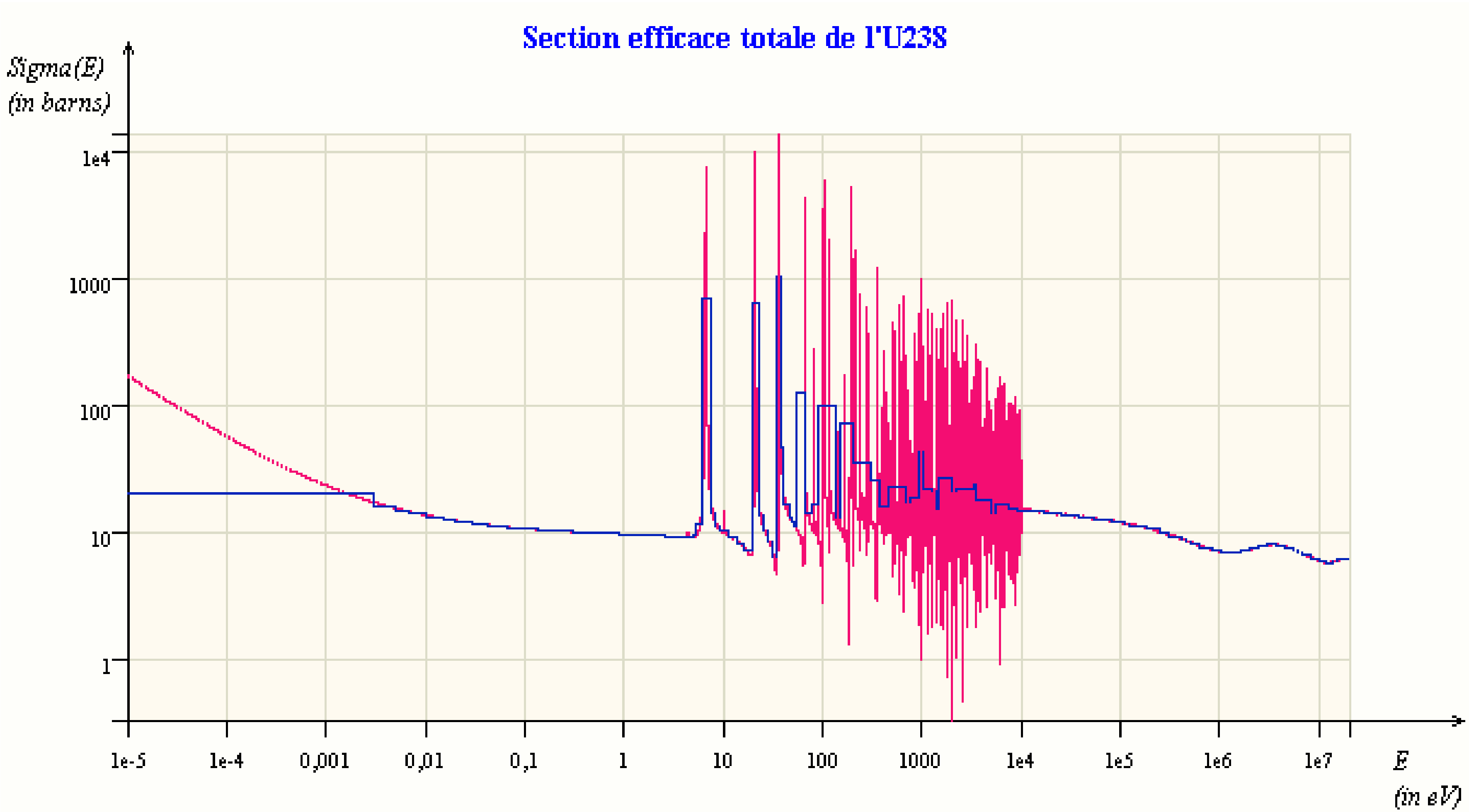
- Energie continue
  - Cosinus de sortie
    - section efficaces
  - Energie de sortie
    - sections efficaces
    - cinématique à 2 corps



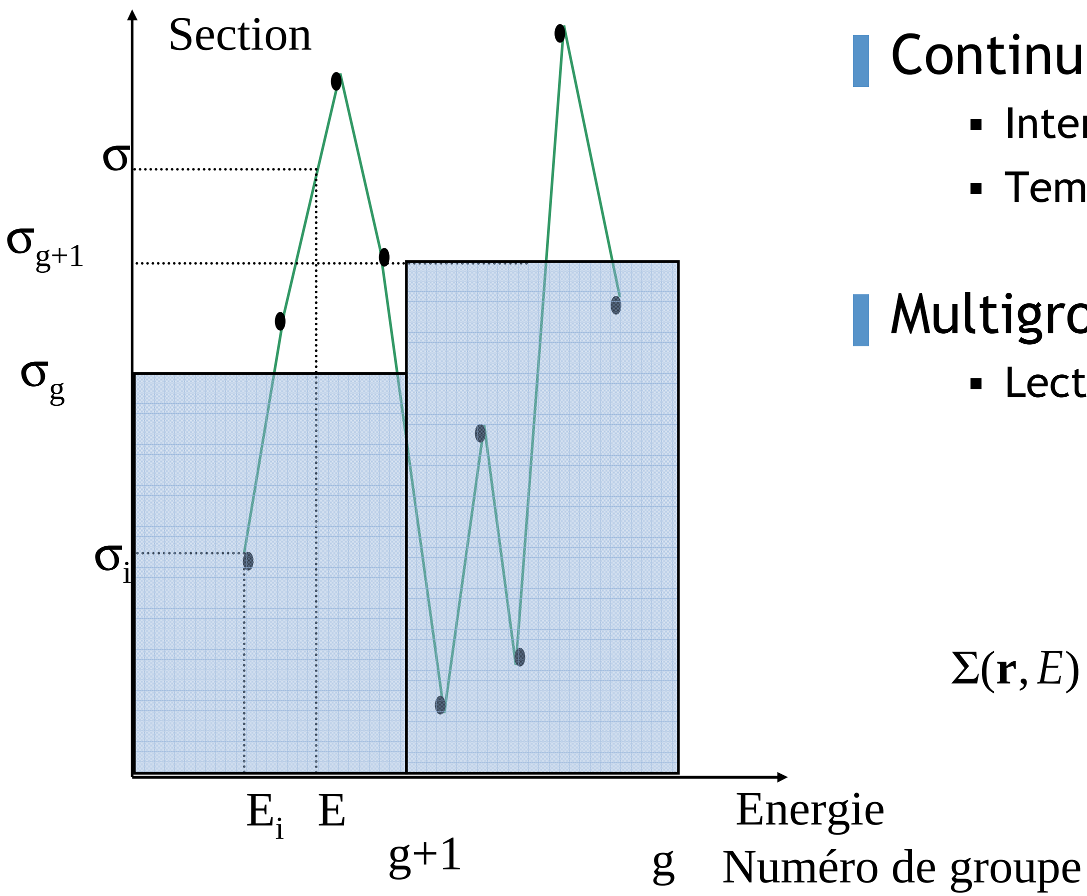
- Multigroupe
  - Détermine le groupe d'arrivée
    - matrice de transfert
  - Cosinus de sortie
    - Lois : polynômes de Legendre
    - Peut prendre des valeurs négatives
  - Modèles pour représenter l'anisotropie
    - Coveyou (P1), Lux (P3), Angles Discret (≥P5)

Sommaire

Sections efficaces



Sections efficaces



- **Continu**
  - Interpolation linéaire entre les valeurs
  - Temps de calcul
- **Multigroupe**
  - Lecture directe des valeurs

$$\Sigma(\mathbf{r},E) \rightarrow \Sigma_g(\mathbf{r}) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma(\mathbf{r},E)\phi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E)dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E)dE}$$

Sections efficaces

$$\Sigma(\mathbf{r},E) \rightarrow \Sigma_g(\mathbf{r}) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma(\mathbf{r},E)\phi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E)dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E)dE}$$

Production de sections multigroupes

- Rôle important des hypothèses sur la forme du flux $\phi(E)$

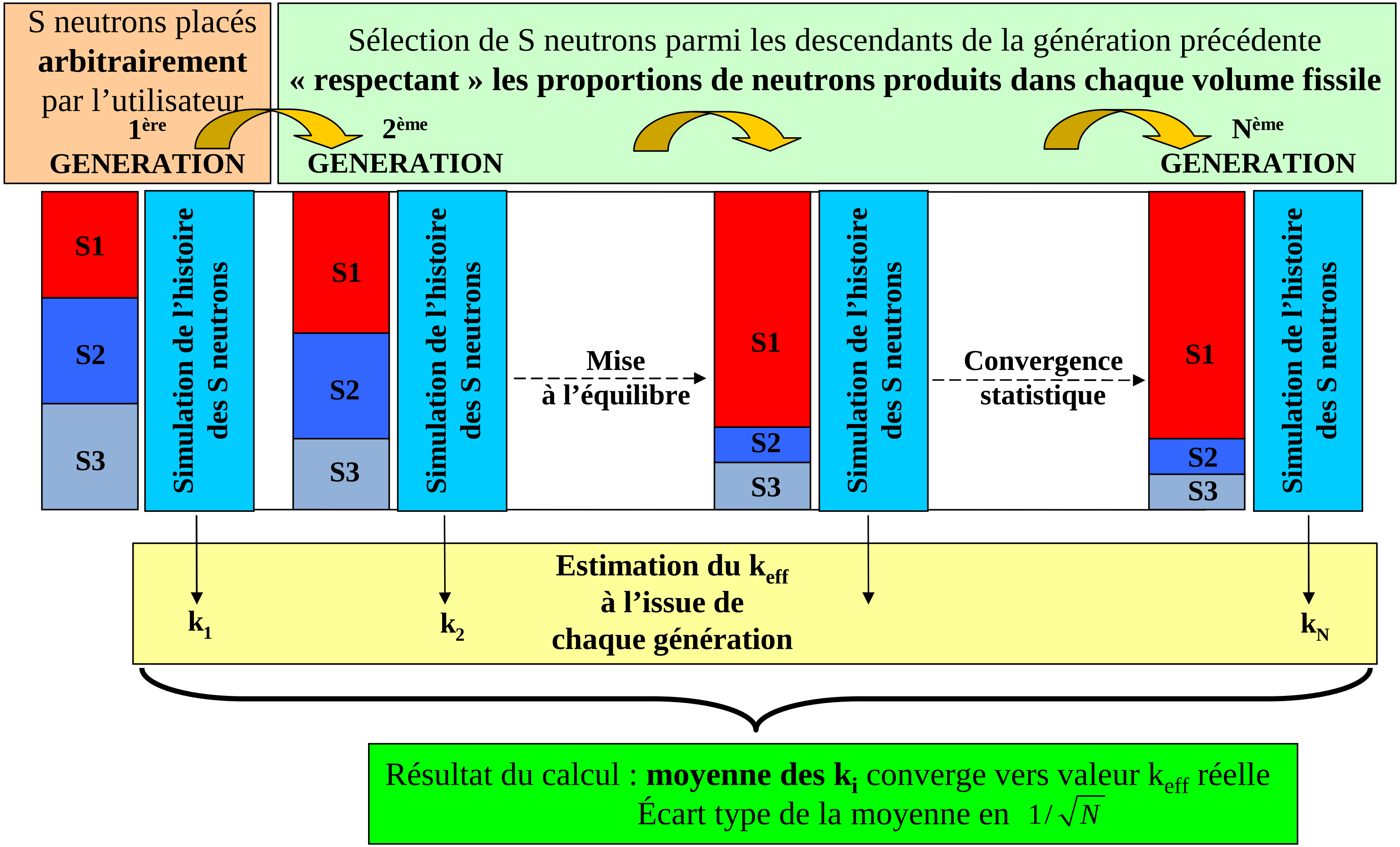
Comparer les flux multigroupe et ponctuel

- Multigroupe : pas de division par ΔE
  - pas une densité
- Comparaison graphiques de flux MORET / flux TRIPOLI
  - Attention les formes peuvent donc être différentes
  - Diviser les valeurs multigroupes par ΔE

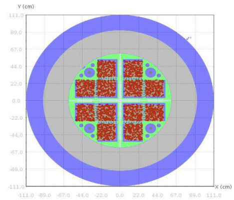
Sommaire

- Introduction
  - Historique
  - Généralités
- Application au calcul de criticité
  - Simulation
  - vie du neutron
  - Sections efficaces
  - Convergence
  - Estimateurs
- Voies de calcul CRISTAL
  - Multigroupe
  - Ponctuelle

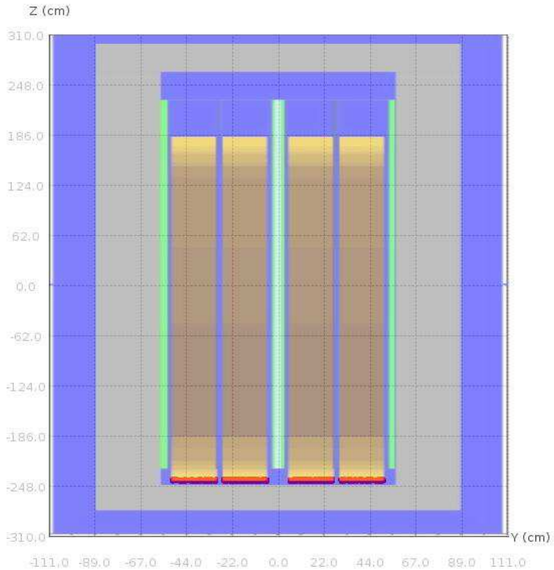
Convergence

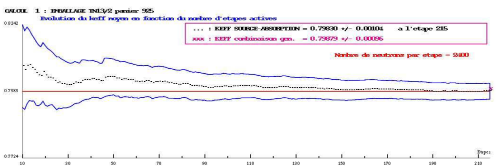


Convergence : Un exemple

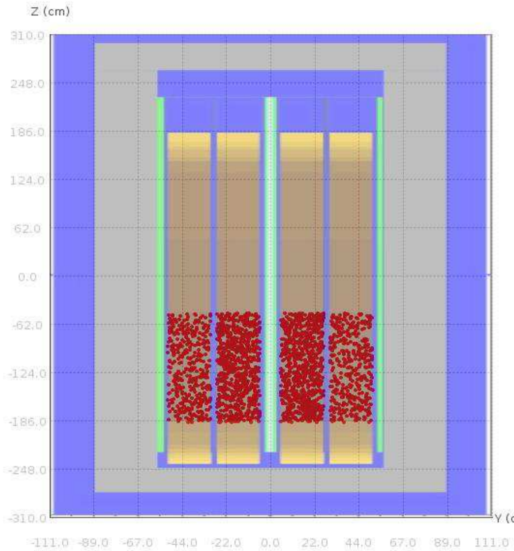


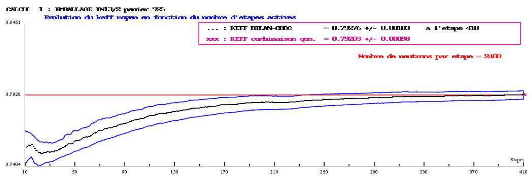
Keff = 0.799 +/- 100 pcm
218 batchs / 2400 neutrons



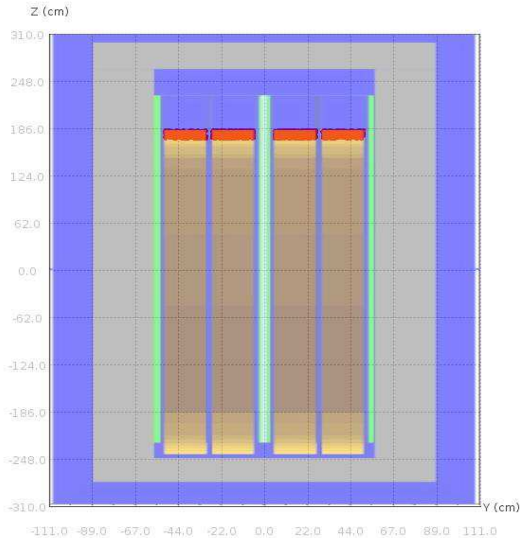


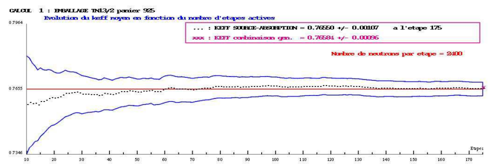
Keff = 0.792 +/- 100 pcm
413 batchs / 2400 neutrons





Keff = 0.766 +/- 100 pcm
178 batchs / 2400 neutrons



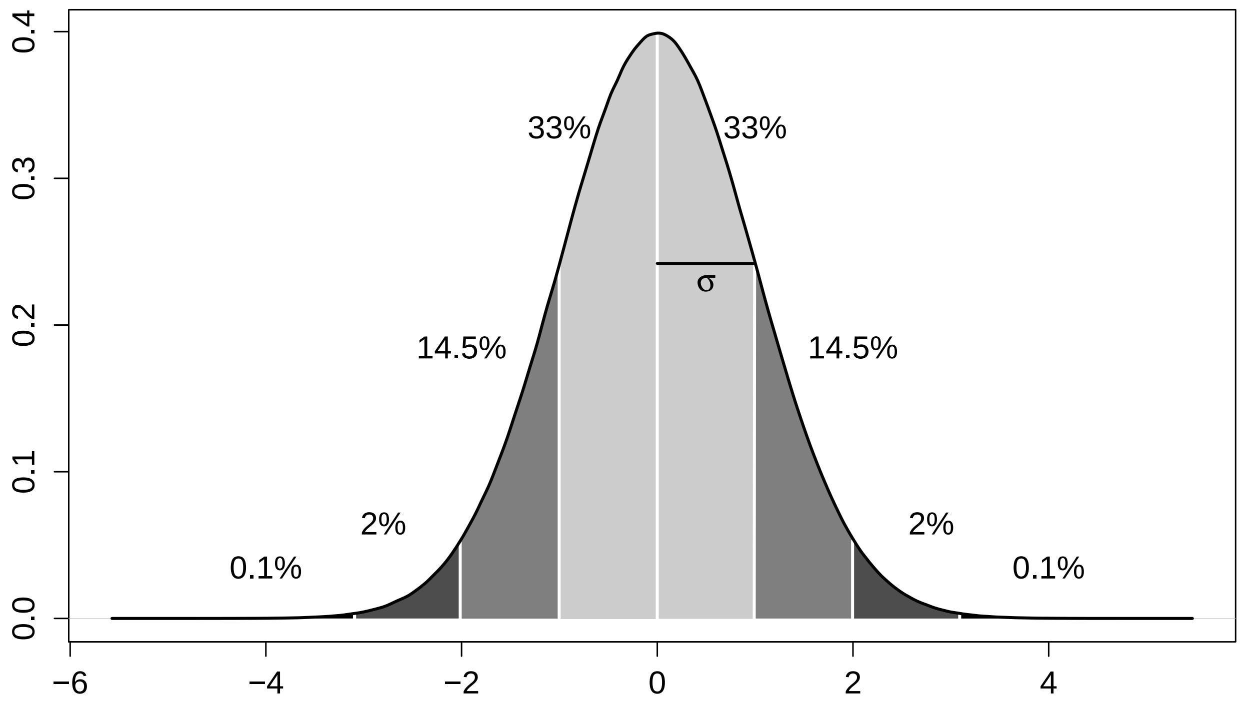


Les Questions à se poser pour garantir une bonne convergence

- Quelle est la distribution initiale ?
  - Les volumes les plus réactifs contiennent-il des neutrons sources ?
  - Cette distribution est-elle proche du mode fondamental ?
- Échantillonnage ?
  - Combien de neutrons faut-il simuler par étape ?
  - Combien d'étapes ?
- Quelle est la longueur du transitoire ?
  - À quelle étape commencer les encaissements ?
- Caractéristiques des cas difficiles
  - Systèmes peu couplés du point de vue neutronique
    - Un cœur complet de réacteur
    - Un crayon de 4m à fort taux de combustion
    - Entreposage piscine – combustibles irradiés

Sommaire

Estimateurs : nature du résultat



Variables aléatoires

- Moyenne μ
- Ecart type σ

Intervalle de confiance

- $[\mu - N\,\sigma, \mu + N\,\sigma]$
- Pour N = 1, la probabilité est 0.66
- Pour N = 2, la probabilité est 0.95
- Pour N = 3, la probabilité est 0.99

Estimateurs

- Estimation sur les collisions d'une grandeur

$$I = \int f(x)\phi(x)dx$$

- Estimateur collision : évènements selon densité Ψ

$$\psi = \Sigma_t \phi$$

- Calcul de

$$I = \int f(x)\frac{\psi(x)}{\Sigma_t(x)}dx$$

- Dans le calcul Monte Carlo :
  - neutrons y_n selon Ψ
  - w_n : poids statistique du neutron

$$\bar{I} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} w_n \frac{f(y_n)}{\Sigma_t(y_n)}$$

Estimateurs

- Valeur par génération
- Détermine moyenne et l'écart type
- Trois estimateurs
  - Estimation repose sur des évènements différents
  - Collision, absorption, déplacement
  - Taux d'exces (n,xn) ne peuvent pas être estimés par l'absorption
- Comparer les flux multigroupe et ponctuel
  - Multigroupe : pas de division par ΔE
    - pas une densité
  - Comparaison graphiques de flux MORET / flux TRIPOLI
    - Attention les formes peuvent donc être différentes
    - Diviser les valeurs multigroupes par ΔE

Estimateurs de flux

- **Fonction de réponse f = 1**
  - Poids statistique du neutron w_n

- **Estimateurs pour le flux**
  - dans un volume V et groupe g
  - Collisions $$\overline{\phi}_{V,g} = \frac{1}{N} \sum_{neutrons}^{N} \sum_{collisions} w_n \frac{1}{\Sigma_t} \delta(V,g)$$
  - Absorptions $$\overline{\phi}_{V,g} = \frac{1}{N} \sum_{neutrons}^{N} w_n \frac{1}{\Sigma_a} \delta(V,g)$$
  - Déplacement $$\overline{\phi}_{V,g} = \frac{1}{N} \sum_{neutrons}^{N} \sum_{déplacement} w_n \ell_n \delta(V,g)$$

Estimateurs de taux de production

- Fonction de réponse $f = \nu\Sigma_f$
  - Poids statistique du neutron w_n

- Estimateurs pour le flux
  - dans un volume V et groupe g

  - Collisions $$\bar{\phi}_{V,g} = \frac{1}{N} \sum_{neutrons}^{N} \sum_{collisions} w_n \frac{\upsilon\Sigma_f}{\Sigma_t} \delta(V,g)$$

  - Absorptions $$\bar{\phi}_{V,g} = \frac{1}{N} \sum_{neutrons}^{N} w_n \frac{\upsilon\Sigma_f}{\Sigma_a} \delta(V,g)$$

  - Déplacement $$\bar{\phi}_{V,g} = \frac{1}{N} \sum_{neutrons}^{N} \sum_{déplacement} w_n \ell_n \upsilon\Sigma_f \delta(V,g)$$

Estimateurs du keff

- 2 définitions classiques du keff
  - Source $$k_{eff} = \frac{\text{production s durant la génération}}{\text{nb neutrons simulés durant la génération}}$$
  - Bilan $$k_{eff} = \frac{\text{productions durant la génération}}{\text{bilan des neutrons de la génération}}$$
- productions, absorptions et excès estimés à partir du même estimateur de flux (choc, absorption, corde)

- Keff bilan a généralement une variance plus faible

Estimateurs

- Aucun estimateur n'est performant dans tous les cas

- Tous les estimateurs convergent vers le même résultat mais de façon plus ou moins rapide en fonction de la configuration

- Meilleur estimateur selon les cas :
  - absorption : milieu infini
  - corde : milieux compacts de faible épaisseur optique
  - choc : autres cas

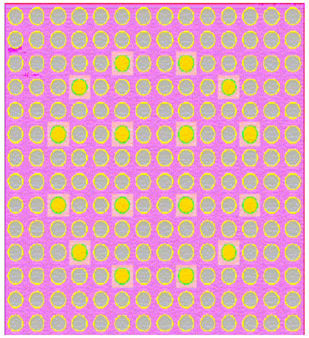
Sommaire

- Introduction
  - Historique
  - Généralités
- Simulation
  - Quelques éléments calcul
    - Organisation, nombres aléatoires, géométrie
  - Les lois régissant la vie d'un neutron
    - Naissance, Transport, Interaction
  - Sections efficaces
  - Convergence
    - Définition des Sources
  - Estimateurs
- Voies de calcul CRISTAL
  - Multigroupe
  - Ponctuelle

Voies CRISTAL : APOLLO2 – MORET4

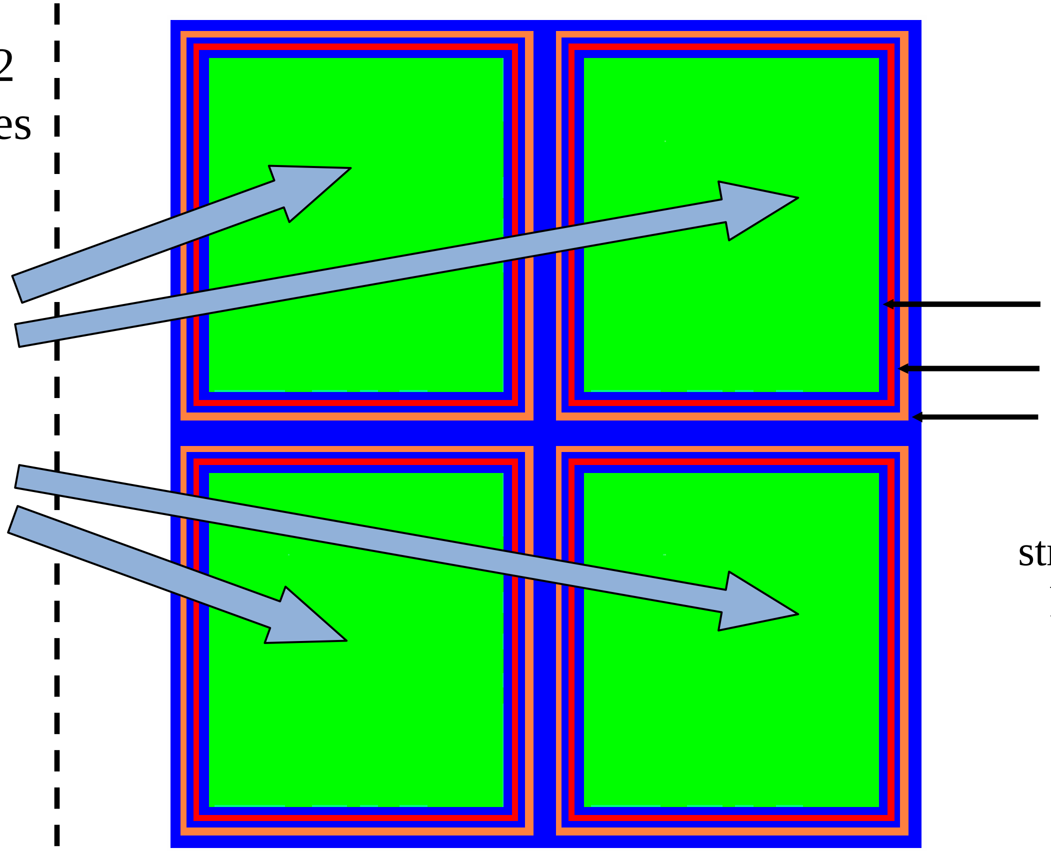
1ère Etape

Assemblage 14 × 14
calculé par APOLLO2
Sections homogénéisées
et autoprotégées



+ Calcul des milieux
de structure par
APOLLO2

2ème Etape



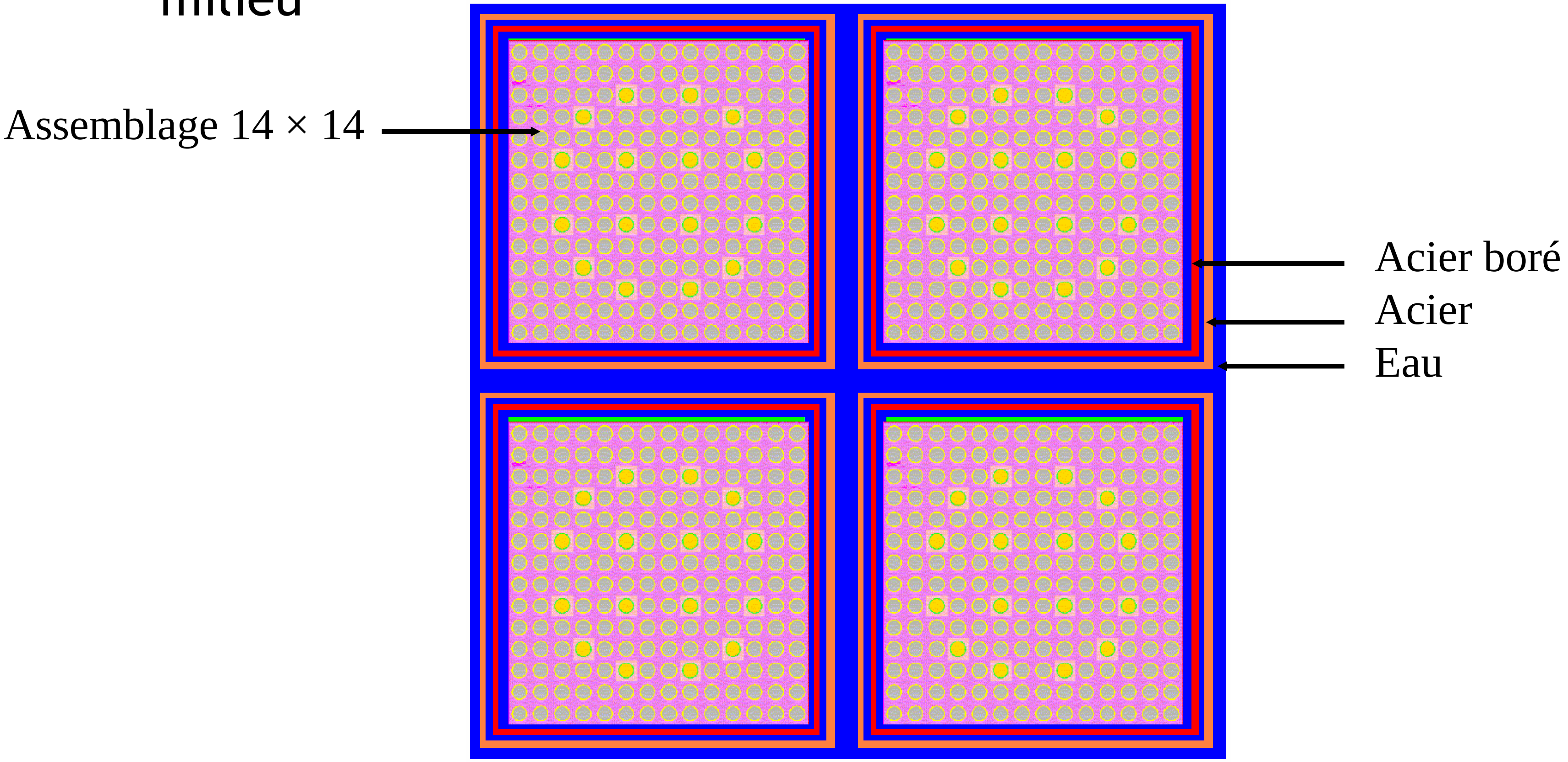
<u>code d'étude de projets (grand nombre de calculs à effectuer)</u>

<u>Optimisation coût-précision (déterministe pour hétérogénéités locale + stochastique pour complexité de la géométrie)</u>

Les milieux de structure sont aussi homogénéisés :
Un seul noyau équivalent

Voies CRISTAL : TRIPOLI4

- Description géométrique détaillée
- Sections ponctuelles pour chacun des isotopes de chaque milieu



Temps de calcul

- **Comparaison**
  - Multigroupe
  - Continu

Configuration				APOLLO2-MORET4					TRIPOLI4			facteur de mérite A2-M4 / T4
géométrie	volumes	isotopes	neutrons	étapes	sigma (pcm)	Tps (s) A2	Tps (s) M4	Tps total (s)	batchs	sigma (pcm)	Tps (s)	
Sphère U235	1	1	2000	251	**98**	1.38	74.6	**75.98**	650	**107**	**266**	**3.8**
Sphère U-Pu	1	6	2000	204	**97**	3.94	111.6	**115.5**	650	**101**	**546**	**4.9**
Sphère U-H2O	1	3	2000	324	**91**	1.92	150.7	**152.6**	650	**109**	**293**	**2.3**
benchmark : réseau 20 x 20 MOX	M4 : 17 T4 : 13 + 5 par maille		2000	324	**93**	33.4	2029	**2062**	1000	**74**	**18572**	**7.2**

Quelques références

- Essai d'arithmétique morale, *G. Comte de Buffon*, Supplément à la naturelle, Vol.4, 1777
- Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo Method, *R. Eckhardt*, Los Alamos Science, Special Issue, pp. 131-143, 1987
- N. Metropolis. The beginning of the Monte Carlo method. Los Alamos Science, Special issue, 1987
- Monte Carlo particle transport methods : neutron and photons calculations, I.Lux L.Koblinger, CRC Press 1991