

# Projet Monte-Carlo — Étude de la criticité de l'uranium

Groupe : Luc Eustachon, Jose Alfaro, Farah Dogui, Rana Korchid

## Introduction

Ce projet utilise Python (Google Colab) pour simuler la criticité de l'uranium en faisant évoluer le modèle minimal du TP vers une approche plus réaliste. La démarche consiste à critiquer les limites du modèle initial (milieu infini, paramètres fixes) avant d'introduire un modèle probabiliste intégrant des pertes et une multiplicité aléatoire. Enfin, nous lions ces probabilités à la physique réelle en intégrant l'énergie des neutrons et les sections efficaces issues de la bibliographie citée en fin de rapport.

## I — Modèle minimal du TP : description, interprétation et limites

### I.1 Description du modèle et interprétation physique

**Modèle théorique de référence** – À la base de la cinétique neutronique se trouve le modèle déterministe en temps continu. L'évolution du nombre de neutrons  $N(t)$  est décrite par l'équation différentielle fondamentale :

$$\frac{dN}{dt} = (k - 1) \lambda N(t) \implies N(t) = N_0 e^{(k-1)\lambda t}$$

Ce modèle prédit une évolution exponentielle stricte. C'est cette dynamique de référence que nous cherchons à simuler, bien que l'approche numérique du TP soit différente.

**Approche discrète du TP** – Pour simuler ce phénomène, le TP utilise un modèle simplifié en *générations successives* (discret). Le modèle repose sur les hypothèses suivantes :

- milieu infini (pas de fuite) ;
- composition isotopique homogène et constante ;
- toute interaction avec  $^{235}\text{U}$  provoque une fission ;
- chaque fission produit exactement deux neutrons.

La probabilité de fission est assimilée à la proportion atomique  $p$  de  $^{235}\text{U}$  : un neutron produit 2 neutrons avec probabilité  $p$ , et 0 sinon. Le paramètre clé est alors le facteur de multiplication moyen :  $m = 2p$ .

On interprète  $m$  comme le nombre moyen de neutrons produits à la génération suivante par neutron actif :

- $m < 1$  : extinction en moyenne ;
- $m = 1$  : régime critique (stabilité moyenne) ;
- $m > 1$  : croissance en moyenne.

Pour l'uranium naturel ( $p \simeq 0,007$ ), on obtient  $m \simeq 0,014 \ll 1$  : le modèle prédit donc une extinction très rapide.

Ce modèle permet de visualiser la transition sous-critique / critique / sur-critique. En revanche, il confond dans  $p$  des mécanismes distincts et ne vise pas un seuil réaliste.

### I.2 Seuil de criticité et limites structurantes

Le seuil critique du modèle est défini par  $m = 1$ , soit  $p_c = 0,5$ . Le caractère irréaliste de cette valeur met en évidence les mécanismes absents.

- l'absence de fuite (milieu infini) ;
- l'absence de capture sans fission ;
- la multiplicité fixée à 2 ;
- l'absence de dépendance en énergie (probabilités constantes).

La suite du projet introduit ces effets progressivement : (i) pertes explicites, (ii) multiplicité aléatoire, (iii) probabilités motivées par  $\sigma_f(E)$ ,  $\sigma_c(E)$  et  $\sigma_s(E)$ .

## II — Premier modèle amélioré

### II.1 Motivation

Le modèle minimal est volontairement extrême : toute interaction se résume à *fission* (probabilité  $p$ ) ou *extinction* (probabilité  $1 - p$ ), avec une multiplicité fixée à 2 neutrons. Cela conduit à une dynamique trop « nette » et ne distingue pas des mécanismes physiques qui ont pourtant des effets très différents sur la durée de la chaîne. On introduit donc un modèle probabiliste **effectif** qui sépare ces contributions, tout en restant simple à simuler par Monte-Carlo.

### II.2 Modèle amélioré

À chaque neutron, on associe trois issues exclusives :

- **fission** : production de nouveaux neutrons ;
- **perte** : disparition ;
- **diffusion** : le neutron *survit* et reste actif à la génération suivante.

On note  $p$  la proportion de  $^{235}\text{U}$ , et on introduit des probabilités *effectives*  $p_f$  (fission),  $p_L$  (perte) et  $p_0$  (diffusion), avec la contrainte :  $p_f \geq 0$ ,  $p_L \geq 0$ ,  $p_0 = 1 - p_f - p_L \geq 0$ .

Conformément au code, on relie ces probabilités à  $p$  par :

$$p_f = \alpha p, \quad p_L = \beta(1 - p), \quad p_0 = 1 - \alpha p - \beta(1 - p),$$

où  $\alpha$  représente une efficacité globale de fission, et  $\beta$  règle l'intensité des pertes.

Dans l'implémentation, on a fixé  $\alpha = 0.6$  et  $\beta = 0.4$ , ce qui garantit  $p_f + p_L \leq 1$  sur la plage de  $p$  testée. Conditionnellement à une fission, la multiplicité  $\nu$  est aléatoire :

$$\nu = \begin{cases} 1 & \text{avec probabilité 0,25,} \\ 2 & \text{avec probabilité 0,50,} \\ 3 & \text{avec probabilité 0,25.} \end{cases}$$

Même avec la même moyenne, cette variabilité augmente la dispersion des trajectoires, surtout près du régime critique.

### II.3 Simulation Monte-Carlo

Dans un réacteur réel, le nombre de neutrons est de l'ordre de  $10^{18}$ . Il est impossible de simuler chaque neutron individuellement. Nous simulons donc un **échantillon réduit** (ici quelques milliers) qui fournit une *estimation statistique* du comportement global, au prix d'une incertitude statistique (bruit) que l'on réduit en moyennant plusieurs réalisations.

On simule une trajectoire génération par génération. En notant  $Z_g$  le nombre de neutrons actifs à la génération  $g$  :

- initialisation :  $Z_0 = 1$  ;
- pour chaque neutron actif, tirage d'un réel  $r \sim \mathcal{U}(0, 1)$  :
  - si  $r < p_f$  : fission, et on ajoute  $\nu \in \{1, 2, 3\}$  neutrons ;
  - sinon si  $r < p_f + p_L$  : perte, on ajoute 0 neutron ;
  - sinon : diffusion/neutralité, on ajoute 1 neutron (le neutron est conservé).
- arrêt à extinction ( $Z_g = 0$ ) ou au plafond  $T_{\max}$ .

On répète  $N$  trajectoires indépendantes pour estimer des grandeurs moyennes et leur variabilité.

## III — Résultats et interprétation

### III.1 Mesure et estimateur

Pour chaque valeur de  $p$ , on simule  $N$  trajectoires indépendantes et on mesure  $T = \min(\text{génération d'extinction}, T_{\max})$ . L'estimateur est :  $\hat{\mathbb{E}}[T](p) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N T^{(j)}(p)$ .

### III.2 Coût de calcul (complexité)

Une trajectoire est simulée en traitant tous les neutrons présents à chaque génération.  $C_{\text{traj}} \propto \sum_{g=0}^{T-1} Z_g$ . Ainsi, pour une grille de  $M$  valeurs de  $p$  et  $N$  trajectoires par point :  $C_{\text{total}} \propto M N \mathbb{E}\left[\sum_{g=0}^{T-1} Z_g\right]$ . Ce coût peut augmenter très vite lorsque  $p$  approche la zone critique, car les trajectoires deviennent plus longues et la population  $Z_g$  peut croître fortement.

### III.3 Résultats

(i)  $\hat{\mathbb{E}}[T](p)$  **augmente avec  $p$** . Dans les deux modèles, augmenter  $p$  augmente la probabilité de fission, donc allonge la durée moyenne avant extinction.

(ii) **Interprétation de l'écart** : Dans notre implémentation, l'issue « diffusion/neutralité » conserve le neutron : il reste actif et peut tenter une interaction, ce qui allonge mécaniquement les chaînes, même en présence de pertes. De plus, la variabilité de  $\nu$  augmente la dispersion des trajectoires par rapport au modèle TP binaire.

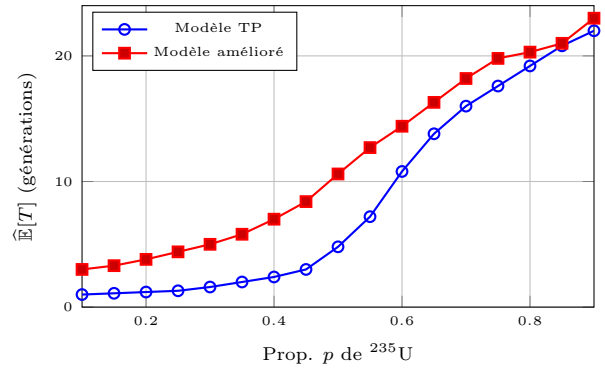


Figure 1: Comparaison des modèles.

## VI — Modèle plus physique : énergie, sections efficaces et diffusion

### VI.1 Pourquoi introduire l'énergie et les sections efficaces

Dans les modèles précédents, les probabilités  $p_f$ ,  $p_L$ ,  $p_0$  étaient des paramètres effectifs. Ici, on veut au contraire relier ces probabilités à la **physique microscopique** des interactions neutron-noyau.

L'idée est : **chaque neutron porte une énergie  $E$**  (en eV), et les probabilités de réaction dépendent de cette énergie via les **sections efficaces**  $\sigma(E)$  (approximées à partir de tables de type ENDF et interpolées en log-log). On simule un milieu infini d'uranium naturel:

$$N_{235} = 0.007, \quad N_{238} = 0.993.$$

### VI.2 Des sections efficaces aux probabilités (contact + fission)

À l'énergie  $E$ , le code calcule les sections efficaces totales  $\sigma_{\text{tot}}^{235}(E)$  et  $\sigma_{\text{tot}}^{238}(E)$ , puis forme des *poids* proportionnels à  $N \sigma_{\text{tot}}$ . La probabilité de « contact » avec  $^{235}\text{U}$  est alors :

$$p(\text{contact } 235 \mid E) = \frac{N_{235} \sigma_{\text{tot}}^{235}(E)}{N_{235} \sigma_{\text{tot}}^{235}(E) + N_{238} \sigma_{\text{tot}}^{238}(E)}.$$

Si le neutron interagit avec  $^{235}\text{U}$ , une fission est tirée avec la probabilité conditionnelle :

$$p(\text{fission} \mid 235, E) = \frac{\sigma_f^{235}(E)}{\sigma_{\text{tot}}^{235}(E)}.$$

Ainsi,  $p_f$  n'est plus imposée : elle *découle* directement des courbes  $\sigma(E)$  utilisées dans la simulation.

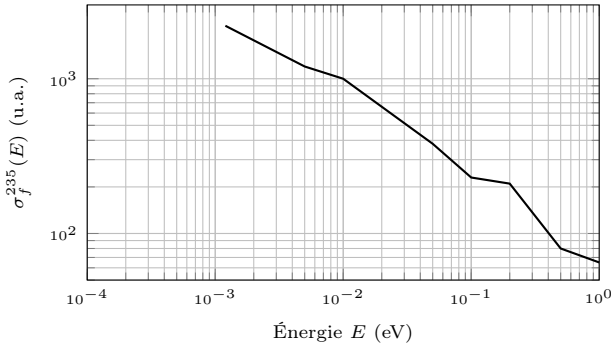


Figure 2: Tendance de  $\sigma_f^{235}(E)$ .

$$\bar{\nu}(E) = \begin{cases} 2.43, & E \leq 1 \text{ eV}, \\ 2.35, & E > 1 \text{ eV}. \end{cases} \quad \nu = \begin{cases} 3 & \text{avec probabilité } \bar{\nu}(E) - 2, \\ 2 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les neutrons produits naissent **rapides** : leur énergie est tirée via un spectre de Watt, (échantillon en MeV multiplié par  $10^6$ ). Ils doivent ensuite être ralentis par diffusion pour revenir vers des énergies plus favorables aux fissions thermiques.

## VI.4 Diffusion élastique et ralentissement

Lorsqu'il n'y a **pas** fission, le neutron n'est **pas supprimé** : il est conservé et subit une diffusion élastique (que le contact soit sur  $^{235}\text{U}$  sans fission, ou sur  $^{238}\text{U}$ ). La perte d'énergie par collision est modélisée par :

$$E \leftarrow \eta E, \quad \eta \sim \mathcal{U}(0.983, 1.0).$$

Le ralentissement est donc **progressif** : chaque choc enlève peu d'énergie, mais leur accumulation fait évoluer la population vers des énergies plus basses.

## VI.5 Résultats et interprétation

La figure obtenue est cohérente avec le comportement attendu du modèle et met en évidence les conséquences directes des hypothèses physiques adoptées.

**Phase 1 — croissance initiale élevée** La montée très rapide au début provient des conditions initiales : les 1000 neutrons sont injectés directement à l'énergie thermique ( $E = 0,025 \text{ eV}$ ). Or, à cette énergie, la section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$  est élevée, ce qui **maximise artificiellement** la probabilité de fission dès les premières générations.

**Phase 2 — diffusion** Ensuite, la dynamique est dominée par les collisions élastiques des neutrons avec  $^{238}\text{U}$  lorsque la fission n'a pas lieu. Comme  $^{238}\text{U}$  est très massif, la perte d'énergie par choc est faible, donc la modération vers les énergies thermiques est lente et nécessite de nombreuses collisions. Cela explique une augmentation continue et relativement régulière, plutôt qu'une transition brutale.

**Phase 3 — croissance non bornée** La croissance soutenue sur le long terme ne traduit pas une supercriticalité réelle : elle vient du fait que le milieu est supposé **infini** (pas de fuite) et que le modèle néglige toute **absorption parasite définitive**. Ainsi, un neutron qui ne fissionne pas n'est jamais éliminé : il diffuse indéfiniment jusqu'à rencontrer  $^{235}\text{U}$  dans des conditions favorables, ce qui conduit à une accumulation progressive de neutrons.

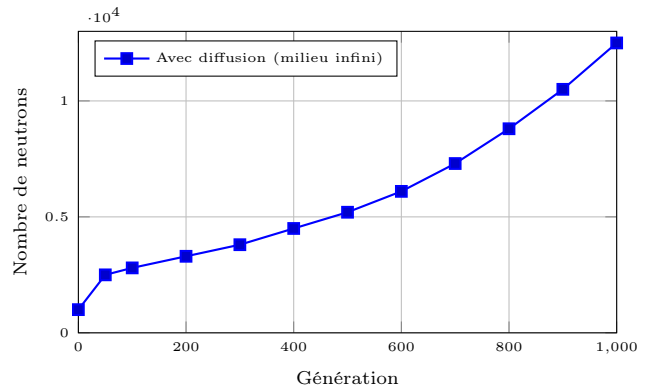


Figure 3: Population neutronique au cours des générations.

## Conclusion

Ce projet a débuté avec le modèle du TP (milieu infini, toute interaction avec  $^{235}\text{U} \Rightarrow$  fission, et 2 neutrons produits) afin de comprendre la transition sous-/critique/sur-critique. Ce cadre est très formateur, mais conduit à un seuil non réaliste ( $p_c = 0,5$ ), ce qui révèle immédiatement les limites des hypothèses.

Nous avons ensuite implémenté un modèle amélioré avec trois issues (fission, perte, diffusion) et une multiplicité aléatoire  $\nu \in \{1, 2, 3\}$ . En simulant des milliers de trajectoires, nous avons estimé la durée moyenne avant extinction en fonction de  $p$ . Cette étape met en évidence un point clé : près de la criticité, les chaînes deviennent longues,  $Z_g$  peut croître fortement, et le coût de calcul augmente très vite, ce qui impose en pratique un plafond de simulation  $T_{\max}$ .

Enfin, nous avons codé un modèle plus physique où chaque neutron porte une énergie  $E$ , et où les probabilités de fission/diffusion sont déduites de sections efficaces  $\sigma_f(E)$ ,  $\sigma_c(E)$ ,  $\sigma_s(E)$  dans un milieu infini d'uranium, avec diffusion élastique majoritairement sur  $^{238}\text{U}$  et neutrons de fission tirés selon un spectre de Watt. La croissance soutenue obtenue dans ce dernier cadre ne doit pas être interprétée comme une supercriticité de l'uranium : elle provient surtout de l'absence de fuites et d'absorptions parasites, ce qui oriente clairement les perspectives (géométrie finie, absorbeurs parasites explicites et maîtrise du temps de calcul).

## Bibliographie

- J. Durkee, *Analytic and Monte Carlo random walk assessments of neutron fission chains*, Progress in Nuclear Energy, 2021.
- J. Durkee, *Neutron fission chain behavior for modern  $^{235}\text{U}$  multiplicity data*, Progress in Nuclear Energy, 2024.
- G. Jones et al., *Mathematical and computational models for transient criticality excursions*, Annals of Nuclear Energy, 2021.
- G. Winter et al., *A semi-empirical model of radiolytic gas bubble formation and evolution*, Annals of Nuclear Energy 2022.
- A. Paxton et al., *A computational framework to support probabilistic criticality modelling for the geological disposal of radioactive waste*, Annals of Nuclear Energy, 2025.
- Y. Nagaya, *Review of JAEA's Monte Carlo codes for nuclear reactor core analysis*, EPJ Nuclear Sciences & Technologies, 2025.
- Y. Nomura & H. Okuno, *Simplified evaluation models for criticality accidents*, Nuclear Technology, 1993–2004.