

# 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 retenter 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.

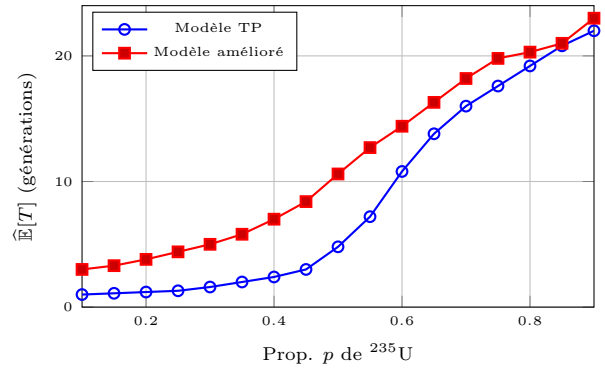


Figure 1: Comparaison des modèles.

## VI — Modèle plus physique : énergie, capture et diffusion inélastique

### 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 fixes. Ici, on relie ces probabilités à la **physique microscopique**. Chaque neutron porte une énergie  $E$ , et les probabilités de réaction dépendent des sections efficaces  $\sigma(E)$  (interpolées depuis les données ENDF). On simule un milieu infini d'uranium naturel :

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

### VI.2 Probabilités d'interaction complètes

Contrairement au modèle simplifié, un neutron a désormais quatre destins possibles à chaque interaction, dont la somme des probabilités vaut 1 :

- **Fission** ( $n, f$ ) : Production de nouveaux neutrons (principalement sur  $^{235}\text{U}$  à basse énergie).
- **Capture Radiative** ( $n, \gamma$ ) : Le neutron est absorbé et disparaît sans produire de descendants. C'est le mécanisme de « mort » principal.
- **Diffusion Inélastique** ( $n, n'$ ) : Le neutron perd une grande quantité d'énergie (excitation du noyau cible).
- **Diffusion Élastique** ( $n, n$ ) : Simple rebond, perte d'énergie faible.

Les probabilités microscopiques sont calculées à chaque pas selon l'énergie  $E$  du neutron et le noyau rencontré (tiré selon les sections macroscopiques  $\Sigma_{\text{tot}}$ ).

## VI.3 Fission : multiplicité et spectre de Watt

Lorsqu'une fission a lieu, la multiplicité  $\nu$  suit une loi probabiliste basée sur les moyennes physiques (ex:  $\bar{\nu} \approx 2.43$ ). Point crucial : les neutrons naissent **rapides** (énergie moyenne  $\approx 2$  MeV) suivant une distribution de Watt. Pour provoquer de nouvelles fissions sur  $^{235}\text{U}$ , ils doivent être ralentis (thermalisés).

## VI.4 Ralentissement et Captures Résonantes

Le destin du neutron dépend de la façon dont il perd son énergie :

- **Hautes énergies ( $> 0.1$  MeV)** : Le choc avec  $^{238}\text{U}$  est souvent *inélastique*. Le neutron perd brutalement son énergie, tombant dans le domaine des keV.
- **Domaine des résonances (10 eV - 1 keV)** : C'est la « zone de danger ». En ralentissant par chocs élastiques successifs, le neutron traverse cette zone où la section efficace de capture  $\sigma_c$  de  $^{238}\text{U}$  est immense.

## VI.5 Résultats et interprétation physique

La simulation réalisée avec 1000 neutrons initiaux montre une évolution radicalement différente du modèle simplifié, caractérisée par un facteur de multiplication effectif moyen de :

$$k_{eff} \approx 0.9833 < 1$$

L'évolution temporelle (Fig. 2) s'explique en deux phases :

**1. Le Pic Initial (Transitoire)** La montée brutale au début est artificielle. Nous avons injecté les neutrons initiaux à l'énergie thermique (0.025 eV). À cette énergie, la section efficace de fission de  $^{235}\text{U}$  est maximale ( $\approx 584$  barns), provoquant une flambée immédiate de fissions.

**2. L'Extinction (Régime Asymptotique)**

Une fois la première génération passée, les nouveaux neutrons naissent rapides (MeV). Pour causer une fission, ils doivent ralentir. Cependant, dans l'uranium naturel pur (sans modérateur comme l'eau), la majorité des neutrons sont **capturés par les résonances de  $^{238}\text{U}$**  avant d'atteindre l'énergie thermique. Le système est physiquement **sous-critique**. La population décroît exponentiellement jusqu'à extinction, ce qui valide la cohérence physique du modèle (contrairement à la croissance infinie du modèle précédent).

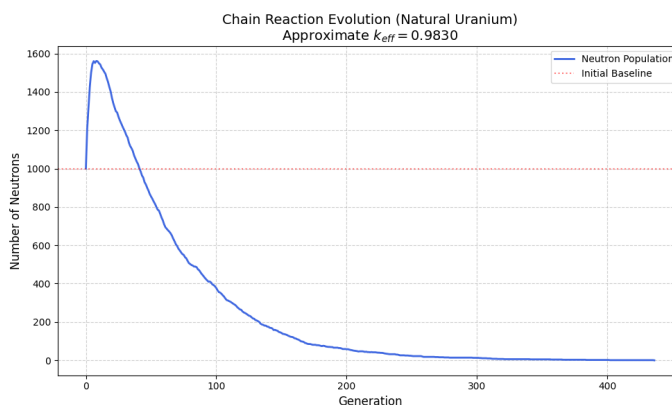


Figure 2: Évolution de la population (Simulation Physique).

## Conclusion

Ce projet a permis de construire progressivement un simulateur Monte-Carlo de transport neutronique. Partant d'un modèle mathématique simplifié (milieu infini, probabilités fixes) qui prédisait une criticité irréaliste à  $p = 0.5$ , nous avons abouti à un modèle physique complet intégrant les spectres d'énergie et les sections efficaces nucléaires (ENDF).

Les résultats finaux démontrent que l'uranium naturel enrichi à 0.7% est intrinsèquement **sous-critique** ( $k_{eff} \approx 0.98$ ) en l'absence de modérateur. L'introduction de la *diffusion inélastique* et de la *capture radiative* a permis de reproduire l'effet d'étouffement de la réaction par le  $^{238}\text{U}$  (captures résonantes). Ce travail illustre la nécessité des modérateurs dans les réacteurs thermiques et la puissance des méthodes de Monte-Carlo pour résoudre des problèmes intégraux complexes où l'intuition analytique ne suffit plus.

## 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.